

PHƯƠNG PHÁP TOÁN TỬ FK GIẢI PHƯƠNG TRÌNH SCHRÖDINGER CHO NGUYÊN TỬ HYDRO

BÙI NGUYỄN NGỌC THÚY*, NGUYỄN ĐÌNH LUẬT**,
NGUYỄN VĂN HOA***, CAO HỒ THANH XUÂN****, LÊ VĂN HOÀNG*****

TÓM TẮT

Phương pháp toán tử FK với phép biến đổi Laplace được sử dụng cho bài toán nguyên tử hydro. Các mức năng lượng được tính chính xác bằng số tới bậc tùy ý theo sơ đồ vòng lặp và được so sánh với kết quả chính xác. Kết quả này cho thấy triển vọng ứng dụng phương pháp toán tử FK cho các bài toán hệ nguyên tử.

Từ khóa: phương pháp toán tử FK, phương trình Schrodinger, nguyên tử hydro.

ABSTRACT

The FK operator method for solving Schrödinger equation of hydrogen atom

The FK operator method is used with the Laplace transformation for solving the hydrogen atom problem. Energy levels are calculated exactly by numbers with any given precisions after an iteration scheme and compared that allow us to obtain exact solutions. These results unveil the prospect to apply the FK operator method to atomic systems.

Keywords: FK operator method, Schrodinger equation, hydrogen atom.

1. Mở đầu

Bài toán nguyên tử hydro đã có lời giải chính xác nên đó là một mô hình lí tưởng cho việc kiểm chứng hiệu quả của các phương pháp gần đúng giải phương trình Schrödinger [4, 7, 8]. Kể từ những năm 1970, đã có rất nhiều nghiên cứu với nhiều phương pháp khác nhau như sử dụng phương pháp biến phân [4], gần đúng Hartree-Fock [8], giải trực tiếp phương trình Schrödinger bằng phương pháp số [7] cho nguyên tử hydro trong từ trường. Phương pháp toán tử được đưa ra đầu tiên vào năm 1982 bởi một nhóm các giáo sư ở trường đại học Belarus [5] và được ứng dụng thành công cho một nhóm rộng rãi các bài toán trong lí thuyết trường cũng như vật lí chất rắn, vật lí nguyên tử [6]. Phương pháp toán tử với các tính toán thuần đại số xây dựng cho nhóm các bài toán vật lí nguyên tử đang là phương pháp có tính thời sự [1, 2]. Do vậy, sử dụng bài toán nguyên tử hydro để kiểm nghiệm hiệu quả của phương pháp toán tử FK sẽ có ý nghĩa quan trọng cho việc vận dụng sau này vào các bài toán nguyên tử phức tạp hơn.

* HVCH, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG TP HCM

** HVCH, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG TP HCM

*** TS, Trường Đại học Sư phạm TP HCM

**** ThS, Trường Cao đẳng Nông nghiệp Nam Bộ, thành phố Mỹ Tho, Tiền Giang

***** PGS TSKH, Trường Đại học Sư phạm TP HCM

Một trong các khó khăn khi vận dụng phương pháp toán tử cho bài toán nguyên tử chính là thành phần tương tác Coulomb có các biến số nằm trong mẫu số. Trong công trình [2], khó khăn này được giải quyết bằng cách sử dụng phép biến đổi Kustaanheimo-Stiefel để đưa bài toán về không gian bốn chiều. Tuy nhiên, chính phép biến đổi này đã làm phát sinh những khó khăn khác khi giải bài toán, đó là làm cho nó khó phát triển cho các trạng thái kích thích và phát triển cho bài toán nguyên tử nhiều điện tử. Do đó, trong công trình này chúng tôi sử dụng phép biến đổi Laplace để vượt qua khó khăn nêu trên khi vận dụng phương pháp toán tử FK.

Chúng tôi sẽ sử dụng sơ đồ vòng lặp để tính bổ chính bậc cao nhằm thu được lời giải chính xác bằng số. Để minh họa, chúng tôi đưa ra kết quả cho trạng thái cơ bản và một vài mức kích thích của nguyên tử hydro. Kết quả sẽ so sánh với nghiệm chính xác giải tích để thấy được độ tin cậy của phương pháp toán tử FK.

2. Bộ hàm cơ sở dưới biểu diễn đại số

Ta định nghĩa các toán tử

$$\hat{a}_j = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(x_j + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \right), \quad \hat{a}_j^+ = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(x_j - \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \right), \tag{1}$$

thỏa mãn các hệ thức giao hoán

$$[\hat{a}_j, \hat{a}_k^+] = \delta_{jk}. \tag{2}$$

trong đó $j, k = 1, 2, 3$ tương ứng với 3 trục Ox, Oy, Oz; ω là tham số thực dương. Để tiện sử dụng ta kí hiệu:

$$\hat{A} = \hat{a}_j \hat{a}_j, \quad \hat{A}^+ = \hat{a}_j^+ \hat{a}_j^+, \quad \hat{N} = 2\hat{a}_j^+ \hat{a}_j + 3 \tag{3}$$

với sự lặp lại hai chỉ số có nghĩa là lấy tổng trên toàn miền thay đổi chỉ số $j = 1, 2, 3$. Dễ dàng kiểm chứng các giao hoán tử sau:

$$[\hat{A}, \hat{A}^+] = 2\hat{N}, \quad [\hat{A}, \hat{N}] = 4\hat{A}, \quad [\hat{N}, \hat{A}^+] = 4\hat{A}^+. \tag{4}$$

Bây giờ ta đi xây dựng một bộ hàm sóng cơ sở để sử dụng cho phương pháp toán tử FK. Ta có thể sử dụng bộ hàm của dao động tử điều hòa 3 chiều với trạng thái chuẩn như sau:

$$|n_1, n_2, n_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{(2n_1)!(2n_2)!(2n_3)!}} \hat{a}_1^{+2n_1} \hat{a}_2^{+2n_2} \hat{a}_3^{+2n_3} |0\rangle. \tag{5}$$

Do bài toán có tính đối xứng cầu và bảo toàn đại lượng bình phương mô-men quỹ đạo cũng như hình chiếu mô-men quỹ đạo nên ta cần xây dựng bộ hàm cơ sở thỏa mãn các phương trình:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 |n, l, m\rangle &= l(l+1) |n, l, m\rangle, \\ \hat{L}_Z |n, l, m\rangle &= m |n, l, m\rangle, \end{aligned} \tag{6}$$

trong đó các toán tử \hat{L}^2, \hat{L}_z biểu diễn qua các toán tử sinh hủy có dạng:

$$\hat{L}^2 = -\hat{A}^+ \hat{A} + \frac{1}{4} \hat{N}^2 - \hat{N} + \frac{3}{4}, \quad \hat{L}_z = i(\hat{a}_2^+ \hat{a}_1 - \hat{a}_1^+ \hat{a}_2) \quad (7)$$

Trong bài báo này, chúng tôi chỉ giới hạn xét các trạng thái không có mô-men động lượng quỹ đạo và hình chiếu nên chọn $l = 0, m = 0$. Từ (5) ta xây dựng bộ hàm thỏa mãn (6) với trị riêng bằng zero như sau:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{(2n+1)!}} (\hat{A}^+)^n |0\rangle \quad (8)$$

Đây chính là bộ hàm cơ sở cần tìm. Bộ hàm này đã được chuẩn hóa.

3. Phương pháp toán tử cho bài toán nguyên tử hydro

Phương trình Schrödinger của nguyên tử hydro theo hệ đơn vị nguyên tử

$$\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots,$$

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{Z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (9)$$

trong đó Z là điện tích hạt nhân. Ở đây, ta xét trạng thái liên kết cho nên năng lượng gián đoạn và âm.

Trong hình thức luận toán tử sinh hủy thành phần động năng có dạng:

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{1}{4} \omega (\hat{A}^+ + \hat{A} - \hat{N}). \quad (10)$$

Thành phần thế năng biểu diễn qua phép biến đổi Laplace

$$-\frac{Z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = -\frac{Z}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} dt \frac{1}{\sqrt{t}} e^{-t(x^2 + y^2 + z^2)} = -\frac{Z}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} dt \frac{1}{\sqrt{t}} e^{-\frac{t}{2\omega}(\hat{A}^+ + \hat{A} + \hat{N})} \quad (11)$$

Vì các toán tử (3) tạo thành đại số kín theo các hệ thức giao hoán (4) ta có thể đưa thành phần có dạng hàm mũ trong (11) về dạng chuẩn và khai triển theo chuỗi Taylor, Hamiltonian \hat{H} trở thành [1]:

$$\hat{H} = -\frac{1}{4} \omega (\hat{A}^+ + \hat{A} - \hat{N}) - \frac{\sqrt{2\omega Z}}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(-1)^{j+k}}{j!k!} \int_0^{+\infty} dt \frac{t^{j+k-1/2}}{(1+2t)^{j+k}} \hat{A}^{+j} e^{\frac{1}{2}\hat{N}\ln(1+2t)} \hat{A}^k. \quad (12)$$

Sử dụng tư tưởng phương pháp toán tử FK ta tách toán tử Hamiltonian (12) thành hai thành phần:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}. \quad (13)$$

Phần ‘trung hòa’ có dạng như sau:

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{4} \omega \hat{N} - \frac{Z\sqrt{\omega}}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{2^{-2j}}{(j!)^2} \int_0^{+\infty} dt \frac{t^{2j-1/2}}{(1+t)^{2j}} \hat{A}^{+j} e^{-\frac{1}{2} \hat{N} \ln(1+t)} \hat{A}^j, \quad (14)$$

trong đó các số hạng chứa số thừa số các toán tử sinh, hủy bằng nhau. Còn toán tử “nhiều loạn” \hat{V} có dạng:

$$\hat{V} = -\frac{1}{4} \omega (\hat{A}^+ + \hat{A}) - \frac{Z\sqrt{\omega}}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{k=0, k \neq j}^{+\infty} \frac{(-1)^{k+j}}{i! j! 2^{k+j}} \int_0^{+\infty} dt \frac{t^{k+j-1/2}}{(1+t)^{k+j}} \hat{A}^{+j} e^{-\frac{1}{2} \hat{N} \ln(1+t)} \hat{A}^k. \quad (15)$$

Ta tính được các yếu tố ma trận $H_{kk} = \langle k | \hat{H}_0 | k \rangle$ và $V_{jk} = \langle j | \hat{V} | k \rangle$:

$$H_{kk} = \frac{1}{4} \omega (4k+3) - \sqrt{\omega} \frac{Z}{\sqrt{\pi}} \left\{ \frac{2^{2k+1} (2k)!}{(4k+1)!!} + \sum_{j=1}^k \frac{(2k+1)! (4j-1)!!}{(j!)^2 (4k+1)!!} \frac{2^{2k-4j+1}}{2k-2j+1} \right\}, \quad (16)$$

$$V_{jk} = -\frac{1}{4} \omega (\sqrt{2j(2j+1)} \delta_{k,j-1} + \sqrt{(2j+2)(2j+3)} \delta_{k,j+1}) - \frac{Z\sqrt{\omega}}{\sqrt{\pi}} \sum_{\substack{l=0(k < j) \\ l=k-j(k > j)}}^k (-1)^{j-k} 2^{3k-j-4l+1} \frac{(2j-2k+4l-1)!! \sqrt{(2k+1)!(2j+1)!}}{l!(2k+2j+1)!(j-k+l)!(2k-2l+1)}. \quad (17)$$

4. Lí thuyết nhiễu loạn cho bài toán nguyên tử hydro trong phương pháp toán tử

4.1. Sơ đồ Rayleigh – Schrödinger cho phương pháp nhiễu loạn dừng

Ta kí hiệu $\Delta E_n^{(s)}$, $\Delta C_j^{(s)}$ là các bổ chính năng lượng bậc s và hệ số hàm sóng tương ứng. Ta có:

$$\Delta E_n^{(s)} = \sum_{k=0(k \neq n)}^{+\infty} V_{nk} \Delta C_k^{(s-1)}, \quad (18)$$

$$\Delta C_j^{(s)} = \frac{1}{E_n^{(0)} - H_{jj}} \left(\sum_{k=0(k \neq n)}^{+\infty} V_{jk} \Delta C_k^{(s-1)} - \sum_{t=1}^{s-1} \Delta E_n^{(s-t)} \Delta C_j^{(t)} \right), \quad (j \neq n) \quad (19)$$

Công thức (18) và (19) là sơ đồ lí thuyết nhiễu loạn, ta sẽ sử dụng trong các phần sau.

4.2. Nghiệm của bài toán nguyên tử hydro theo sơ đồ lí thuyết nhiễu loạn

Trong phần này, chúng tôi sử dụng sơ đồ lí thuyết nhiễu loạn (18)-(19) để tính đến bổ chính bậc 3 cho các trạng thái cơ bản và một số trạng thái kích thích. Bảng 1 cho trạng thái cơ bản cho thấy phương pháp toán tử với sơ đồ lí thuyết nhiễu loạn nhìn chung cho kết quả rất chính xác (dưới 1%) khi ta chọn giá trị ω thích hợp gần với giá trị cực tiểu hóa năng lượng cơ bản ($\omega = 0.597705$). Khi so sánh chúng tôi nhận thấy kết quả đã trình bày tốt hơn kết quả trong tài liệu [1], [3]. Điều này cho thấy triển vọng của phương pháp khi ứng dụng cho các bài toán phi nhiễu loạn. Ngoài ra, giá trị bổ chính bậc ba nhỏ hơn so với giá trị bổ chính bậc hai chứng tỏ chuỗi các bậc bổ chính là hội tụ

và ta hi vọng có thể tính chính xác đến bậc tùy ý [3]. Nếu tiếp tục thêm vào các giá trị bổ chính bậc cao hơn, ta có thể thu được giá trị mức năng lượng cơ bản của nguyên tử hydro theo phương pháp toán tử chính bằng giá trị thu được trong bài toán giải chính xác [1], [3].

Bảng 2 cho mức năng lượng kích thích thứ nhất bằng phương pháp toán tử với sơ đồ lý thuyết nhiễu loạn, chúng tôi nhận thấy kết quả tương đối phù hợp với kết quả chính xác (sai số dưới 2.6%).

Bảng 1. Mức năng lượng cơ bản của nguyên tử hydro tính đến bổ chính bậc 3 theo sơ đồ lý thuyết nhiễu loạn khi chọn các giá trị khác nhau của tham số ω

ω	Năng lượng	Sai số tương đối	Tài liệu [1]		Tài liệu [3]	
			Năng lượng	Sai số tương đối	Năng lượng	Sai số tương đối
0.200000	-0.474594	5.08%	-0.495110	0.98%	-0.503036	0.61%
0.300000	-0.503036	0.61%				
0.590000	-0.499602	0.07%				
0.597705	-0.499725	0.05%				

Bảng 2. Mức năng lượng kích thích thứ nhất của nguyên tử hydro tính đến bổ chính bậc ba theo sơ đồ lý thuyết nhiễu loạn

ω	Mức năng lượng E_1	Sai số tương đối
0.299999	-0.121721	2.6%
0.300000	-0.122168	2.2%
0.311000	-0.123929	0.85%

Bảng 3. Mức năng lượng kích thích thứ hai của nguyên tử hydro tính đến bổ chính bậc ba theo lý thuyết nhiễu loạn

ω	Mức năng lượng E_2	Sai số tương đối
0.009990	-0.055302	0.45%
0.009995	-0.055138	0.75%
0.009997	-0.055427	0.23%

Như vậy, khi sử dụng phương pháp toán tử kết hợp với sơ đồ lý thuyết nhiễu loạn, ta đã sử dụng bộ hàm cơ sở của dao động tử điều hòa, từ đó thu được các mức năng lượng của nguyên tử hydro với kết quả rất chính xác tính đến bậc ba. Giá trị bậc ba nhỏ hơn nhiều giá trị bậc hai chứng tỏ chuỗi các bậc bậc ba là có thể hội tụ và ta hi vọng có thể tính chính xác các mức năng lượng đến bậc tùy ý. Tuy nhiên, sơ đồ lý thuyết nhiễu loạn cũng bộc lộ một số hạn chế như tính hội tụ của chuỗi nhiễu loạn chưa cao, chưa được lợi nhiều về thời gian và việc khảo sát miền hội tụ của tham số tự do ω vẫn chưa được giải quyết hợp lý. Hơn nữa, với sơ đồ lý thuyết nhiễu loạn, ta không thể xác định trước bậc nhiễu loạn cần tính theo sai số mong muốn. Tiếp theo sau chúng tôi sử dụng sơ đồ vòng lặp.

5. Các mức năng lượng của nguyên tử hydro theo sơ đồ vòng lặp

5.1. Sơ đồ vòng lặp

Hàm sóng $|\varphi_n\rangle$ được biểu diễn qua bộ hàm đủ, trực giao, chuẩn hóa $|n\rangle$:

$$|\varphi_n\rangle = |n\rangle + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq n}}^{+\infty} C_k |k\rangle \tag{20}$$

Theo sơ đồ vòng lặp [2] ta có hàm sóng gần đúng ở vòng lặp thứ (s) ứng với năng lượng gần đúng $E_n^{(s)}$ như sau:

$$|\varphi_n^{(s)}\rangle = |n\rangle + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq n}}^{n+s} C_k^{(s)} |k\rangle. \tag{21}$$

Trong (21) các hệ số khai triển $C_k^{(s)}$ của hàm sóng và giá trị năng lượng $E_n^{(s)}$ có thể tính số theo sơ đồ theo công thức truy hồi sau:

$$E_n^{(s)} = H_{nn} + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq n}}^{n+s} C_k^{(s)} V_{nk},$$

$$C_k^{(s)} = \frac{V_{kn} + \sum_{m=0, m \neq k, m \neq n}^{n+s} C_m^{(s-1)} V_{km}}{E_n^{(s)} - H_{kk}}, \tag{22}$$

5.2. Nghiệm chính xác bằng số của bài toán nguyên tử hydro theo sơ đồ vòng lặp

Lập trình tính toán trên FORTRAN 9.0 theo sơ đồ (22) với các yếu tố ma trận (16)-(17) ta thu được mức năng lượng cơ bản E_0 của nguyên tử hidro. Chọn sai số tương đối là 10^{-6} và giá trị thông số tự do $\omega = 0.5$ gần với giá trị cực tiểu hóa năng lượng cơ bản của thành phần trung hòa trong Hamiltonian, thì số vòng lặp tương ứng là $s = 1528$. Kết quả được so sánh với kết quả trong tài liệu [1] và phù hợp với lời giải chính xác được trình bày trong bảng 4. Trong đó, cột thứ hai là số vòng lặp tương ứng.

Bảng 4. Mức năng lượng cơ bản của nguyên tử hidro theo sơ đồ vòng lặp

ω	s	E_0	Tài liệu [2]
0.5	1528	-0.499990	- 0.499990

Như vậy, ta thấy phương pháp toán tử với sơ đồ vòng lặp cho ta hội tụ đến kết quả chính xác, cụ thể là với 1528 vòng lặp ta có năng lượng chính xác đến năm chữ số sau dấu phẩy $E_0 = -0.499990$. Tuy số vòng lặp lớn nhưng số lượng tính toán ít hơn khi sử dụng sơ đồ lí thuyết nhiễu loạn là vì với mỗi bậc nhiễu loạn ta đều có tổng vô hạn và tốc độ hội tụ của các tổng đó cũng không cao.

Tham số tự do ω rất quan trọng trong việc nâng cao tốc độ hội tụ đến nghiệm chính xác khi sử dụng phương pháp toán tử với trong sơ đồ vòng lặp. Qua khảo sát bằng tính số, miền hội tụ của thông số tự do đối với mức đối với mức năng lượng cơ bản là $\omega < 6$. Như vậy, ta dễ dàng chọn được giá trị ω thích hợp để bài toán cho nghiệm chính xác bằng số. Đây là ưu điểm của sơ đồ vòng lặp so với sơ đồ lí thuyết nhiễu loạn vì với lí thuyết nhiễu loạn, việc lựa chọn tham số ω thích hợp khá khó khăn, thông thường giá trị ω phải gần với giá trị cực tiểu hóa năng lượng. Ngoài ra, khi so sánh với sơ đồ lí thuyết nhiễu loạn, sơ đồ vòng lặp giúp chúng tôi khảo sát miền hội tụ của tham số tự do ω một cách dễ dàng qua việc tính số trên máy tính.

Khảo sát tính số cho thấy sơ đồ vòng lặp giúp chúng ta tiết kiệm tài nguyên tính toán hơn lí thuyết nhiễu loạn khá nhiều và rất lợi về thời gian cũng như tốc độ tính toán (sơ đồ lí thuyết nhiễu loạn cho kết quả lâu hội tụ hơn, thời gian tính toán lâu hơn so với sơ đồ vòng lặp khá nhiều với cùng một sai số tương đối). Ngoài ra, khác với sơ đồ lí thuyết nhiễu loạn, khi tính số theo sơ đồ vòng lặp giá trị sai số được chọn ngay từ đầu và nghiệm năng lượng thu được tốt hơn nhiều so với sơ đồ lí thuyết nhiễu loạn.

Cuối cùng, khi lấy sai số tương đối nhỏ hơn ta sẽ thu được nghiệm của bài toán cho các mức năng lượng dần đến kết quả chính xác. Kết quả các mức năng lượng có thể tính đến bất kỳ bậc nào và hội tụ đến giá trị với độ chính xác cho trước nên ta gọi là nghiệm chính xác bằng số. Đây là ưu điểm nổi bật của sơ đồ vòng lặp so với sơ đồ lí thuyết nhiễu loạn.

Ta chọn các số lượng tử l, m bằng 0 để tính các mức năng lượng kích thích. Khi đó bộ hàm $\{|n00\rangle\}$ hợp thành một không gian Hilbert và bài toán có thể đưa về nhiễu loạn không suy biến. Khác với sơ đồ lí thuyết nhiễu loạn, sơ đồ vòng lặp cho phép ta xác định trước sai số tương đối cho kết quả. Từ đây, để tính các mức năng lượng kích thích ta chọn sai số tương đối là 10^{-6} . Bảng 5 cho năng lượng của trạng thái kích thích thứ nhất.

Bảng 5. Mức năng lượng kích thích thứ nhất của nguyên tử hydro theo sơ đồ vòng lặp với các giá trị khác nhau của thông số tự do ω

ω	s	E_1
0.1	1682	-0.124990
0.2	926	-0.124990
0.3	629	-0.124990
0.4	473	-0.124990

Bảng 5 ta thấy các giá trị số vòng lặp trong cột thứ hai tương ứng với giá trị thông số tự do ω được chọn là khác nhau cho thấy vai trò của tham số tự do trong quá trình tính số. Qua khảo sát bằng tính số, miền hội tụ của thông số tự do đối với mức kích thích thứ nhất là $\omega < 0.45$. Như vậy với mọi giá trị ω thỏa mãn $\omega < 0.45$ đều cho kết quả mức năng lượng kích thích thứ nhất có giá trị gần với giá trị chính xác với sai số rất nhỏ cho trước là 10^{-6} .

Bảng 6. Mức năng lượng kích thích thứ hai của nguyên tử hydro theo sơ đồ vòng lặp

ω	s	E_2
0.05	2482	-0.055550
0.06	2047	-0.055550
0.07	1726	-0.055550
0.08	1496	-0.055550
0.09	1003	-0.055550

Bây giờ ta xét đến mức kích thích thứ hai. Qua khảo sát bằng tính số, miền hội tụ của thông số tự do ω đối với mức kích thích thứ hai là $\omega < 0.1$. Như vậy, với mọi giá trị ω thỏa mãn $\omega < 0.1$ đều cho kết quả mức năng lượng kích thích thứ hai có giá trị gần với giá trị chính xác với sai số rất nhỏ cho trước là 10^{-6} .

6. Kết luận

Thứ nhất, phương pháp toán tử kết hợp phép biến đổi Laplace và sơ đồ vòng lặp ứng dụng cho việc giải phương trình Schrödinger cho nguyên tử hydro cho phép ta thu được trị riêng chính xác bằng số và việc tính số có tốc độ hội tụ cao. *Thứ hai*, kết quả thu được về mức năng lượng cơ bản, mức năng lượng kích thích thứ nhất và thứ hai của nguyên tử hydro cho phép ta khẳng định tính đúng đắn của phương pháp toán tử. Vì cách giải rất tổng quát, không cần tính đến đặc điểm riêng của Hamiltonian nên ta hi vọng kết luận này áp dụng tốt cho các bài toán nguyên tử khác. Như vậy, phương pháp toán tử theo sơ đồ vòng lặp là một phương pháp đáng tin cậy. *Thứ ba*, tham số tự do ω rất quan trọng trong việc nâng cao tốc độ hội tụ đến nghiệm chính xác khi sử dụng phương pháp toán tử với sơ đồ vòng lặp. Qua khảo sát bằng tính số với sơ đồ vòng lặp, miền hội tụ của tham số tự do đối với mức năng lượng cơ bản là $\omega < 6$, mức kích thích

thứ nhất và thứ hai lần lượt là $\omega < 0.45$ và $\omega < 0.1$. Thứ tư, ưu điểm vượt trội của phương pháp toán tử chính là ở việc tách toán tử Hamilton thành hai thành phần khác hơn so với phương pháp nhiễu loạn truyền thống. Qua kết quả trên ta thấy mặc dù sử dụng tư tưởng của lý thuyết nhiễu loạn nhưng chúng ta không cần xét đến điều kiện áp dụng của lý thuyết nhiễu loạn vì cách tách toán tử Hamilton như trên luôn thỏa các điều kiện của lý thuyết nhiễu loạn và không phụ thuộc vào đặc điểm vật lý của hệ. Thứ năm, qua các kết quả đã khảo sát, chúng tôi nhận thấy phương pháp toán tử theo sơ đồ vòng lặp cho kết quả tốt hơn và có nhiều ưu điểm hơn sơ đồ lý thuyết nhiễu loạn trong phương pháp toán tử. Với cùng một sai số tương đối, khi sử dụng sơ đồ vòng lặp ta thu được kết quả có độ chính xác cao hơn sơ đồ lý thuyết nhiễu loạn. Thứ sáu, kết quả trên khẳng định có thể áp dụng phương pháp toán tử theo sơ đồ vòng lặp cho các bài toán phi nhiễu loạn của nguyên tử hydro trong trường ngoài như bài toán nguyên tử hydro trong từ trường, điện trường; bài toán phân tử nhiều nguyên tử hay bài toán tinh thể. Đây chính là ưu điểm của phương pháp toán tử theo sơ đồ vòng lặp.

Ghi chú: Công trình này là một phần nghiên cứu theo đề tài khoa học và công nghệ cấp cơ sở mã số CS.2011.19.54 do tác giả Nguyễn Văn Hoa là chủ nhiệm đề tài.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Nguyễn Phương Duy Anh (2010), “Phương pháp toán tử cho bài toán nguyên tử hydro trong từ trường có cường độ bất kỳ”, *Luận văn Thạc sĩ*, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên TP HCM.
2. Lê Văn Hoàng (2003), “Phương pháp đại số cho tính toán hệ nguyên tử”, *Tạp chí Khoa học Trường ĐHSPTPHCM*, (2), tr. 115-125.
3. Bùi Nguyễn Ngọc Thúy (2009), “Một số mức năng lượng bậc thấp của nguyên tử hydro theo phương pháp toán tử”, *Luận văn tốt nghiệp đại học*, Khoa Vật lý Trường ĐHSPTPHCM.
4. M. Bachmann, H. Kleinert, and A. Pelster (2000), “Variational approach to a hydrogen atom in a uniform magnetic field of arbitrary strength”, *Phys. Rev. A* **62**, 052509.
5. I. D. Feranchuk, L. I. Komarov (1982), “The operator method of approximate solution of the Schrödinger equation”, *Phys. Lett. A* **88**, pp. 212-214.
6. I. D. Feranchuk, A. A. Ivanov (2004), “Operator method for nonperturbative description of quantum systems”, *In Etude on Theor. Phys.*, Ed. Feranchuk I. et al, World Scientific, Singapore, pp. 171-188.
7. C. Stubbins, K. Das and Y. Shiferaw (2004), “Low-lying energy levels of the hydrogen atom in a strong magnetic field”, *J. Phys. B* **37**, pp. 2201-2209.
8. A. Thirumalai and Jeremy S. Heyl (2009), “Hydrogen atoms in strong magnetic fields”, *Phys. Rev. A* **79**, 012514.

(Ngày Tòa soạn nhận được bài: 29-12-2011; ngày chấp nhận đăng: 24-4-2012)