MỘT CÁCH NHÌN ĐẦY ĐỦ VỀ TOÁN TỬ SINH HỦY DIRAC VÀ ỨNG DỤNG CHO HỆ LƯỢNG TỬ TRONG MIỀN NĂNG LƯỢNG LIÊN TỤC

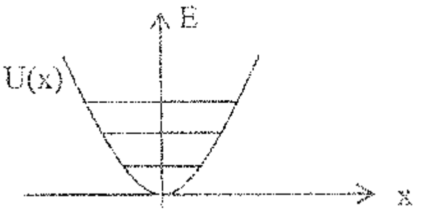
NGUYỄN NGỌC TY*, LÊ VĂN HOÀNG**

1. Mở đầu

Khi giải phương trình Schrödinger cho dao động tử điều hòa chúng ta có nghiệm toán học tổng quát, biểu diễn qua hàm siêu bội suy biến. Từ nghiệm toán học này chúng ta chọn ra hàm sóng vật lý thỏa mãn điều kiện hữu hạn và có giá trị bằng không ở vô cùng. Kết quả thu được là hàm sóng chứa những đa thức Hermite ứng với các mức năng lượng gián đoạn:

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{1}$$

Kết quả này có thể nhìn thấy một cách trực quan qua đồ thị (hình 1) sau.



Hình 1. *Đồ thị thế năng của dao động tử điều hòa*

Từ hình 1 ta thấy đây là dạng bài toán chuyển động trong hố thế sâu vô hạn. Hệ lượng tử thế này chỉ có thể có năng lượng gián đoạn và để có thể tồn tại ở vị trí vô cùng năng lượng của hệ cần lớn vô hạn. Do đó hàm sóng ở vô cùng có giá trị bằng zero. Đây là kết quả ta có thể tìm thấy trong bất kỳ cuốn sách giáo khoa nào về cơ học lượng tử [1]. Chúng ta cũng dễ dàng tìm thấy lời giải đại số rất đặc biệt cho bài toán dao động tử điều hòa, được Dirac đưa ra thông qua khái niệm toán tử sinh và toán tử hủy $\hat{a}^+$, $\hat{a}$. Các toán tử này được định nghĩa qua tọa độ và xung lượng như sau:

* Cán bộ Khoa Vật Lý ĐHSP Tp.HCM.
** TSKH Khoa Vật Lý ĐHSP Tp.HCM.

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,(x + \frac{1}{m\omega}i\hat{p}_x), \\ \hat{a}^+ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,(x - \frac{1}{m\omega}i\hat{p}_x) \end{aligned} \tag{2}$$

và thỏa mãn hệ thức giao hoán:

$$[\hat{a},\ \hat{a}^+] = 1. \tag{3}$$

Toán tử Hamilton của dao động tử điều hòa qua biểu diễn toán tử (2) có dạng:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega(2\hat{a}^+\hat{a}+1). \tag{4}$$

Từ đây có thể xây dựng hàm sóng của dao động tử điều hòa thông qua sự tác dụng của toán tử sinh hủy lên trạng thái chân không được định nghĩa bởi phương trình

$$\hat{a}|0\rangle = 0. \tag{5}$$

Thật vậy, chỉ cần sử dụng tính chất giao hoán (3) và định nghĩa chân không (5) ta dễ dàng thu được véctơ hàm sóng của dao động tử điều hòa dưới dạng sau:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n|0\rangle \tag{6}$$

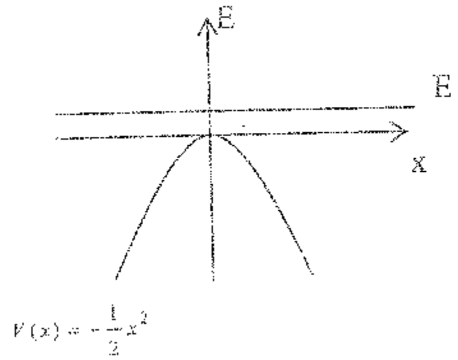
ứng với năng lượng gián đoạn E_n như công thức (1).

Cách giải đại số này rất hay, cho ra nghiệm đại số (6) rất thuận tiện trong tính toán. Tuy nhiên kết quả này cũng làm cho người đọc thắc mắc: để tìm ra nghiệm (6) chúng ta không sử dụng điều kiện vật lý để giới hạn hàm sóng như khi giải bằng phương pháp giải trực tiếp phương trình vi phân đạo hàm riêng. Véctơ trạng thái (6) khi đưa về tọa độ bình thường sẽ trùng với nghiệm chứa đa thức Hermite, thế thì nghiệm toán học tổng quát đâu rồi qua biểu diễn toán tử sinh hủy? Câu hỏi này cần được trả lời để phương pháp trên có thể sử dụng cho các bài toán khác, khi mà nghiệm vật lý chưa được nghiên cứu kỹ như đối với bài toán dao động tử điều hòa.

Trong công trình này, việc giải phương trình Schrödinger cho dao động tử điều hòa bằng phương pháp đại số như trên được xem xét một cách chặt chẽ. Từ đó xây dựng nghiệm tổng quát của bài toán có chứa nghiệm vật lý (6). Kết quả này được phát triển cho việc giải bài toán hạt chuyển động trong trường thế năng có dạng:

$$V(x) = -\frac{1}{2}m\omega^2x^2. \tag{7}$$

Từ đây về sau ta gọi thế năng (7) là thế "ngược" (xem hình 2). Dựa vào hình 2 ta thấy rằng đây là bài toán tán xạ và hạt chỉ có thể có năng lượng trong miền liên tục. Việc xây dựng hàm sóng dưới dạng đại số thông qua tác dụng của toán tử sinh lên trạng thái chân không sẽ có ý nghĩa rất quan trọng trong tính toán cụ thể. Một trong các ứng dụng của kết quả trên là xây dựng hàm sóng nguyên tử hydrô dưới dạng đại số không những trong miền năng lượng gián đoạn mà còn trong miền liên tục.



Hình 2. *Đồ thị thế năng "ngược"*

Nhờ vào phép biến đổi Kustaanheimo-Stiefel [2] quan hệ giữa dao động tử điều hòa với nguyên tử hydrô được nghiên cứu khá kỹ trong miền năng lượng gián đoạn [2-6]. Nhờ mối quan hệ này mà phương pháp đại số đã được xây dựng cho việc tính toán phức tạp nhiều đại lượng nguyên tử [7-11]. Trong công trình này mối liên hệ giữa miền năng lượng liên tục của nguyên tử hydro (bài toán tán xạ trên tâm Coulomb) với bài toán chuyển động hạt trong thế "ngược" được nghiên cứu. Từ đây xây dựng dạng đại số cho hàm sóng nguyên tử hydro trong miền năng lượng liên tục.

Gần đây bài toán iôn hóa nguyên tử hydro và các ion đồng dạng hydro hấp thụ nhiều photon rất được quan tâm [12-14]. Sự phát triển nghiên cứu trong lĩnh vực này liên quan đến các thành tựu mới trong kỹ thuật tạo nguồn ánh sáng kết hợp trong vùng tia X, như lazer trên điện tử tự do. Tiên đoán về quan sát các quá trình hấp thụ hai hay nhiều photon đối với các nguyên tử nặng có thể trở thành hiện thực trong một tương lai rất gần [15-16]. Theo quan điểm của tác giả, phương pháp đại số xây dựng ở đây sẽ được ứng dung trong các tính toán phức tạp cho các quá trình liên quan, khi trạng thái cuối cùng của nguyên tử nằm ở miền năng lượng liên tục. Bản thân hàm sóng của nguyên tử hydro trong miền liên tục đã được xây dựng qua biểu diễn tọa độ (xem [17]), ngoài ra nó còn được nghiên cứu qua phép biến đổi tọa độ KS trong các công trình của Barut A. O. [18], Kibler M. et al [19], được nghiên cứu tính chất đối xứng bằng phương pháp lý thuyết nhóm trong các công trình của Kleinert H. [20]. Tuy nhiên biểu diễn đại số xây dựng ở đây cho phép đưa các tính toán đồ sộ các tích phân của hàm đặc biệt về các phép biến đổi đại số đơn giản của các toán tử sinh hủy Dirac và cho phép sử dụng các chương trình tính toán trên biểu tượng như chương trình Mathematica [21].

2. Biện luận cho nghiệm đại số của bài toán dao động tử điều hòa

Như trình bày ở trên, khi tìm hàm sóng của dao động tử điều hòa qua biểu diễn đại số bằng toán tử sinh hủy Dirac, trong những tài liệu hiện có, không thấy sử dụng tính chất vật lý của hàm sóng để loại bỏ những nghiệm toán học như khi giải bằng phương pháp giải tích. Chúng ta sẽ chỉ ra các nghiệm còn bỏ sót và đưa ra các cơ sở biện luận để loại bỏ các nghiệm này.

Cơ sở thứ nhất: Cách định nghĩa trạng thái chân không như phương trình (5) không phải là duy nhất. Thật vậy, nếu như thay vì (5) ta định nghĩa trạng thái chân không bằng phương trình sau:

$$\hat{a}^{+}|0\rangle^{(-)} = 0 \tag{8}$$

thì bản thân trạng thái chân không này cũng như tất cả các trạng thái như sau

$$|n\rangle^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{n!}}a^{n}|0\rangle^{(-)} \tag{9}$$

đều là nghiệm riêng của Hamiltonian (4) ứng với giá trị riêng:

$$E_{-n} = -\frac{1}{2}\hbar\omega(2n+1)\,. \tag{10}$$

Dựa vào đồ thị thế năng (hình 1) ta thấy năng lượng của dao động tử điều hòa không thể có giá trị âm và ta có thể loại bỏ nghiệm này. Hoặc có thể lý luận như sau: nếu dạng tọa độ tường minh của trạng thái chân không (5) là:

$$|0\rangle = \pi^{-1/4}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^{2}} \tag{11}$$

thì trạng thái chân không (8) khi đưa về tọa độ có dạng như sau:

$$|0\rangle^{(-)} = \pi^{-1/4}e^{\frac{m\omega}{2\hbar}x^{2}}\,. \tag{12}$$

Rõ ràng hàm trạng thái trong trường hợp này không thỏa mãn điều kiện hữu hạn khi $x \to \pm\infty$ hay nói khác hơn ta có thể loại bỏ chúng.

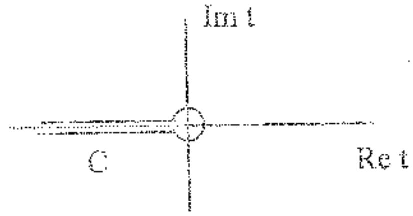
Cơ sở thứ hai: Khi đã xác định trạng thái chân không bằng phương trình (5) thì nghiệm (6) cũng không phải là duy nhất. Ta hãy cho toán tử sinh $\hat{a}^{+}$ tác dụng lên trạng thái chân không γ lần với γ không phải là số nguyên ta sẽ nhận được trạng thái sau:

$$|\gamma\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Gamma(\gamma+1)}}(\hat{a}^{+})^{\gamma}|0\rangle. \qquad (13)$$

Ở đây trong biểu thức (13), lũy thừa một toán tử với số mũ không là số nguyên được hiểu thông qua định nghĩa:

$$(\hat{a}^{+})^{\gamma} = \frac{\Gamma(\gamma+1)}{2\pi i}\oint_{C}\frac{e^{t\hat{a}^{+}}}{t^{\gamma+1}}dt \qquad (14)$$

với C là đường cong lấy tích phân như hình vẽ 3.



Hình 3. *Đường cong lấy tích phân.*

Ta hoàn toàn có thể chứng minh được (13) là hàm riêng của Hamiltonian (4) ứng với trị riêng $E_{\gamma} = \frac{1}{2}\hbar\omega(2\gamma+1)$. Như vậy đây cũng là một nghiệm toán học của bài toán dao động tử điều hòa. Nếu chuyển (14) về dạng tọa độ ta sẽ thấy nó là hàm siêu bội suy biến, thỏa mãn phương trình SchrÖdinger cho dao động tử điều hòa. Tuy nhiên nó chỉ có thể hữu hạn ở vô cùng khi γ là số nguyên không âm.Trong trường hợp này, nghiệm được tìm thấy tại trạng thái γ không thỏa mãn điều kiện gián đoạn của miền năng lượng, nghĩa là nó không phải là hàm sóng ứng với trạng thái vật lý của hệ. Mặc dù vậy, nó lại mở ra một hướng mới sử dụng phương pháp đại số cho các bài toán trong đó hệ có năng lượng trong miền liên tục.

3. Lời giải đại số cho bài toán có năng lượng liên tục

Ta xét chuyển động của hạt trong trường thế năng "ngược" có dạng (7). Đây là bài toán mà năng lượng của hệ chỉ có giá trị trong miền liên tục (xem hình 2). Toán tử Hamilton cho bài toán này có dạng:

$$\hat{H}_{C} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{2}m\omega^2x^2. \qquad (15)$$

Ta dễ dàng nhận thấy toán tử (15) trong bài toán mới giống như Hamiltonian của dao động tử điều hòa với tần số góc là số phức iω. Điều này gợi ý cho ta định nghĩa các toán tử sinh hủy như sau:

$$\hat{a}(\omega') = \sqrt{\frac{m\omega'}{2\hbar}}\left(x + \frac{1}{\omega'}\frac{d}{dx}\right), \quad \hat{a}^{+}(\omega') = \sqrt{\frac{m\omega'}{2\hbar}}\left(x - \frac{1}{\omega'}\frac{d}{dx}\right) \tag{16}$$

với $\omega' = i\omega$. Trong biểu diễn qua các toán tử (16), Hamiltonian (15) có dạng:

$$\hat{H}_C = \frac{1}{2}\hbar\omega'\left(2\hat{a}^{+}(\omega')\hat{a}(\omega') + 1\right). \tag{17}$$

Các toán tử (16) cũng thỏa mãn hệ thức giao hoán (3), và như vậy tương tự như bài toán dao động tử điều hòa ta có thể xây dựng hàm riêng của Hamiltonian (17) như sau:

$$|\gamma\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Gamma(\gamma+1)}}\left(\hat{a}^{+}(\omega')\right)^{\gamma}|0(\omega')\rangle \tag{18}$$

ứng với năng lượng $E_\gamma = \frac{1}{2}i\,\omega(2\gamma+1)$. Vì năng lượng là số thực suy ra hệ số γ là số phức, được xác định như sau: $\gamma = \frac{2iE + \omega}{2\omega}$. Chúng ta thấy trong biểu thức hàm sóng (18) cả trạng thái chân không và cả các toán tử sinh hủy đều được định nghĩa qua hệ thức (16). Trong thực tế ta có thể chuyển về trạng thái chân không cũng như các toán tử sinh hủy của dao động tử điều hòa có tần số góc ω. Thật vậy, có thể xây dựng phép biến đổi sau:

$$\begin{aligned}
&\hat{a}(\omega') = \hat{R}(\omega',\omega)\,\hat{a}(\omega)\,\hat{R}^{-1}(\omega',\omega) \\
&\hat{a}^{+}(\omega') = \hat{R}(\omega',\omega)\,\hat{a}^{+}(\omega)\,\hat{R}^{-1}(\omega',\omega) \\
&|0(\omega')\rangle = \hat{R}(\omega',\omega)|0(\omega)\rangle,
\end{aligned} \tag{19}$$

trong đó $\hat{R}(\omega',\omega)$ có dạng:

$$\hat{R}(\omega',\omega) = \exp\left\{\frac{1}{4}\ln\frac{\omega}{\omega'}\left[(\hat{a}^{+}(\omega))^2 - \hat{a}^2(\omega)\right]\right\}.$$

Để có thể sử dụng trong các tính toán đại số dựa vào các hệ thức giao hoán (3) và định nghĩa chân không (5) trong phụ lục A1 ta đưa $\hat{R}(\omega',\omega)$ về dạng chuẩn như sau:

$$\hat{R}(\omega',\omega)=\sqrt{\frac{2\sqrt{\omega\omega'}}{\omega+\omega'}}\exp\left\{\frac{\omega-\omega'}{2(\omega+\omega')}\hat{a}^{+2}(\omega)\right\}\exp\left\{\ln\frac{2\sqrt{\omega\omega'}}{\omega+\omega'}\hat{a}^{+}(\omega)\hat{a}(\omega)\right\}$$

$$\times\exp\left\{-\frac{\omega-\omega'}{2(\omega+\omega')}\hat{a}^{2}(\omega)\right\} \qquad (20)$$

Sử dụng biểu diễn tích phân (14) và phép biến đổi (20) vào hàm sóng (18), sau đó biểu diễn γ qua giá trị năng lượng của hạt ta thu được hàm sóng trạng thái hệ ứng với năng lượng liên tục E như sau:

$$\Psi_E=\frac{\sqrt[4]{2}}{2\pi i}\sqrt{\Gamma\left(\frac{\omega-2iE}{2\omega}\right)}\oint_C dt\,\frac{1}{\sqrt{t}}\exp\left\{\frac{i}{2}\left(\frac{E}{\omega}\ln t+t^2-\hat{a}^{+2}(\omega)\right)\right\}$$

$$\times\exp\left\{\sqrt{2}\,t\,\hat{a}^{+}(\omega)\right\}|0(\omega)\rangle . \qquad (21)$$

Khi cần, hàm sóng dạng tọa độ có thể thu được bằng cách thay vào (21) biểu thức tọa độ của trạng thái chân không và toán tử sinh như định nghĩa (2)-(5).

4. Liên hệ giữa nguyên tử hydro với chuyển động trong trường thế "ngược"

Như đã nói trong phần mở đầu, mối liên hệ giữa nguyên tử hydro với dao động tử điều hòa đã được nghiên cứu trong rất nhiều công trình [3-6]. Trong các công trình này chỉ xét các trạng thái nguyên tử hyđrô ứng với năng lượng nằm trong miền gián đoạn và đã chứng minh rằng các trạng thái này qua phép biến đổi không gian Kustaanheimo-Stiefel [2] sẽ dẫn đến các hàm sóng của dao động tử điều hòa. Chính nhờ vậy mà phương pháp đại số sử dụng biểu diễn qua các toán tử sinh hủy Dirac đã được xây dựng [7-8] và ứng dụng thành công trong nhiều bài toán tính toán hệ nguyên tử [9-11]. Các trạng thái nguyên tử hydro ứng với mức năng lượng liên tục có thể xây dựng được dưới dạng đại số như các trạng thái gián đoạn được không? Trong mục này của bài báo, trước tiên ta sẽ xây dựng mối liên hệ giữa các trạng thái gián đoạn với các trạng thái của chuyển động trong thế "ngược". Sau đó, dựa vào kết quả của mục 3 ta sẽ xây dựng dạng đại số cho các trạng thái gián đoạn này của nguyên tử hydro.

Xét phương trình Schrödinger cho nguyên tử hydro và các ion đồng dạng viết trong hệ đơn vị nguyên tử $(\hbar=m=c=e=1)$:

$$\left\{-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_\lambda\partial x_\lambda}-\frac{Z}{r}\right\}\Psi(\mathbf{r})=E\,\Psi(\mathbf{r}). \qquad (22)$$

Ở đây và về sau việc lặp lại chỉ số có nghĩa là lấy tổng theo toàn miền chỉ số đó. Như đã biết [2], qua phép biến đổi không gian Kustaanheimo-Stiefel:

$$\begin{cases} x_\lambda = \xi_s^* (\sigma_\lambda)_{st}\, \xi_t \\ \phi = \arg \xi_t \qquad (0 \le \phi \le 2\pi) \end{cases} \tag{23}$$

với σ_λ $(\lambda = 1,2,3)$ là các ma trận Pauli, phương trình (22) được đưa về dạng:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi_s \partial \xi_s^*} - E\, \xi_s^* \xi_s \right\} \Psi(\xi) = Z\, \Psi(\xi). \tag{24}$$

Phương trình (24) được viết trong không gian phức hai chiều ξ_s $(s = 1,2)$ và vì vậy xuất hiện thêm một bậc tự do. Để cho (24) và (22) hoàn toàn tương đương ta đòi hỏi hàm sóng trong không gian phức ζ thỏa mãn điều kiện:

$$\hat{Q}\Psi(\xi) = 0, \tag{25}$$

với $\hat{Q} = \xi_s \frac{\partial}{\partial \xi_s} - \xi_s^* \frac{\partial}{\partial \xi_s^*}$. Phép nhân vô hướng hai hàm sóng trong không gian phức ζ cũng cần được định nghĩa qua biểu thức:

$$\langle \varphi(\xi) | \psi(\xi) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1' \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_1'' \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_2' \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_2''\, \varphi^*(\xi)\psi(\xi) \tag{26}$$

với $\xi_s' = \mathrm{Re}\,\xi_s$, $\xi_s'' = \mathrm{Im}\,\xi_s$. Khi đưa về không gian thực ta có:

$$\hat{Q} = -i \frac{\partial}{\partial \phi} \tag{27}$$

và từ đây suy ra điều kiện (25) là hiển nhiên và có nghĩa là hàm sóng vật lý chúng ta xét không thể phụ thuộc vào tọa độ thừa ϕ (xem thêm [22]).

Xét trường hợp trạng thái nguyên tử hydro ở miền năng lượng gián đoạn, nghĩa là năng lượng có giá trị âm, ta đặt $E = -\frac{1}{2}\omega^2$. Lúc này (24) chính là phương trình Schrödinger cho dao động tử điều hoà trong không gian hai chiều phức ζ với năng lượng là Z và Hamiltonian

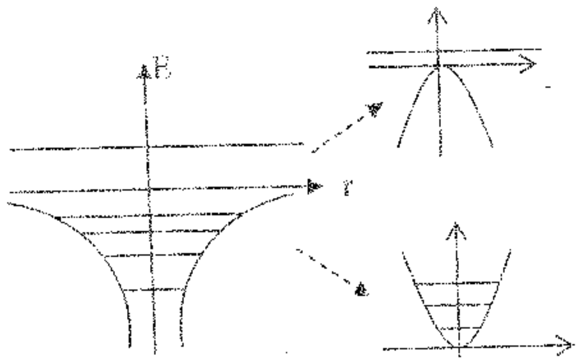
$$\hat{H}_{OSC} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi_s \partial \xi_s^*} + \frac{1}{2}\omega^2 \xi_s^* \xi_s \quad .$$

Điều này có nghĩa là từ các hàm sóng của dao động tử điều hòa trong không gian phức hai chiều ta có thể chọn ra hàm sóng của nguyên tử hydro và các ion đồng dạng bằng điều kiện (25).

Trong trường hợp năng lượng nguyên tử hydro nằm trong miền liên tục, nghĩa là năng lượng dương, ta có $E = \frac{1}{2}\omega^2$. Phương trình (24) không còn mô tả dao động tử điều hòa mà mô tả chuyển động trong trường thế "ngược" với Hamiltonian:

$$\hat{H}_{INV} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\xi_s\partial\xi_s^*} - \frac{1}{2}\omega^2\xi_s^*\xi_s .$$

Như vậy ta có thể kết luận: qua biến đổi Kustaanheimo-Stiefel, hàm sóng của trạng thái liên kết của nguyên tử hydro chuyển về hàm sóng của dao động tử điều hòa trong khi hàm sóng của trạng thái tự do thì chuyển về hàm sóng của chuyển động trong trường thế "ngược". Mối liên hệ này có thể minh họa qua hình 4.



Hình 4.

5. Lời giải đại số thông qua biểu diễn toán tử sinh hủy

Trong trường hợp năng lượng ở miền gián đoạn, các toán tử sinh hủy được định nghĩa như sau:

$$\hat{a}_s(\omega) = \sqrt{\frac{\omega}{2}}\left(\xi_s + \frac{1}{\omega}\frac{\partial}{\partial\xi_s^*}\right) \ , \ \hat{a}_s^+(\omega) = \sqrt{\frac{\omega}{2}}\left(\xi_s - \frac{1}{\omega}\frac{\partial}{\partial\xi_s^*}\right),$$

$$\hat{b}_s(\omega) = \sqrt{\frac{\omega}{2}}\left(\xi_s^* + \frac{1}{\omega}\frac{\partial}{\partial\xi_s}\right) \ , \ \hat{b}_s^+(\omega) = \sqrt{\frac{\omega}{2}}\left(\xi_s^* - \frac{1}{\omega}\frac{\partial}{\partial\xi_s}\right) \tag{28}$$

thỏa mãn các tính chất giao hoán đặc trưng:

$$\left[\hat{a}_s, \hat{a}_t^+\right] = \left[\hat{b}_s, \hat{b}_t^+\right] = \delta_{st} . \tag{29}$$

Lúc này Hamiltonian cho dao động tử điều hòa trong không gian ζ có dạng:

$$\hat{H}_{OSC} = \frac{1}{2}\omega\left(\hat{a}_s^+(\omega)\hat{a}_s(\omega) + \hat{b}_s^+(\omega)\hat{b}_s(\omega) + 2\right). \tag{30}$$

và hàm riêng của nó dễ dàng tìm được như sau

$$\left|n_1, n_2, n_3, n_4\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!n_3!n_4!}}(\hat{a}_1^+)^{n_1}(\hat{b}_1^+)^{n_2}(\hat{a}_2^+)^{n_3}(\hat{b}_2^+)^{n_4}\left|0(\omega)\right\rangle . \tag{31}$$

Ở đây trạng thái chân không được định nghĩa bằng các phương trình:

$$\hat{a}_1(\omega)\left|0(\omega)\right\rangle = \hat{a}_2(\omega)\left|0(\omega)\right\rangle = \hat{b}_1(\omega)\left|0(\omega)\right\rangle = \hat{b}_2(\omega)\left|0(\omega)\right\rangle = 0 \tag{32}$$

và điều kiện chuẩn hóa $\langle 0(\omega)|0(\omega)\rangle = 1$. Toán tử $\hat{Q}$ qua biểu diễn (28)-(29) có dạng:

$$\hat{Q} = \hat{b}_s^{+}\hat{b}_s - \hat{a}_s^{+}\hat{a}_s ,$$

Từ dạng của toán tử $\hat{Q}$ và từ điều kiện (25) dễ dàng thấy rằng để cho (31) biểu diễn trạng thái của nguyên tử hydro ta cần thỏa mãn điều kiện:

$$n_1 + n_3 = n_2 + n_4 . \tag{33}$$

Đặt $n = n_1 + n_3$ ta tìm được trị riêng của Hamiltonian (30):

$$Z = \frac{1}{2}\omega(n_1 + n_2 + n_3 + n_4 + 2) = \omega(n+1) .$$

Từ đây suy ra

$$E = -\frac{1}{2}\omega^2 = -\frac{Z^2}{2(n+1)^2}$$

chính là năng lượng nguyên tử hydro và các ion đồng dạng ứng với số lượng tử chính là n+1. Ta có thể viết lại hàm sóng (31) như sau:

$$|n, n_1, n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!(n-n_1)!(n-n_2)!}}(\hat{a}_1^{+})^{n_1}(\hat{b}_1^{+})^{n_2}(\hat{a}_2^{+})^{n-n_1}(\hat{b}_2^{+})^{n-n_2}|0(\omega_n)\rangle \tag{34}$$

với $\omega_n = \dfrac{Z}{n+1}$, các chỉ số có giá trị $n = 0, 1, 2, ...$, $n_1, n_2 = 0, 1, 2, ..., n$. Đây chính là biểu diễn đại số cho hàm sóng hydro thông qua các toán tử sinh hủy. Kết quả này với trình bày khác có thể tìm thấy trong các công trình của Barut A., Kleinert H [4-6, 20], Komarov et al [7]. Ở đây tác giả trình bày theo cách đơn giản nhất để có thể xây dựng hàm sóng dưới dạng tổng quát hơn và có thể phát triển cho trường hợp năng lượng liên tục. Thật vậy, từ các vectơ trạng thái (34) ta có thể xây dựng các bộ đủ hàm sóng nguyên tử hydro cho các tính toán cụ thể khác nhau. Ví dụ ta có thể xây dựng bộ hàm sóng ứng với giá trị cho trước của momen quỹ đạo và hình chiếu của nó trên trục z, nghĩa là ứng với các số lượng tử n, l, m. Ta đòi hỏi hàm sóng thỏa mãn các phương trình sau:

$$\hat{l}_3\Psi = m\Psi, \tag{35}$$

$$\hat{l}^2\Psi = l(l+1)\Psi . \tag{36}$$

Toán tử hình chiếu momen quỹ đạo khi chuyển về biểu diễn toán tử qua biến đổi KS (23) và (28) có dạng sau:

$$\hat{l}_3 = \frac{1}{2}(\hat{a}_1^{+}\hat{a}_1 - \hat{a}_2^{+}\hat{a}_2 - \hat{b}_1^{+}\hat{b}_1 + \hat{b}_2^{+}\hat{b}_2), \tag{37}$$

và tương tự như vậy toán tử bình phương momen quỹ đạo là

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_\lambda\hat{l}_\lambda = \frac{1}{4}(\hat{a}_s^{+}\hat{a}_s + \hat{b}_s^{+}\hat{b}_s + 2)(\hat{a}_t^{+}\hat{a}_t + \hat{b}_t^{+}\hat{b}_t) - \hat{a}_s^{+}\hat{b}_s^{+}\hat{a}_t\hat{b}_t . \tag{38}$$

Thế (34) vào phương trình (35), sử dụng toán tử (37) ta suy ra

$$n_1 - n_2 = m. \tag{39}$$

Đem (39) thế vào vectơ trạng thái (34) ta thu được hàm sóng hydro ứng với cho trước số lượng tử chính $n+1$ và số lượng tử từ m như sau:

$$|n,m,k\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n-k)!(n-m-k)!k!(k+m)!}}(\hat{a}_1^+\hat{b}_1^+)^k(\hat{a}_2^+\hat{b}_2^+)^{n-k-m}(\hat{a}_1^+\hat{b}_2^+)^m|0(\omega_n)\rangle \tag{40 a}$$

cho trường hợp $m \geq 0$. Còn trong trường hợp $m < 0$ ta có

$$|n,m,k\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n-k)!(n+m-k)!k!(k-m)!}}(\hat{a}_1^+\hat{b}_1^+)^k(\hat{a}_2^+\hat{b}_2^+)^{n-k+m}(\hat{a}_2^+\hat{b}_1^+)^{-m}|0(\omega_n)\rangle. \tag{40 b}$$

Các chỉ số trong vectơ trạng thái (40) có các giá trị sau : $n = 0,1,2,\ldots$, $|m| \leq n$, $k = 0,1,2,\ldots,n-|m|$. Các véctơ trạng thái (40) khi chỉ số k thay đổi tạo thành bộ đủ và vì vậy có thể sử dụng để tính toán cho các hệ nguyên tử khi mà thành phần nhiễu loạn phá vỡ bảo toàn mômen quỹ đạo nhưng vẫn còn bảo toàn hình chiếu mômen quỹ đạo lên trục z. Ví dụ như bài toán nguyên tử hydro trong trường từ hoặc trường điện.

Bây giờ ta có thể xây dựng hàm sóng thỏa mãn phương trình (36), nghĩa là ứng với giá trị cho trước của số lượng tử mômen quỹ đạo $l \leq n$, như sau :

$$|n,l,m\rangle = N_{nlm}\sum_{k=0}^{n-|m|}C_k|n,m,k\rangle. \tag{41}$$

Ở đây N_{nlm} là hệ số chuẩn hóa, C_k là các hệ số cần tìm. Thế (41) vào phương trình (36) và sử dụng biểu diễn (38) cho toán tử bình phương momen quỹ đạo ; sau đó chỉ cần sử dụng các biến đổi đại số dựa vào hệ thức giao hoán (29) và định nghĩa chân không (32) ta dễ dàng thu được :

$$|nlm\rangle = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{(n-l)!(n+l+1)!}}(\hat{a}_s^+\hat{b}_s^+)^{n-l}\hat{D}_{lm}|0(\omega_n)\rangle, \tag{42}$$

với ký hiệu

$$\hat{D}_{lm}|0(\omega_n)\rangle = \sqrt{\frac{l!(l+|m|)!}{|m|!(l+|m|+1)}}(\hat{a}_1^+\hat{b}_2^+)^{|m|}\sum_{k=0}^{l-|m|}\frac{(-1)^k(\hat{a}_1^+\hat{b}_1^+)^k(\hat{a}_2^+\hat{b}_2^+)^{l-|m|-k}}{k!(l-|m|-k)!(k+|m|)!(l-k)!}|0(\omega_n)\rangle. \tag{43}$$

Trong (43) thừa số $(\hat{a}_1^+\hat{b}_2^+)^{|m|}$ chỉ dành cho trường hợp $m \geq 0$, còn trong trường hợp $m < 0$ ta cần thay nó bằng thừa số $(\hat{a}_2^+\hat{b}_1^+)^{|m|}$, ngoài ra bản thân (43) cũng là vectơ trạng thái đã chuẩn hóa.

Như vậy ta đã xây dựng được biểu diễn đại số cho hàm sóng hydro ứng với trạng thái được xác định bởi ba số lượng tử n,l,m. Cách biểu diễn này rất thuận tiện cho các tính toán hệ nguyên tử. Một điểm đáng chú ý khi tính toán các yếu tố ma trận là các trạng thái ứng với chỉ số lượng tử chính n, n' khác nhau sẽ có các tần số góc ω, ω' khác nhau. Khó khăn này dễ dàng vượt qua nhờ phép biến đổi:

$$\hat{R}(\omega',\omega)\left|0(\omega)\right\rangle = \left|0(\omega')\right\rangle,$$

$$\hat{R}(\omega',\omega)\,\hat{a}_s(\omega)\hat{R}^{-1}(\omega',\omega) = \hat{a}_s(\omega') \tag{44}$$

(và tương tự như vậy cho các toán tử khác $\hat{a}_s^+, \hat{b}_s, \hat{b}_s^+$) với toán tử

$$\hat{R}(\omega',\omega) = \exp\left\{\frac{1}{2}\ln\frac{\omega}{\omega'}\left(\hat{a}_s^+(\omega)\hat{b}_s^+(\omega) - \hat{a}_s(\omega)\hat{b}_s(\omega)\right)\right\} \tag{45}$$

có thể đưa về dạng chuẩn như sau:

$$\hat{R}(\omega',\omega) = \frac{4\omega\omega'}{(\omega+\omega')^2}\exp\left\{\frac{\omega-\omega'}{\omega+\omega'}\hat{a}_s^+(\omega)\hat{b}_s^+(\omega)\right\}$$
$$\times\exp\left\{\ln\frac{2\sqrt{\omega\omega'}}{\omega+\omega'}\left(\hat{a}_s^+(\omega)\hat{a}_s(\omega) + \hat{b}_s^+(\omega)\hat{b}_s(\omega)\right)\right\}\exp\left\{-\frac{\omega-\omega'}{\omega+\omega'}\hat{a}_s(\omega)\hat{b}_s(\omega)\right\}.$$

Biểu diễn đại số hàm sóng hydro ở miền năng lượng liên tục

Ta sẽ xây dựng dạng đại số cho hàm sóng nguyên tử hydro và các ion đồng dạng ứng với trạng thái có năng lượng $E > 0$ và có momen quỹ đạo cùng hình chiếu lên trục z ứng với số lượng tử l, m. Sử dụng kết quả ở mục 3 và lý luận như đã làm với trạng thái gián đoạn ta có được hàm sóng:

$$\left|Elm\right\rangle = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{\Gamma(\gamma-l+1)\Gamma(\gamma+l+2)}}\left(\hat{a}_s^+(i\omega)\hat{b}_s^+(i\omega)\right)^{\gamma-l}\hat{D}_{lm}\left|0(i\omega)\right\rangle. \tag{46}$$

Ở đây hàm sóng (46) hoàn toàn tương tự như (42), tuy nhiên thay vào vị trí của số lượng tử chính n là số phức γ. Vì vậy hàm mũ số phức này phải hiểu như định nghĩa dạng tích phân (14) và trong hệ số chuẩn hóa thay vào giai thừa là hàm Gamma tương ứng. Ngoài ra trong định nghĩa trạng thái chân không cũng như định nghĩa các toán tử sinh hủy ta thay tham số ω bằng tham số phức $\omega' = i\omega$ với

$$\omega = \sqrt{2E}\,.$$

Thế hàm sóng (46) vào phương trình Schrödinger cho chuyển động trong thế "ngược" ta tìm trị riêng của Hamiltonian $\hat{H}_{INV}$ là:

$$Z = i\omega(\gamma+1)\,.$$

Từ đây suy ra $\gamma = -\dfrac{iZ}{\sqrt{2E}} - 1\,.$

Bây giờ sử dụng phép biến đổi $\hat{R}(i\omega,\omega)$ để chuyển (46) về dạng, trong đó trạng thái chân không cũng như các toán tử sinh hủy được định nghĩa với tần số góc ω là số thực, ta có

$$|Elm\rangle = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{\Gamma(\gamma-l+1)\Gamma(\gamma+l+2)}}\hat{R}(i\omega,\omega)(\hat{a}_s^+(\omega)\hat{b}_s^+(\omega))^{\gamma-l}\hat{D}_{lm}|0(\omega)\rangle .$$

Sử dụng dạng chuẩn của $\hat{R}(i\omega,\omega)$ và dạng tích phân (14) của $(\hat{a}_s^+(\omega)\hat{b}_s^+(\omega))^{\gamma-l}$, sau các phép biến đổi đại số ta thu được:

$$|Elm\rangle = \frac{1}{2\pi i}\sqrt{\frac{(2l+1)!\Gamma\left(-\frac{iZ}{\sqrt{2E}}-l\right)}{\Gamma\left(-\frac{iZ}{\sqrt{2E}}+l+1\right)}}\oint_C dt\left(\frac{\sqrt{2}i}{i+t}\right)^{2(l+1)} t^l \exp\left\{\frac{iZ}{\sqrt{2E}}\ln t+\frac{it+1}{i+t}\hat{a}_s^+\hat{b}_s^+\right\}D_{lm}|0(\omega)\rangle \quad (47)$$

Đây chính là dạng đại số cần xây dựng cho hàm sóng Hydro trong miền năng lượng liên tục. Khi chuyển về dạng tọa độ qua các biến đổi (28) rồi (23) ta thu được kết quả đã biết [17].

6. Kết luận

Dạng tọa độ của hàm sóng nguyên tử hydro cho miền năng lượng liên tục có thể tìm thấy đầy đủ trong cuốn sách kinh điển của Hans Bethe and Edwin Salpeter [17], ngoài ra tính chất đối xứng của nó được xét rất kỹ bằng công cụ lý thuyết nhóm trong các công trình của A. Barut, Kleinert [5-6, 20] và gần đây nhất trong các công trình liên quan đến trạng thái kết hợp (coherent) của nguyên tử hydro [23]. Dạng đại số (47) như đã đưa ra trong công trình này với mục đích sử dụng trong tính toán cụ thể một cách hiệu quả. Đặc biệt là với chương trình tính toán trên biểu thức Mathematica [21] có sẵn công cụ để tính toán đại số với các toán tử sinh hủy. Vì vậy việc sử dụng phương pháp đại số với các hàm sóng biểu diễn qua biểu thức (47) cũng như (42)-(43) cho phép chúng ta tự động hóa các quá trình tính toán phức tạp. Thực chất là đưa các tính toán tích phân của các hàm đặc biệt về các biến đổi đơn thuần đại số. Trong các bài toán ion hóa nguyên tử hấp thụ hai hay nhiều photon số lượng tính toán khổng lồ lên đến hàng ngàn tích phân [12-14] thì việc sử dụng các tính đại số với sự hỗ trợ của Mathematica lại càng có ý nghĩa thực tiễn. Chú ý là dạng đại số của hàm sóng (42)-(43) trong miền gián đoạn đã được sử dụng thành công trong một loạt các tính toán phức tạp [9-10]. Hàm Green cho bài toán Coulomb cũng đã được xây dựng trong biểu diễn đại số này [11], vì vậy việc sử dụng nó kết hợp với các phương pháp tính toán giải tích làm mở rộng đáng kể miền ứng dụng của phương pháp.

Phụ lục A1 Dạng chuẩn của toán tử $\hat{R} = \exp\{\frac{1}{4}\ln\frac{\omega}{\omega'}[\hat{a}^{+2}(\omega) - \hat{a}^2(\omega)]\}$

Vì $\left[\hat{a}^{+2}, \hat{a}^2\right] = -2(\hat{a}^+\hat{a} + 1)$ nên có thể đặt $\hat{R}$ dưới dạng như sau:

$$\hat{R} = e^{t\{\hat{a}^{+2}(\omega) - \hat{a}^2(\omega)\}} = e^{f(t)} e^{g(t)\hat{a}^{+2}} e^{h(t)\hat{a}^+\hat{a}} e^{s(t)\hat{a}^2} = \hat{F}(t) \quad (1)$$

Trong đó $t = \frac{1}{4}\ln\frac{\omega}{\omega'}$

Đạo hàm (1) theo biến số 't' ta được:

$$[\hat{a}^{+2}(\omega) - \hat{a}^2(\omega)]\hat{F} = g'(t)\hat{a}^{+2}\hat{F} + f'(t)\hat{F} + h'(t)e^{f(t)} e^{g(t)\hat{a}^{+2}} \hat{a}^+\hat{a}\, e^{h(t)\hat{a}^+\hat{a}} e^{s(t)\hat{a}^2} + s'(t)\, e^{f(t)} e^{g(t)\hat{a}^{+2}} e^{h(t)\hat{a}^+\hat{a}} \hat{a}^2 e^{s(t)\hat{a}^2} \quad (2)$$

Nhân hai vế của (2) với $\hat{F}^{-1}$:

$$\hat{F}^{-1} = e^{-s(t)\hat{a}^2} e^{-h(t)\hat{a}^+\hat{a}} e^{-g(t)\hat{a}^{+2}} e^{-f(t)}$$

Sau khi đơn giản các số hạng ta còn lại:

$$\hat{a}^{+2}(\omega) - \hat{a}^2(\omega) = f'(t) + g'(t)\hat{a}^{+2} + h'(t)e^{g(t)\hat{a}^{+2}} \hat{a}^+\hat{a}\, e^{-g(t)\hat{a}^{+2}} \quad (3)$$
$$+ s'(t)\, e^{g(t)\hat{a}^{+2}} e^{h(t)\hat{a}^+\hat{a}} \hat{a}^2 e^{-h(t)\hat{a}^+\hat{a}} e^{-g(t)\hat{a}^{+2}}$$

Với thành phần thứ nhất, ta tính được

$$e^{g(t)\hat{a}^{+2}} \hat{a}^+\hat{a}\, e^{-g(t)\hat{a}^{+2}} = \left(\hat{a}^+\hat{a} - 2\hat{a}^{+2} g(t)\right) \quad (4)$$

Với thành phần thứ hai, ta đặt

$$I = e^{g(t)\hat{a}^{+2}} e^{h(t)\hat{a}^+\hat{a}} \hat{a}^2 e^{-h(t)\hat{a}^+\hat{a}} e^{-g(t)\hat{a}^{+2}}$$

Với $J = e^{h(t)\hat{a}^+\hat{a}} \hat{a}^2 e^{-h(t)\hat{a}^+\hat{a}} = \hat{a}^2 e^{-2h(t)}$

Thay J vào I ta được :

$$I = e^{-2h(t)}\left\{\hat{a}^2 + g(t)\left(-4\hat{a}^+\hat{a} - 2\right) + 4g^2(t)\hat{a}^{+2}\right\} \quad (5)$$

Thay các biểu thức (4) và (5) vào biểu thức (3) ta có:

$$\hat{a}^{+2}(\omega) - \hat{a}^2(\omega) = f'(t) + g'(t)\hat{a}^{+2} + h'(t)\left(\hat{a}^+\hat{a} - 2\hat{a}^{+2}g(t)\right) + s'(t)e^{-2h(t)}\left\{\hat{a}^2 + g(t)\left(-4\hat{a}^+\hat{a} - 2\right) + 4g^2(t)\hat{a}^{+2}\right\}$$

Đồng nhất hai vế ta có hệ phương trình vi phân:

$$\begin{cases} g'(t) - 2h'(t)g(t) + 4s'(t)e^{-2h(t)}g^2(t) = 1 \\ s'(t)e^{-2h(t)} = -1 \\ h'(t) - 4s'(t)e^{-2h(t)}g(t) = 0 \\ f'(t) - 2s'(t)e^{-2h(t)} = 0 \end{cases}$$

Giải hệ phương trình với điều kiện

$$g(0) = 0,\ h(0) = 0,\ f(0) = 0 \text{ và } s(0) = 0$$

và $t = \frac{1}{4}\ln\frac{\omega}{\omega'}$

Ta thu được $$g(t) = \frac{e^{4t}-1}{2\left(e^{4t}+1\right)} = \frac{\frac{\omega}{\omega'}-1}{2(\frac{\omega}{\omega'}+1)} = \frac{\omega-\omega'}{2(\omega+\omega')} = \mu_1$$

$$h(t) = \ln\frac{2e^{2t}}{e^{4t}+1} = \ln\frac{2\sqrt{\frac{\omega}{\omega'}}}{\frac{\omega}{\omega'}+1} = \ln\frac{2\sqrt{\omega\omega'}}{\omega+\omega'} = 2\mu_2$$

$$f(t) = \frac{1}{2}\ln\frac{2\sqrt{\omega\omega'}}{\omega+\omega'} = \mu_2$$

$$s(t) = \frac{1}{\frac{\omega}{\omega'}+1} - \frac{1}{2} = \frac{\omega'-\omega}{2(\omega+\omega')} = -\mu_1$$

Cuối cùng thay các biểu thức f(t), g(t), h(t), s(t) vào (1) ta được kết quả.

$$\begin{aligned} \hat{R} &= \exp\{\frac{1}{4}\ln\frac{\omega}{\omega'}[\hat{a}^{+2}(\omega) - \hat{a}^2(\omega)]\} \\ &= \exp\left\{\mu_1\hat{a}^{+2}(\omega)\right\}\exp\left\{\mu_2(2\hat{a}^+\hat{a}+1)\right\}\exp\left\{-\mu_1\hat{a}^2\right\} \end{aligned} \quad (6)$$

với $$\mu_1 = \frac{\omega-\omega'}{2(\omega+\omega')},\qquad \mu_2 = \frac{1}{2}\ln\frac{2\sqrt{\omega\omega'}}{\omega+\omega'}$$

TÀI LIỆU THAM KHẢO

[1]. Dirac P. A. M, (1958), The Principles of Quantum Mechanics. 4-th edition. Oxford: Clarendon press.

[2]. Kustaanheimo P., Stiefel E., (1964), J. für Math. **218**, 204.

[3]. Bergman P., Frishman Y., (1965), J. Math. Phys. **6**, 1855.

[4]. Barut A. O., Fronsdal C., (1965), Proc. Roy. Soc. A, **287**, 532.

[5]. Kleinert H. In Lectures in Theor. Phys. Ed. Brittin W and Barut A., Gordon and Brach, N Y, 427 (1968).

[6]. Barut A.O., Schneider C., Wilson R., (1979), J. Math. Phys., **20**, 2244.

[7]. Komarov L.I., (1982), Romanova T.S. Izv. Akad BSSR (Fis.-Mat. Nauk) **2**, 98.

[8]. Komarov L.I., (1985), Romanova T.S. J. Phys. B, **18**, 859.

[9]. Le Anh Thu, Le Van Hoang, Komarov L.I., (1994), Romanova T S, J. Phys. B, **27**, 4083.

[10]. Le Anh Thu, Le Van Hoang, Komarov L.I., (1996), Romanova T S, J. Phys. B, **29**, 2897.

[11]. Le Van Hoang, (2004), In Etude on Theor. Phys. Ed. Feranchuk I. et al, World Scientific, Singapore, 231.

[12]. Karule E., Moine B., (2003), J. Phys. B, **36**, 1963.

[13]. Veniard V., Taieb R., Maquet A., (2003), J. Phys. B, **36**, 4245.

[14]. Krylovetsky A., Manakov N., Marmo S., (2005), J. Phys B, **38**, 311.

[15]. Koval P., Fritzsche S., Gumberidze A., Stohlker Th., (2002), Phys. Rev. Lett., **88** 153001.

[16]. Kornberg M., Godunov A., Ortiz S., Ederer D., McGuire J., Young L., (2002), J. Synchrotron Radiat., **9**, 298.

[17]. Bethe H., Salpeter E., (1957), Quantum Mechanics of One- and Two- Electron Atoms, Springer-Verlag, Berlin.

[18]. Barut A., Phillips E., (1968), Comm. Math. Phys. **8**, 52.

[19]. Kibler M., Negadi T., (1983), J. Phys. A, 16, 4265.

[20]. Kleinert H., (1993), Found. Phys., **23**, 5.

[21]. Maeder R., (1991), Programming in Mathematica, 2-nd edition, Addison-Wesley Pub. Co.,.

[22]. Le Van Hoang, Tony V., (1992), Phys. Lett. A, 171, 23.

[23]. Pol'shin S., (2001), J. Phys. A, **34**, 11083.

Tóm tắt:

Một cách nhìn đầy đủ về toán tử sinh hủy Dirac
và ứng dụng cho hệ lượng tử trong miền năng lượng liên tục

Nghiệm đại số biểu diễn dưới dạng toán tử sinh huỷ đã được xây dựng trong bài toán dao động tử điều hòa, bài toán có nghiệm trong miền năng lượng gián đoạn. Trên cơ sở đó, tác giả mở rộng phạm vi áp dụng của phương pháp đại số sử dụng toán tử sinh hủy trong miền năng lượng liên tục thông qua bài toán nguyên tử hydro. Kết quả này thuận lợi cho một số nghiên cứu về quá trình ion hoá, khi đó trạng thái cuối cùng của điện tử là trạng thái tự do, năng lượng trong vùng liên tục.

Abtracst:

Looking comprehensively at Dirac annihilation and creation operators and application to the quantum system in the region of continuous energy

Algebraic solution represented in form of annihalation and creation operators is established in harmonic oscillator, in discrete spectrum. Basing on that result, we expand the operator method using annihalation and creation operators in continuous spectrum, especially, the root hydrogen atom in continuous spectrum is represented in form of annihalation and creation operators. That result is the first important step to research ionization process, final state in continuous spectrum.