SỬ DỤNG PHƯƠNG PHÁP BIẾN PHÂN RITZ TRONG CÁC BÀI TẬP CƠ HỌC LƯỢNG TỬ CHO SINH VIÊN CHUYÊN NGÀNH VẬT LÝ CỦA TRƯỜNG ĐẠI HỌC HỒNG ĐỨC

Nguyễn Thị Ngọc[1]

TÓM TẮT

Trong các bài toán cơ học lượng tử, phương trình Schrodinger áp dụng cho các hệ phức tạp không thể giải chính xác mà phải dùng các phương pháp gần đúng. Phương pháp biến phân là phương pháp gần đúng tìm ra các trị riêng và hàm riêng của Hamiltonian. Phương pháp biến phân dựa trên nhận định năng lượng trung bình của hệ lớn hơn hoặc bằng năng lượng của hệ ở trạng thái cân bằng. Việc tính năng lượng ở mức cơ bản đưa đến chọn một hàm thử chứa thông số chưa biết. Cực tiểu hóa năng lượng trung bình để tìm các thông số chưa biết trong hàm thử. Từ đó ta tính được năng lượng ở trạng thái cơ bản.

Từ khóa: *Hệ lượng tử, hàm Hamiltonian, hàm thử, phương pháp biến phân.*

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Trong quá trình giải bài tập cơ học lượng tử về phương trình Schrodinger cho các hệ lượng tử phức tạp, việc vận dụng lý thuyết vào giải bài tập là một vấn đề rất khó khăn đối với các sinh viên. Tài liệu tham khảo cho học tập bộ môn là hạn chế, giáo trình của một số tác giả về phần bài tập hầu như không có lời giải hoặc hướng dẫn phương pháp giải. Do đó, các sinh viên gặp rất nhiều khó khăn trong việc giải bài tập. Bài báo này sử dụng phương pháp biến phân Ritz trong giải bài tập cơ học lượng tử sẽ giúp cho các em nắm vững bản chất hiện tượng của các hệ lượng tử đó.

2. NỘI DUNG

2.1. Lý thuyết về phương pháp biến phân Ritz

Phương pháp biến phân là một trong các phương pháp gần đúng tìm ra các trị riêng và hàm riêng của Hamiltonian.

Phương pháp biến phân dựa trên nhận định năng lượng trung bình của hệ lớn hơn hoặc bằng năng lượng của hệ ở trạng thái cân bằng.

Việc tính năng lượng ở mức cơ bản đưa đến chọn một hàm thử chứa thông số chưa biết.

Cực tiểu hóa năng lượng trung bình để tìm các thông số chưa biết. Từ đó ta tính được năng lượng ở trạng thái cơ bản.

---

[1] *Giảng viên khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức*

Cơ sở lý thuyết

Ta có giá trị trung bình của năng lượng: $\bar{E} = \dfrac{\int \psi^* \hat{H} \psi dx}{\int |\psi|^2 dx} = \int \psi^* \hat{H} \psi dx$ (1) (hàm sóng đã được chuẩn hóa)

Khai triển hàm sóng ψ theo $\psi_n^{(0)}$ của toán tử không nhiễu loạn $\hat{H}_0$. Ta có

$$\psi(x) = \sum_n C_n \psi_n^{(0)} \quad \text{với} \quad \sum_n |C_n|^2 = 1 \qquad (2)$$

Thay (2) và (1) ta được:

$$\bar{E} = \int \sum_n C_n \psi_n^{*(0)} \hat{H} \sum_n C_n \psi_n^{(0)} dx = \int \sum_n |C_n|^2 \psi_n^{*(0)} \hat{H} \psi_n^{(0)} dx = \sum_n |C_n|^2 \int \psi_n^{*(0)} \hat{H} \psi_n^{(0)} dx$$

$$= \sum_n |C_n|^2 \bar{E}_n \geq \sum_n |C_n|^2 E_0 \geq E_0$$

Vậy $\bar{E} = \min \int \psi^* \hat{H} \psi dx$

Nhận xét: Việc tính năng lượng ở trạng thái cơ bản ở biểu thức trên dẫn đến việc chọn "hàm thử" chứa một số thừa số chưa biết nào đó: $\alpha, \beta, ...$ và $\psi(x, \alpha, \beta, ...)$

Tính $\quad J(\alpha, \beta, ..) = \int \psi^*(x, \alpha, \beta, ...) \hat{H} \psi(x, \alpha, \beta, ...) dx$

Tìm cực trị của $J(\alpha, \beta, ..)$ đồng nghĩa với việc giải phương trình:

$$\frac{\partial J}{\partial \alpha} = \frac{\partial J}{\partial \beta} = ... = 0 \Rightarrow \alpha_0, \beta_0, ...$$

Nếu chọn tốt hàm thử ta có giá trị năng lượng $E = J(\alpha_0, \beta_0, ...)$ gần với giá trị thật E_0 và lúc đó hệ số trạng thái cơ bản của hệ sẽ gần đúng với hàm $\psi_0(x, \alpha, \beta, ...)$.

Phương pháp tính năng lượng cơ bản nói trên gọi là phương pháp biến phân Ritz.

Ngoài ra, người ta còn có thể tính năng lượng ở trạng thái kích thích thứ nhất E_1 hoặc trạng thái E_2.

$E_1 = \min \int \psi_1^* \hat{H} \psi_1 dx$ với $\int \psi_1^* \psi_1 dx = 1; \int \psi_1^* \psi_0 dx = 0$

$E_2 = \min \int \psi_2^* \hat{H} \psi_2 dx$ với $\int \psi_2^* \psi_2 dx = 1; \int \psi_2^* \psi_1 dx = 0; \int \psi_2^* \psi_0 dx = 0$. Tiếp tục thực hiện các phép tính ta có thể tính năng lượng ở mức kích thích cao hơn.

2.2. Các bài tập sử dụng phương pháp biến phân Ritz

2.2.1. Phương pháp giải

Bước 1: Chọn một hàm thử chứa một thông số chưa biết nào đó $\psi(x, \alpha, \beta, ...)$

Bước 2: Lập hàm $J(\alpha,\beta,..)=\int\psi^*\left(x,\alpha,\beta,...\right)\hat{H}\psi\left(x,\alpha,\beta,...\right)dx$

Tìm cực trị của $J(\alpha,\beta,..)$ đồng nghĩa với việc giải phương trình:

$$\frac{\partial J}{\partial\alpha}=\frac{\partial J}{\partial\beta}=...=0\Rightarrow\alpha_0,\beta_0,...$$

Viết lại $\psi\left(x,\alpha_0,\beta_0,...\right)$

Bước 3: Suy ra $E=J(\alpha_0,\beta_0,...)$

2.2.2. Các dạng bài tập áp dụng

Bài tập 1: Dùng phương pháp biến phân tìm năng lượng ở trạng thái cơ bản của hạt chuyển động trong trường thế $U(x)=U_0x^4, U_0=const$ với hàm thử được chọn $\psi(x)=A.e^{\frac{-x^2}{\beta^2}}$ với $\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{-\alpha x^2}dx=\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$

Bài giải: Chuẩn hóa hàm sóng: $1=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}A^2e^{-\frac{2}{\beta^2}x^2}dx$

Áp dụng tích phân $\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{-\alpha x^2}dx=\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ ta có: $1=A^2\beta\sqrt{\frac{\pi}{2}}\Rightarrow A=\sqrt{\frac{1}{\beta\sqrt{\frac{\pi}{2}}}}$

Lập hàm

$$J(\beta)=\int\psi^*\hat{H}\psi dx=A^2\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{\frac{-x^2}{\beta^2}}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+U_0.x^4\right)e^{\frac{-x^2}{\beta^2}}dx$$

$$=A^2\left[\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{\frac{-x^2}{\beta^2}}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\left(e^{\frac{-x^2}{\beta^2}}\right)}{dx^2}\right)dx+\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{\frac{-2x^2}{\beta^2}}U_0.x^4dx\right]=A^2\left[\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{\frac{-2x^2}{\beta^2}}\frac{\hbar^2}{m\beta^2}\left(1-\frac{2x^2}{\beta^2}\right)dx+\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{\frac{-2x^2}{\beta^2}}U_0.x^4dx\right]$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m\beta^2}-\frac{\hbar^2}{2m\beta^5\sqrt{\frac{\pi}{2}}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{\frac{-2x^2}{\beta^2}}x^2dx+A^2\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{\frac{-2x^2}{\beta^2}}U_0.x^4dx=\frac{\hbar^2}{2m\beta^2}-\frac{\hbar^2}{2m\beta^5\sqrt{\frac{\pi}{2}}}I_1+A^2I_2$$

Đặt $I(\alpha)=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{-\alpha x^2}dx=\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ suy ra

$$\frac{\partial I(\alpha)}{\partial\alpha}=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}-x^2e^{-\alpha x^2}dx=\frac{-1}{2}\sqrt{\pi}\alpha^{-3/2}$$

$$\frac{\partial^2I(\alpha)}{\partial\alpha^2}=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}x^4e^{-\alpha x^2}dx=\frac{3}{4}\sqrt{\pi}\alpha^{-5/2}$$

Do đó: $+I_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2.e^{-\frac{2x^2}{\beta^2}}dx = \frac{\beta^3}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}$ và $I_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} U_0 x^4.e^{-\frac{2x^2}{\beta^2}}dx = \frac{3.U_0}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\left(\frac{2}{\beta^2}\right)^5}}$

Vậy $J(\beta) = \frac{\hbar^2}{2m\beta^2} - \frac{\hbar^2}{2m\beta^5\sqrt{\frac{\pi}{2}}}I_1 + A^2 I_2 = \frac{\hbar^2}{2m\beta^2} + \frac{3}{16}U_0\beta^4$

Ta có:
$$\frac{\partial J(\beta)}{\partial \beta} = 0 \Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{2m}(-2)\beta^{-3} + \frac{3}{4}U_0\beta^3 = 0$$
$$\Rightarrow \beta_0^2 = \sqrt[3]{\frac{4\hbar^2}{3.mU_0}}$$

Vậy $E_0 = \frac{\hbar^2}{2m\sqrt[3]{\frac{4\hbar^2}{3.mU_0}}} + \frac{3}{16}U_0\sqrt[\frac{4}{3}]{\frac{4\hbar^2}{3.mU_0}}$

Bài tập 2: Sử dụng phương pháp biến phân tìm năng lượng ở trạng thái cơ bản của nguyên tử Hidro với hàm thử $\psi(r) = A.e^{-\beta.r}$

Với $\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2.m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\Delta_{(\theta,\varphi)}\right] - \frac{e^2}{r}$

Bài giải: Chuẩn hóa hàm sóng:

$$1 = \int |\psi(r)|^2 dV = \int_0^{+\infty} A^2.e^{-2\beta.r}r^2dr\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi = 4\pi A^2\int_0^{+\infty}e^{-2\beta.r}r^2dr$$

Ta có:

$$I(\alpha) = \int_0^{+\infty} e^{-\alpha r}dr = \frac{-1}{\alpha}e^{-\alpha r}\Big|_0^{+\infty} = \frac{1}{\alpha} \Rightarrow \frac{\partial I(\alpha)}{\partial \alpha} = \int_0^{+\infty} r.e^{-\alpha r}dr = -\frac{1}{\alpha^2}; \frac{\partial^2 I(\alpha)}{\partial \alpha^2} = \int_0^{+\infty} r^2.e^{-\alpha r}dr = \frac{2}{\alpha^3}$$

Suy ra $I = \int_0^{+\infty} e^{-2\beta.r}r^2dr = \frac{1}{4\beta^3} \Rightarrow A^2 = \frac{\beta^3}{\pi}$

Lập hàm $J(\beta) = \int \psi^*(r)\hat{H}\psi(r)dV$

Ta có:

$$\hat{H}\psi(r) = \left\{\frac{-\hbar^2}{2.m}\left[\frac{1}{r^2}\left(2r\frac{\partial}{\partial r} + r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}\right) + \frac{1}{r^2}\Delta_{(\theta,\varphi)}\right] - \frac{e^2}{r}\right\}A.e^{-\beta.r}$$
$$= \frac{-\hbar^2}{2.m}\left[\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2}\right]A.e^{-\beta.r} + 0 - \frac{e^2}{r}A.e^{-\beta.r} = A.e^{-\beta.r}\left[\frac{\hbar^2}{r.m} - \frac{\hbar^2}{2.m}\beta^2 - \frac{e^2}{r}\right]$$

$$\Rightarrow J(\beta) = \int_0^{+\infty} A^2 e^{-2\beta.r}\left[\frac{\hbar^2}{r.m} - \frac{\hbar^2}{2.m}\beta^2 - \frac{e^2}{r}\right]4\pi r^2 dr = A^2\left[\frac{\hbar^2}{m}\beta - e^2\right]4\pi\int_0^{+\infty} e^{-2\beta.r} r dr - \frac{\hbar^2}{2.m}\beta^2$$

$$= \frac{\hbar^2}{m}\beta^2 - e^2\beta - \frac{\hbar^2}{2.m}\beta^2 = \frac{\hbar^2}{m}\beta^2 - e^2\beta$$

$$\frac{\partial J}{\partial \beta} = 0 \Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{m}\beta - e^2 = 0 \Rightarrow \beta_0 = \frac{m}{\hbar^2}e^2$$

Vậy: $E_0 = \dfrac{\hbar^2}{2.m}\dfrac{e^4.m^2}{\hbar^4} - e^2\dfrac{e^2.m}{\hbar^2} = -\dfrac{e^4.m}{\hbar^2}$

Bài tập 3: Dùng phương pháp biến phân hãy tính gần đúng năng lượng trạng thái cơ bản của hạt trong hố thế sâu vô cùng, bề rộng a $(0 \le x \le a)$.

Chọn hàm thử: $\psi(x) = A.x(x-a)$

Bài giải: Đối với giếng thế sâu vô hạn bề rộng là a ta có:

$$E_n^{(0)} = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2ma^2} \text{ và } \psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}.$$

Năng lượng trung bình được tính theo công thức:

$$\bar{E} = \int \psi^* \hat{H}\psi dx = \int \psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right)\psi dx$$

$$= \int \psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}\right)dx + \int \psi^* U(x)\psi dx$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2}dx$$

(Vì $\int \psi^* U(x)\psi dx = 0$ do tính chất của giếng thế sâu vô hạn)

Chuẩn hóa hàm sóng:

$$\psi(x) = A.x(x-a)$$

$$\int_0^a \psi^*\psi dx = 1 \Leftrightarrow \int_0^a A^2 x^2 (x-a)^2 dx = 1 \Leftrightarrow A^2\int_0^a \left(x^4 - 2ax^3 + a^2x^2\right)dx = 1$$

$$\Rightarrow A^2 = \frac{30}{a^5}$$

Vậy năng lượng trung bình là:

$$\bar{E} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^a \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2}dx = -\frac{\hbar^2 A^2}{2m}\int_0^a \left(x^2 - a.x\right)^2 dx$$

$$= \frac{\hbar^2}{m}\frac{30}{a^5}\frac{a^3}{6} = 5\frac{\hbar^2}{ma^2} = 1,01E_0$$

Bài tập 4: Áp dụng phương pháp biến phân tính năng lượng ở trạng thái cơ bản của một dao động tử điều hòa với $\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2.m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m.\omega^2 x^2$ với hàm thử được chọn

$$\psi(\alpha, x) = \begin{cases} 0 \quad \text{khi} \quad x > -\alpha \\ \frac{x}{\alpha} + 1 \ \text{khi} \ -\alpha < x < 0 \\ -\frac{x}{\alpha} + 1 \ \text{khi} \ 0 < x < \alpha \\ 0 \quad \text{khi} \ x > \alpha \end{cases}$$

Bài giải: Đặt

$$J(\alpha) = \frac{\int \psi^* \hat{H}\psi dx}{\int \psi^* \psi dx} = \frac{\frac{-\hbar^2}{2m}\int\limits_{-\alpha}^{+\alpha} \psi\psi'' dx + \frac{1}{2}m\omega^2 \int\limits_{-\alpha}^{+\alpha} x^2\psi^2 dx}{\int\limits_{-\alpha}^{+\alpha} \psi^2 dx}$$

Trong đó $\psi'' = \frac{d^2\psi}{dx^2}$. Tích phân dưới mẫu xuất hiện do hàm sóng chưa chuẩn hóa. Chuẩn hóa hàm sóng:

$$MS = \int\limits_{-\alpha}^{0}\left(\frac{x}{\alpha}+1\right)^2 dx + \int\limits_{0}^{\alpha}\left(-\frac{x}{\alpha}+1\right)^2 dx = \int\limits_{-\alpha}^{0}\left(\frac{x^2}{\alpha^2}+2\frac{x}{\alpha}+1\right)dx + \int\limits_{0}^{\alpha}\left(\frac{x^2}{\alpha^2}-2\frac{x}{\alpha}+1\right)dx = \frac{2\alpha}{3}$$

Xét tử số:

$$+\int\limits_{-\alpha}^{+\alpha} x^2\psi^2 dx = \int\limits_{-\alpha}^{0}\left(\frac{x^4}{\alpha^2}+2\frac{x^3}{\alpha}+x^2\right)dx + \int\limits_{0}^{\alpha}\left(\frac{x^4}{\alpha^2}-2\frac{x^3}{\alpha}+x^2\right)dx = \frac{1}{15}\alpha^3$$

+ Tính $\int \psi\psi'' dx$ và cần lưu ý:

$$\psi'(x,\alpha) = \begin{cases} \frac{1}{\alpha} khi \ \ x < 0 \\ -\frac{1}{\alpha} khi \ \ x > 0 \end{cases}$$

Do đó $\psi'(x,\alpha) = \frac{1}{\alpha}\left[-\eta(x) + \eta(-x)\right]$ với $\eta'(x) = \begin{cases} 0 \ \ khi \ \ x < 0 \\ 1 \ \ khi \ \ x > 0 \end{cases}$

Ta biết $\eta'(x) = \delta(x)$ $\quad \delta(x)$ là hàm DeltaDirac

$$\psi''(x,\alpha) = \frac{1}{\alpha}\left[-\delta(x) + \delta(-x)\right] = -\frac{2}{\alpha}\delta(x)$$

Do đó:

$$\int\limits_{-\alpha}^{+\alpha} \psi\psi'' dx = \frac{-2}{\alpha}\int\limits_{-\alpha}^{+\alpha} \psi(\alpha,x)\delta(x)dx = \frac{-2}{\alpha}\psi(\alpha,0) = \frac{-2}{\alpha}$$

Vậy:

$$J\left(\alpha\right)=\frac{\frac{2}{\alpha}\frac{\hbar^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\frac{1}{15}\alpha^3}{\frac{2\alpha}{3}}=\frac{3}{2}\frac{\hbar^2}{m\alpha^2}+\frac{1}{20}m\omega^2\alpha^2$$

Từ điều kiện cực tiểu của hàm $J\left(\alpha\right)$

$$\frac{\partial J\left(\alpha\right)}{\partial\alpha}=0\Leftrightarrow-3\frac{\hbar^2}{m\alpha^3}+\frac{1}{10}m\omega^2\alpha=0\Rightarrow\alpha_0^2=\sqrt{30}\frac{\hbar}{m\omega}$$

Vậy năng lượng ở trạng thái cơ bản là:

$$J\left(\alpha_0\right)=\frac{\sqrt{30}}{20}\hbar\omega+\frac{\sqrt{30}}{20}\hbar\omega=\frac{\sqrt{30}}{10}\hbar\omega$$

3. KẾT LUẬN

Phương pháp biến phân là một trong các phương pháp quan trọng của cơ lượng tử. Áp dụng phương pháp biến phân, chúng ta tìm ra được các trị riêng và hàm riêng của Hamiltonian cho các hệ lượng tử phức tạp mà các phương pháp chính xác không giải được. Hệ thống các dạng bài tập trong bài báo này đã được áp dụng cho sinh viên của Trường Đại học Hồng Đức, sinh viên đã nâng cao năng lực giải các bài toán vật lý và vận dụng phương pháp biến phân vào giải bài tập cơ học lượng tử. Đây cũng là một trong các tài liệu bổ ích cho các sinh viên và giảng viên vật lý trong quá trình giảng dạy môn cơ học lượng tử.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

[1] Hoàng Dũng (2002), *Bài tập Cơ học Lượng tử*. Nxb. Đại học Quốc gia, Hà Nội.
[2] Vũ Văn Hùng (2004), *Giáo trình Cơ học Lượng tử*. Nxb. Đại học Sư phạm, Hà Nội.
[3] Vũ Văn Hùng (2005), *Bài tập Cơ học Lượng tử*. Nxb. Đại học Sư phạm, Hà Nội.
[4] Nguyễn Hữu Mình, Tạ Duy Lợi, Đỗ Đình Thanh, Lê Trọng Tường (1996), *Bài tập vật lý lý thuyết,* Nxb. Đại học Quốc gia, Hà Nội.
[5] Amit Goswami (1997), *Quantum Mechanics*, Wm.C. Brown Publishers.

USE THE VARIABLE OF THE RITZ IN THE QUANTUM MECHANIC EXERCISES FOR PHYSICS STUDENTS AT HONG DUC UNIVERSITY

Nguyen Thi Ngoc

ABSTRACT

In the mathematics of quantum mechanics, Schrodinger equation applied to complex systems could not solve correctly but it is necessary to use the approximate methods. Methods of variations are the approximate method of finding the eigenvalues and function *of Hamiltonian. Variational methods based on the identification of the average energy of the system which is greater than or equal to the energy of the system at equilibrium. The calculation of basic energy level taken to a choice of a test function contains unknown parameters. Minimizing the average energy to find the unknown parameters in the function test. From which we calculate the energy in basic status.*

Keywords: *Quantum mechanic, function Hamiltonian, test, methods of variation.*