



Bài báo nghiên cứu\*

# NĂNG LƯỢNG CHÍNH XÁC CAO CHO TRẠNG THÁI CƠ BẢN CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO Ở MÔI TRƯỜNG PLASMA TRONG TỪ TRƯỜNG ĐỀU

Lý Duy Nhất<sup>1,2\*</sup>, Hoàng Đỗ Ngọc Trâm<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

<sup>2</sup> Viện Năng lượng Nguyên tử Việt Nam

\*Tác giả liên hệ: Lý Duy Nhất – Email: [nhatld@hcmue.edu.vn](mailto:nhatld@hcmue.edu.vn)

Ngày nhận bài: 31-3-2020; ngày nhận bài sửa: 21-5-2020, ngày chấp nhận đăng: 10-6-2020

## TÓM TẮT

Gần đây, phương pháp toán tử FK đã được áp dụng thành công cho bài toán nguyên tử hydro trong từ trường đều với cường độ bất kì. Trong công trình này, các kết quả đó được phát triển cho trường hợp tổng quát hơn khi có tính đến thế màn chắn. Trong các đo đạc vật lý thiên văn, nguyên tử hydro có thể tồn tại một thời gian ngắn trong môi trường plasma khi mà thế màn chắn có vai trò quan trọng. Phương pháp toán tử FK được sử dụng cùng với phép biến đổi tọa độ Kustaanheimo-Stiefel và hàm sóng được khai triển theo bộ hàm cơ sở của dao động tử điều hòa bốn chiều. Tuy nhiên, để tính được yếu tố ma trận cho thành phần tương tác có thế màn chắn, cần phát triển phương pháp đại số. Điều này được làm trong bài báo với kết quả là biểu thức giải tích cho yếu tố ma trận thu được tường minh dưới dạng chuỗi cho phép xây dựng một chương trình FORTRAN tính toán năng lượng với độ chính xác cao, lên đến 32 chữ số thập phân. Giá trị số đưa ra minh họa trong bài báo với tham số màn chắn từ 0 đến 1 a.u. và cho trạng thái 1s.

**Từ khóa:** phương pháp đại số; nguyên tử hydro; thế màn chắn; hệ nguyên tử ba chiều; toán tử sinh; hủy; bộ hàm cơ sở

## 1. Giới thiệu

Nguyên tử hydro là bài toán đơn giản, có lời giải chính xác giải tích, nên thường được dùng để kiểm chứng các phát triển mới của các phương pháp khác nhau trước khi áp dụng cho các bài toán nguyên tử phức tạp hơn. Cho đến nay, đã có nhiều công trình nghiên cứu liên quan đến nguyên tử hydro, nguyên tử hydro trong từ trường (Cao, Ly, Hoang, & Le, 2019; Sasmal, 2014; Thirumalai, & Heyl, 2009), nguyên tử hydro trong điện trường (Bahar, & Soylyu, 2014; Main, Schwacke, & Wunner, 1998). Trong những năm qua, nguyên tử hydro trong plasma cũng đã được nghiên cứu bởi nhiều tác giả (Bahar, & Soylyu,

---

*Cite this article as:* Ly Duy Nhat, & Hoang Do Ngoc Tram (2020). Highly accurate numerical energy for the ground state of a hydrogen atom in a plasma with the presence of a uniform magnetic field. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 17(6), 1019-1029.

2014, 2015, 2016; Kar, & Ho, 2005; Lin, & Ho, 2011; Paul, & Ho, 2009, 2010, 2011; Saha, Mukherjee, & Diercksen, 2002; Saha, Mukherjee, Mukherjee, Fricke, 2011; Soylu, 2012). Công trình Saha (2002) đã nghiên cứu các đặc tính của nguyên tử hydro trong plasma Debye bằng phương pháp nhiễu loạn, trong đó mô hình thế màn chắn Coulomb tĩnh (Static Screened Coulomb – SSC) được sử dụng với dạng Yukawa cho phần chắn. Sau đó, Paul (2009) dùng thế màn chắn SSC để tìm trị riêng năng lượng và hàm sóng cho các trạng thái bằng phương pháp Ritz (Ritz variation method). Paul (2011) dựa trên mô hình thế màn chắn Coulomb tổng quát dạng mũ và cosine (Generalized Exponential Cosine Screened Coulomb – GECSC) để tính các trị riêng năng lượng bằng phương pháp Ritz. Thế GECSC được lấy từ mô hình thế ECSC do Shukla đề xuất năm 2008 (Shukla, & Eliasson, 2008). Sau đó, Soylu (2012) đã đề xuất mô hình thế tổng quát hơn (More Generalized Exponential Cosine Screened Coulomb – MGECS) để nghiên cứu các đặc tính của nguyên tử hydro trong plasma. Các kết quả này tiếp tục được tác giả phát triển khi có mặt của điện trường cho mô hình hai chiều (Bahar, & Soylu, 2014, 2015, 2016).

Trong các công trình nêu trên, các tác giả đều giải số phương trình Schrödinger có thế màn chắn với độ chính xác đến 6 chữ số thập phân. Trong khi đó, năng lượng các mức kích thích bậc cao rất gần nhau, đặc biệt khi xét đến thế màn chắn, do đó cần phải giải số phương trình Schrödinger với độ chính xác cao hơn. Phương pháp toán tử FK được giới thiệu trong cuốn chuyên khảo (Feranchuk, Ivanov, Le, & Ulyanekov, 2015) có một ưu điểm là cho nghiệm hội tụ nhanh và có độ chính xác rất cao. Các ưu điểm này đã được thể hiện trong các công trình mới đây (Cao, Ly, & Hoang, 2016; Cao et al., 2019; Hoang, Nguyen, Hoang, & Le, 2016; Le, Hoang, & Le, 2017; Le, & Hoang, 2017). Trong công trình này, chúng tôi sẽ áp dụng phương pháp toán tử FK cùng phép biến đổi Kustaanheimo-Stiefel (xem trong (Bartsch, 2003)) để tính phổ năng lượng của nguyên tử hydro đặt trong từ trường và môi trường plasma theo mô hình thế chắn SSC. Kết quả thu được là nghiệm chính xác bằng số có độ hội tụ đến 32 chữ số thập phân cho trạng thái cơ bản 1s.

Cấu trúc bài báo gồm ba phần chính: phương trình Schrödinger cho bài toán nguyên tử hydro có thế màn chắn, yếu tố ma trận thế màn chắn, kết quả và thảo luận, và kết luận.

## 2. Phương trình Schrödinger cho bài toán nguyên tử hydro có thế màn chắn

Phương trình Schrödinger cho nguyên tử hydro trong từ trường có xét đến thế màn chắn Yukawa trong hệ nguyên tử được viết dưới dạng

$$\hat{H}\psi = \varepsilon\psi,$$

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) - \frac{i}{2}\gamma\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) + \frac{1}{8}\gamma^2(x^2 + y^2) - \frac{Ze^{-\lambda\sqrt{x^2+y^2+z^2}}}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \quad (1)$$

với  $\lambda$  là tham số màn chắn. Do mối liên hệ với bán kính Debye theo hệ thức  $D = 1/\lambda$  (B. Saha et al., 2002) nên tham số  $\lambda$  phụ thuộc vào nhiệt độ và mật độ của plasma. Đơn vị độ

dài là bán kính Bohr  $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2 / m_e e^2 = 0.5292 \text{ \AA}$ ; đơn vị năng lượng là Hartree  $E_h = \hbar^2 / m_e a_0^2 = 27.21 \text{ eV}$ ; đơn vị từ trường  $B_0 = \hbar / ea_0^2 = 2.3505 \times 10^5 \text{ T}$ . Trong công trình này, chúng tôi tính toán cho nguyên tử hydro nên số hiệu nguyên tử  $Z = 1$ .

Phương trình (1) đã được giải thành công bằng phương pháp toán tử FK trong trường hợp không có thế màn chắn,  $\lambda = 0$ , và đã công bố trong công trình (Cao et al., 2019). Bằng cách tương tự, trong công trình này chúng tôi sẽ giải phương trình (1) cho cả trường hợp  $\lambda$  bất kì theo các bước sau:

(i) Qua phép biến đổi Kustaanheimo-Stiefel

$$x = 2u_1u_2 + 2v_1v_2, \quad y = 2u_1v_2 - 2u_2v_1, \quad z = u_1^2 - u_2^2 + v_1^2 - v_2^2, \quad \phi = \arctan \frac{v_1}{u_1} + \arctan \frac{v_2}{u_2},$$

phương trình (1) được viết thành

$$\left\{ -\frac{1}{8} \left( \frac{\partial^2}{\partial u_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial v_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial u_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial v_2^2} \right) - \left( \epsilon - \frac{m}{2} \gamma \right) (u_1^2 + v_1^2 + u_2^2 + v_2^2) + \frac{1}{2} \gamma^2 (u_1^2 + v_1^2)(u_2^2 + v_2^2)(u_1^2 + v_1^2 + u_2^2 + v_2^2) - Z e^{-\lambda(u_1^2 + v_1^2 + u_2^2 + v_2^2)} \right\} \psi(u, v) = 0. \quad (2)$$

Ở đây, góc  $\phi: 0 \rightarrow 2\pi$  được đưa vào như một biến số thêm, khi chuyển từ không gian  $(u, v)$  về không gian  $(x, y, z)$  ta cần điều kiện  $\partial\psi / \partial\phi = 0$  để xác định.

(ii) Biểu diễn Hamiltonian trong phương trình (2) qua các toán tử sinh, hủy  $\hat{a}_s, \hat{a}_s^+, \hat{b}_s, \hat{b}_s^+$  ( $s=1,2$ ) sau

$$\begin{aligned} \hat{a}_s &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\alpha}_s - i\hat{\beta}_s), \quad \hat{a}_s^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\alpha}_s^+ + i\hat{\beta}_s^+), \\ \hat{b}_s &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\alpha}_s + i\hat{\beta}_s), \quad \hat{b}_s^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\alpha}_s^+ - i\hat{\beta}_s^+), \end{aligned} \quad (3)$$

trong đó, các toán tử sinh, hủy  $\hat{\alpha}_s, \hat{\alpha}_s^+, \hat{\beta}_s, \hat{\beta}_s^+$  được định nghĩa

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_s &= \sqrt{\omega} \left( u_s + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial u_s} \right), \quad \hat{\alpha}_s^+ = \sqrt{\omega} \left( u_s - \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial u_s} \right), \\ \hat{\beta}_s &= \sqrt{\omega} \left( v_s + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial v_s} \right), \quad \hat{\beta}_s^+ = \sqrt{\omega} \left( v_s - \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial v_s} \right). \end{aligned}$$

Việc tổ hợp như biểu thức (3) giúp cho moment động lượng theo trục Oz:  $\hat{l}_z$  trở thành toán tử chéo để dễ dàng áp dụng tính chất bảo toàn của đại lượng vật lý này. Ta thu được Hamiltonian dưới dạng đại số

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{1}{4}\omega(\hat{a}_1\hat{b}_1 + \hat{a}_2\hat{b}_2 + \hat{a}_1^+\hat{b}_1^+ + \hat{a}_2^+\hat{b}_2^+ - \hat{a}_1^+\hat{a}_1 - \hat{b}_1^+\hat{b}_1 - \hat{a}_2^+\hat{a}_2 - \hat{b}_2^+\hat{b}_2 - 2) \\ & -\frac{1}{2\omega}\left(\varepsilon - \frac{m}{2}\gamma\right)\left(\hat{a}_1\hat{b}_1 + \hat{a}_1^+\hat{b}_1^+ + \hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{a}_2\hat{b}_2 + \hat{a}_2^+\hat{b}_2^+ + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 2\right) \\ & +\frac{1}{16\omega^3}\gamma^2\left(\hat{a}_1\hat{b}_1 + \hat{a}_1^+\hat{b}_1^+ + \hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + 1\right)\left(\hat{a}_2\hat{b}_2 + \hat{a}_2^+\hat{b}_2^+ + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1\right) \\ & \times\left(\hat{a}_1\hat{b}_1 + \hat{a}_1^+\hat{b}_1^+ + \hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{a}_2\hat{b}_2 + \hat{a}_2^+\hat{b}_2^+ + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 2\right) \\ & -Ze^{-\frac{\lambda}{2\omega}(\hat{a}_1\hat{b}_1 + \hat{a}_1^+\hat{b}_1^+ + \hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{a}_2\hat{b}_2 + \hat{a}_2^+\hat{b}_2^+ + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 2)}. \end{aligned} \quad (4)$$

Ở đây, trong biểu thức (4), nhờ vào tính chất bảo toàn moment động lượng theo trục Oz, ta đã thay toán tử  $\hat{l}_z$  bằng trị riêng của nó theo phương trình  $\hat{l}_z \psi(u, v) = m \psi(u, v)$ .

(iii) Sau đó, chúng tôi sử dụng bộ hàm cơ sở là hàm dao động tử điều hòa dạng đại số và thực hiện các tương tác đại số để tính các yếu tố ma trận một cách dễ dàng (xem chi tiết về bộ hàm cơ sở trong (Cao et al., 2019)). Tuy nhiên, trong phương trình (4) có thành phần mà toán tử sinh, hủy ở dạng mũ cho nên việc tính các yếu tố ma trận không phải tầm thường. Trong bước này, chúng tôi sẽ tập trung tính yếu tố ma trận

$$V_{k_1 k_2, j_1 j_2}(\omega, \lambda) = -Z \langle k_1 k_2 m | e^{-\frac{\lambda}{2\omega}(\hat{a}_1\hat{b}_1 + \hat{a}_1^+\hat{b}_1^+ + \hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{a}_2\hat{b}_2 + \hat{a}_2^+\hat{b}_2^+ + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 2)} | j_1 j_2 m \rangle. \quad (5)$$

(iv) Giải phương trình hàm riêng, vector riêng để thu phổ năng lượng và hàm sóng.

### 3. Yếu tố ma trận của thế màn chắn

#### 3.1. Dạng chuẩn của toán tử dạng e mũ

Chúng tôi sẽ sử dụng các toán tử sinh, hủy  $\hat{a}_s(\omega), \hat{a}_s^+(\omega), \hat{b}_s(\omega), \hat{b}_s^+(\omega)$  ( $s = 1, 2$ ), được định nghĩa bằng biểu thức (3), cùng với các giao hoán tử của chúng cho việc tính toán các yếu tố ma trận bằng phương pháp đại số. Trước hết, xét toán tử

$$\hat{S} = e^{-\frac{\lambda}{2\omega}(\hat{a}_1\hat{b}_1 + \hat{a}_1^+\hat{b}_1^+ + \hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{a}_2\hat{b}_2 + \hat{a}_2^+\hat{b}_2^+ + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 2)}, \quad (6)$$

ta thấy nó có thể tách thành  $\hat{S} = \hat{S}_1 \hat{S}_2$  với

$$\hat{S}_1 = e^{-\frac{\lambda}{2\omega}(\hat{a}_1\hat{b}_1 + \hat{a}_1^+\hat{b}_1^+ + \hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + 1)} \quad \text{và} \quad \hat{S}_2 = e^{-\frac{\lambda}{2\omega}(\hat{a}_2\hat{b}_2 + \hat{a}_2^+\hat{b}_2^+ + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1)}$$

Điều này dễ dàng thấy do các toán tử sinh, hủy với chỉ số 1 và các toán tử với chỉ số 2 giao hoán với nhau. Để có thể tính toán, các toán tử  $\hat{S}_1, \hat{S}_2$  này sẽ được đưa về dạng chuẩn theo nghĩa là một tích, trong đó toán tử sinh bên phải, toán tử hủy bên trái và toán tử trung hòa ở giữa. Do  $\hat{S}_1$  và  $\hat{S}_2$  có cùng dạng nên dưới đây ta chỉ trình bày chi tiết các bước chuẩn hóa toán tử  $\hat{S}_1$ .

Để tinh gọn các toán tử của hàm e mũ, chúng tôi đặt các toán tử mới

$$\hat{M}_1 = \hat{a}_1\hat{b}_1, \quad \hat{M}_1^+ = \hat{a}_1^+\hat{b}_1^+, \quad \hat{N}_1 = \hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + 1, \quad (7)$$

qua đó viết lại toán tử  $\hat{S}_1 = e^{-\eta(\hat{M}_1 + \hat{M}_1^+ + \hat{N}_1)}$  với  $\eta = \lambda / 2\omega$ . Để dàng kiểm chứng các toán tử (7) tạo nên một đại số kín thể hiện qua các hệ thức giao hoán:

$$[\hat{M}_1, \hat{M}_1^+] = \hat{N}_1, [\hat{M}_1, \hat{N}_1] = 2\hat{M}_1, [\hat{N}_1, \hat{M}_1^+] = 2\hat{M}_1^+. \quad (8)$$

Sử dụng các giao hoán tử (8) và thực hiện các bước chuẩn hóa toán tử được trình bày chi tiết tại các biểu thức (6.41–6.44) trang 232 của tài liệu chuyên khảo (Feranchuk et al., 2015), ta thu được kết quả

$$\hat{S}_1 = e^{-\eta(\hat{M}_1 + \hat{M}_1^+ + \hat{N}_1)} = e^{-\frac{\eta}{1+\eta}\hat{M}_1^+} e^{-\ln(1+\eta)\hat{N}_1} e^{-\frac{\eta}{1+\eta}\hat{M}_1}. \quad (9)$$

Tương tự như vậy, ta thu được

$$\hat{S}_2 = e^{-\eta(\hat{M}_2 + \hat{M}_2^+ + \hat{N}_2)} = e^{-\frac{\eta}{1+\eta}\hat{M}_2^+} e^{-\ln(1+\eta)\hat{N}_2} e^{-\frac{\eta}{1+\eta}\hat{M}_2}.$$

### 3.2. Tính các yếu tố ma trận

Một trong những cách để giải phương trình Schrödinger là tìm hàm sóng dưới dạng khai triển tuyến tính theo một bộ hàm cơ sở cho trước. Khi đó thay vì giải phương trình vi phân đạo hàm riêng bậc hai ta sẽ giải hệ phương trình tuyến tính với hệ số khai triển của hàm sóng và năng lượng là các ẩn số cần tìm. Trong bài này, chúng tôi sẽ sử dụng bộ hàm cơ sở là các hàm sóng của nguyên tử hydro đối xứng trụ do nguyên tử hydro trong từ trường mất đối xứng cầu nhưng vẫn giữ nguyên đối xứng trụ theo trục dọc theo véc-tơ từ trường. Bộ hàm cơ sở này qua phép biến đổi Kustaanheimo-Stiefel sẽ là hàm sóng dao động từ điều hòa bốn chiều và có thể viết dưới dạng đại số qua các toán tử sinh, hủy như được xây dựng trong (Feranchuk et al., 2015) dưới dạng:

$$|k_1, k_2, m(\omega)\rangle = \frac{1}{\sqrt{k_1! k_2! (k_1 + |m|)! (k_2 + |m|)!}} (\hat{M}_1^+)^{k_1} (\hat{M}_2^+)^{k_2} |0, 0, m(\omega)\rangle. \quad (10)$$

Ở đây, ta có  $|0, 0, m(\omega)\rangle = (\hat{a}_1^+ \hat{b}_2^+)^{|m|} |0(\omega)\rangle$  với  $m \geq 0$  hoặc  $|0, 0, m(\omega)\rangle = (\hat{a}_2^+ \hat{b}_1^+)^{|m|} |0(\omega)\rangle$  với  $m < 0$ . Trạng thái chân không  $|0(\omega)\rangle$  được định nghĩa từ các phương trình:

$$\hat{a}_1 |0(\omega)\rangle = 0, \quad \hat{a}_2 |0(\omega)\rangle = 0, \quad \hat{b}_1 |0(\omega)\rangle = 0, \quad \hat{b}_2 |0(\omega)\rangle = 0 \quad (11)$$

với điều kiện chuẩn hóa  $\langle 0 | 0(\omega) \rangle = 1$ .

Dùng các biểu thức quen thuộc của toán tử sinh, hủy tác dụng lên véc-tơ trạng thái, có trong sách giáo khoa về cơ lượng tử, ta có thể thu được các biểu thức tác dụng sau:

$$\begin{aligned} \hat{M}_1 |k_1, k_2, m\rangle &= \sqrt{k_1(k_1 + |m|)} |k_1 - 1, k_2, m\rangle, \\ \hat{M}_1^+ |k_1, k_2, m\rangle &= \sqrt{(k_1 + 1)(k_1 + |m| + 1)} |k_1 + 1, k_2, m\rangle, \\ \hat{N}_1 |k_1, k_2, m\rangle &= (2k_1 + |m| + 1) |k_1, k_2, m\rangle. \end{aligned} \quad (12)$$

Ta cũng có biểu thức tương tự như vậy cho tác dụng của các toán tử  $\hat{M}_2, \hat{M}_2^+, \hat{N}_2$ .

Ta tính yếu tố ma trận  $V_{k_1 k_2, j_1 j_2}$  bằng cách khai triển các thành phần dạng mũ trong các toán tử  $\hat{S}_1$  và  $\hat{S}_2$  theo chuỗi Taylor. Tiếp theo, tương tác đại số của các toán tử  $\hat{M}_s, \hat{M}_s^+, \hat{N}_s$  với  $(s=1,2)$  lên bộ hàm cơ sở  $|j_1 j_2 m\rangle$  theo các biểu thức (12). Các bước tính toán chi tiết tương tự như được trình bày trong phụ lục của (Cao et al., 2019). Kết quả thu được

$$(i) \hat{S}_1 |j_1 j_2 m\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^{k-j_1} \frac{\eta^{k-j_1}}{(1+\eta)^{j_1+|m|+k+1}} A_{k j_1 m}(\eta) |k, j_2 m\rangle, \tag{13}$$

trong đó

$$A_{klm}(\eta) = \sum_{p=\max(0, l-k)}^l \sqrt{\binom{l}{p} \binom{l+|m|}{p} \binom{k}{k-l+p} \binom{k+|m|}{k-l+p}} \eta^{2p}. \tag{14}$$

(ii)

$$\begin{aligned} \hat{S}_2 \hat{S}_1 |j_1 j_2 m\rangle &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^{k-j_1} \frac{\eta^{k-j_1}}{(1+\eta)^{j_1+|m|+k+1}} A_{k j_1 m}(\eta) \hat{S}_2 |k, j_2 m\rangle \\ &= \sum_{k,l=0}^{\infty} (-1)^{k-j_1+l-j_2} \frac{\eta^{k-j_1+l-j_2}}{(1+\eta)^{j_1+k+j_2+l+2|m|+2}} A_{k j_1 m}(\eta) A_{l j_2 m}(\eta) |k, l, m\rangle. \end{aligned} \tag{15}$$

(iii)

$$\begin{aligned} V_{k_1 k_2, j_1 j_2}(\eta) &= -Z \langle k_1 k_2 m | \hat{S}_2 \hat{S}_1 |j_1 j_2 m\rangle \\ &= -Z \langle k_1 k_2 m | \sum_{k,l=0}^{\infty} (-1)^{k-j_1+l-j_2} \frac{\eta^{k-j_1+l-j_2}}{(1+\eta)^{j_1+k+j_2+l+2|m|+2}} A_{k j_1 m}(\eta) A_{l j_2 m}(\eta) |k, l, m\rangle \\ &= -Z \frac{(-\eta)^{k_1-j_1+k_2-j_2}}{(1+\eta)^{j_1+k_1+j_2+k_2+2|m|+2}} A_{k_1 j_1 m}(\eta) A_{k_2 j_2 m}(\eta). \end{aligned} \tag{16}$$

Trong trường hợp riêng, khi không có thế màn chắn,  $\lambda=0$ , ta có kết quả  $V_{k_1 k_2, j_1 j_2}(0) = -Z \delta_{k_1, j_1} \delta_{k_2, j_2}$ . Khi đó nếu không có từ trường, bài toán thuần túy nguyên tử hydro với nghiệm giải tích. Các hàm sóng là  $R_n(r) Y_{lm}(\varphi, \theta)$  ứng với các mức năng lượng  $E_n = -1/2n^2, (n=1,2,3\dots)$ .

Các yếu tố ma trận còn lại hoàn toàn như trong bài toán nguyên tử hydro trong từ trường không có thế màn chắn và đã được đưa ra trong Phụ lục của (Cao et al., 2019). Ví dụ như với yếu tố ma trận

$$K_{j_1 j_2, k_1 k_2} = \frac{\omega}{4} \langle j_1 j_2 m | (\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + 2 - \hat{M}_1 - \hat{M}_2 - \hat{M}_1^+ - \hat{M}_2^+) | k_1 k_2 m \rangle,$$

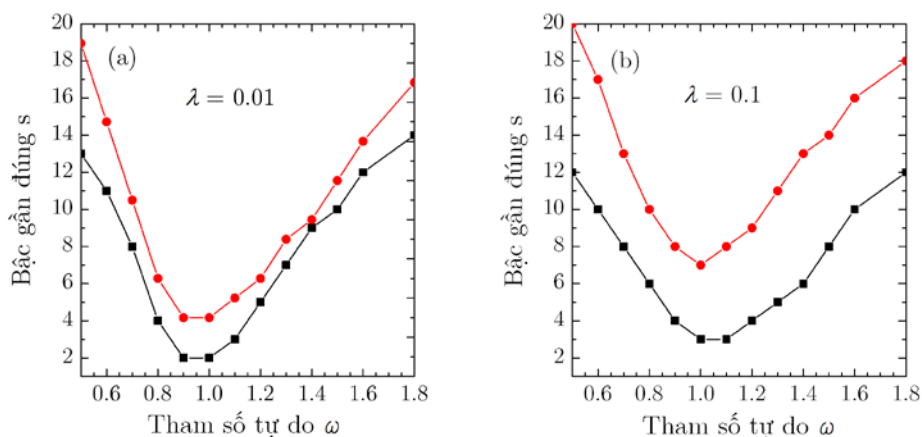
ta dễ dàng tính được như sau:

$$\begin{aligned}
 K_{k_1 k_2, j_1 j_2}(\omega) = \frac{\omega}{4} & \left[ 2(j_1 + j_2 + |m| + 1) \delta_{k_1, j_1} \delta_{k_2, j_2} - \sqrt{j_1(j_1 + |m|)} \delta_{k_1, j_1 - 1} \delta_{k_2, j_2} \right. \\
 & - \sqrt{j_2(j_2 + |m|)} \delta_{k_2, j_2 - 1} \delta_{k_1, j_1} - \sqrt{(j_1 + 1)(j_1 + |m| + 1)} \delta_{k_1, j_1 + 1} \delta_{k_2, j_2} \\
 & \left. - \sqrt{(j_2 + 1)(j_2 + |m| + 1)} \delta_{k_2, j_2 + 1} \delta_{k_1, j_1} \right]. \quad (17)
 \end{aligned}$$

#### 4. Kết quả và thảo luận

Với các yếu tố ma trận được tính theo các biểu thức (16), (17), một chương trình giải số bằng phương pháp toán tử FK được viết bằng ngôn ngữ FORTRAN có sử dụng thư mục “subroutine DSYGVX” trong gói LAPACK (Netlib.org. LAPACK: Linear Algebra PACKage, n.d.) với các biến số thực được viết lại là REAL\*16 tương đương độ chính xác 32 chữ số thập phân. Chương trình có thể cung cấp miễn phí theo yêu cầu của người dùng và sẽ được công bố trên các tạp chí tương ứng.

Một trong điểm nổi bật của phương pháp toán tử FK là có đưa vào tham số tự do  $\omega$  qua biểu thức (3) định nghĩa các toán tử sinh, hủy. Chọn giá trị thích hợp cho tham số này ta có thể thu được độ chính xác cao khi tính năng lượng. Điều đó cũng tương đương với tốc độ hội tụ cao khi tính năng lượng với độ chính xác cho trước. Tuy tính chất này của tham số tự do được quan sát ở rất nhiều hệ khác nhau, xem các ví dụ trong (Feranchuk et al., 2015), nhưng với mỗi trường hợp mới ta cần kiểm chứng lại bằng số. Với bài toán đang xét ta cũng tìm được miền giá trị tham số cho tốc độ hội tụ cao nhất. Trên Hình 1, thể hiện cho ví dụ với tham số màn chắn  $\lambda = 0.01$  (Hình 1a) và  $\lambda = 0.1$  (Hình 1b) và cho trường hợp không có từ trường và năng lượng trạng thái 1s được tính với độ chính xác đến 15 chữ số thập phân (đường màu đỏ) và 10 chữ số thập phân (đường màu đen). Trục tung biểu diễn số bậc gần đúng cần phải tính để đạt được độ chính xác đã cho ứng với các giá trị tham số tự do khác nhau, biểu diễn trên trục hoành. Hình 1 cho thấy vùng tham số tự do tối ưu tồn tại và nó gần như nhau với độ chính xác 10 hay 15 chữ số thập phân. Thử cho nhiều độ chính xác khác nhau ta kết luận miền tham số tối ưu không phụ thuộc vào độ chính xác cần tính. Điều này cho phép ta tính năng lượng với độ chính xác thấp, ví dụ là đến 10 chữ số thập phân, với các tham số tự do khác nhau và qua đó xác định miền tham số tối ưu. Sau đó sử dụng tham số đó để tính năng lượng với độ chính xác lên đến 32 chữ số thập phân. Trong chương trình tính toán, giá trị tham số tối ưu đã được tính trước cho một số trường hợp ứng với cường độ từ trường khác nhau từ  $\gamma = 0 \rightarrow 100$  với bước nhảy  $\Delta\gamma = 0.1 \times (\gamma + 1)$  và tham số màn chắn  $\lambda = 0 \rightarrow 1$  với bước nhảy  $\Delta\lambda = 0.05$ . Các trường hợp khác thu được bằng nội suy. Như vậy, trong chương trình tính toán đã tích hợp các giá trị tối ưu của tham số tự do.



**Hình 1.** Độ hội tụ thể hiện qua bậc gần đúng  $s$  theo tham số tự do  $\omega$  cho nghiệm được tính với độ chính xác đến 15 chữ số thập phân (đường màu đỏ) và 10 chữ số thập phân (đường màu đen) cho  $\gamma = 0$  và hai trường hợp của tham số chắn: (a)  $\lambda = 0.01$  và (b)  $\lambda = 0.1$ .

Chương trình được kiểm chứng cho giá trị năng lượng 1s chính xác đến 32 chữ số thập phân với tham số màn chắn  $\lambda$  có giá trị từ 0 đến 1.0 a.u. ứng với từ trường  $\gamma$  có giá trị từ 0 đến 100. Để minh họa, trong Bảng 1 đưa ra một số kết quả cho trường hợp không có từ trường, các kết quả được so sánh với các công trình khác (Paul, & Ho, 2009; Saha et al., 2002; Soyulu, 2012) và Bảng 2 cho trường hợp từ trường  $\gamma = 1$ . Trong trường hợp  $\lambda > 0.02$  thì bậc gần đúng ( $s$ ) của hàm sóng phải được chọn lên đến 180, tương đương với số lượng phần tử ma trận lên tới  $8281 \times 8281$  đối với bộ hàm cơ sở đối xứng.

Chương trình có thể phát triển cho các trạng thái kích thích cũng như cho các dạng thể màn chắn khác như GECSC và công bố trong công trình tiếp theo.

**Bảng 1.** Các giá trị năng lượng mức cơ bản 1s theo tham số màn chắn  $\lambda$  trong hệ đơn vị nguyên tử trong trường hợp từ trường  $\gamma = 0$

$\lambda$	$\epsilon$	Tài liệu (Soylu, 2012)	Tài liệu (Paul, & Ho, 2009)	Tài liệu (Saha et al., 2002)
0.000	-0.50000000000000000000000000000000			-0.50000
0.010	-0.4900745067466941718092082523330	-0.490075	-0.490075	-0.49008
0.050	-0.4518164285245055438562170757554	-0.451816	-0.451816	-0.45182
0.100	-0.4070580306134031567545070703611	-0.407058	-0.405705	-0.40705
1.000	-0.0102857899900176968047742153111			0.16598



**Bảng 2.** Các giá trị năng lượng mức cơ bản 1s theo tham số màn chắn  $\lambda$  trong hệ đơn vị nguyên tử trong trường hợp từ trường  $\gamma = 1$

$\lambda$	$\varepsilon$
0.000	-0.3311688967331580356102982
0.010	-0.3212281942984668084487882
0.050	-0.2826224109660852632933711
0.100	-0.2368473261576955381981450
1.000	0.2593299390848640488750535

### 5. Kết luận

Qua phép biến đổi Kustaanheimo-Stiefel, chúng tôi đã áp dụng thành công phương pháp toán tử FK cho bài toán nguyên tử hydro trong môi trường plasma với thế màn chắn Yukawa. Chúng tôi đã giải phương trình Schrödinger cho nguyên tử hydro trong từ trường có xét thế màn chắn và thu được năng lượng với độ chính xác đến 32 chữ số thập phân cho trạng thái cơ bản 1s và so sánh với các kết quả tính số trước đây cho thấy sự vượt trội của độ chính xác. Một chương trình FORTRAN được viết để tự động hóa hoàn toàn tính toán cho người dùng. Chương trình sẽ được phát triển và kiểm chứng tiếp cho các trạng thái kích thích cao, độ thay đổi từ trường rộng và miền tham số chắn mở rộng. Ngoài ra, có thể phát triển cho bài toán heli và các nguyên tử cao hơn.

- ❖ **Tuyên bố về quyền lợi:** Các tác giả xác nhận hoàn toàn không có xung đột về quyền lợi.
- ❖ **Lời cảm ơn:** Bài báo nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh qua Đề tài trọng điểm cấp cơ sở mã số CS.2019.19.43TĐ. Các tác giả chân thành cảm ơn GS. TSKH. Lê Văn Hoàng đã hướng dẫn, đặt vấn đề và góp ý, chỉnh sửa cho bài báo.

### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Bahar, M. K., & Soylu, A. (2014). The hydrogen atom in plasmas with an external electric field. *Physics of Plasmas*, 21(9), 092703. <https://doi.org/10.1063/1.4894684>
- Bahar, M. K., & Soylu, A. (2015). Confinement effects of magnetic field on two-dimensional hydrogen atom in plasmas. *Physics of Plasmas*, 22(5), 052701. <https://doi.org/10.1063/1.4919613>
- Bahar, M. K., & Soylu, A. (2016). Probe of hydrogen atom in plasmas with magnetic, electric, and Aharonov-Bohm flux fields. *Physics of Plasmas*, 23(9), 092712. <https://doi.org/10.1063/1.4963772>
- Bartsch, T. (2003). The Kustaanheimo–Stiefel transformation in geometric algebra. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36(25), 6963-6978. <https://doi.org/10.1088/0305-4470/36/25/305>
- Cao, H. T. X., Ly, D. N., & Hoang, D. N. T. (2016). Năng lượng trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro trong từ trường đều có cường độ bất kỳ [Ground state energy of a hydrogen atom in a uniform magnetic field with arbitrary strength]. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 12, 39-51.

- Cao, T. X. H., Ly, D. N., Hoang, N.T. D., & Le, V. H. (2019). High-accuracy numerical calculations of the bound states of a hydrogen atom in a constant magnetic field with arbitrary strength. *Computer Physics Communications*, 240, 138-151. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2019.02.013>
- Feranchuk, I., Ivanov, A., Le, V.-H., & Ulyanenko, A. (2015). *Non-perturbative Description of Quantum Systems* (Vol. 894). Cham: Springer International Publishing. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-13006-4>
- Hoang, N. T. D., Nguyen, D. A. P., Hoang, V. H., & Le, V. H. (2016). Highly accurate analytical energy of a two-dimensional exciton in a constant magnetic field. *Physica B: Condensed Matter*, 495, 16-20. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2016.04.038>
- Kar, S., & Ho, Y. K. (2005). Electron affinity of the hydrogen atom and a resonance state of the hydrogen negative ion embedded in Debye plasmas. *New Journal of Physics*, 7, 141-141. <https://doi.org/10.1088/1367-2630/7/1/141>
- Le, D. N., Hoang, N.T. D., & Le, V.H. (2017). Exact analytical solutions of a two-dimensional hydrogen atom in a constant magnetic field. *Journal of Mathematical Physics*, 58(4), 042102. <https://doi.org/10.1063/1.4979618>
- Le, D. N., & Hoang, D. N. T. (2017). Binding Energy of Exciton in Monolayer Semiconductor Ws 2 With Yukawa-Like Screening Potential. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 14(9), 43-50. Retrieved from <http://journal.hcmue.edu.vn/index.php/hcmuejos/issue/archive>
- Lin, C. Y., & Ho, Y. K. (2011). The photoionization of excited hydrogen atom in plasmas. *Computer Physics Communications*, 182(1), 125-129. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2010.06.013>
- Main, J., Schwacke, M., & Wunner, G. (1998). Hydrogen atom in combined electric and magnetic fields with arbitrary mutual orientations. *Physical Review A*, 57(2), 1149-1157. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.57.1149>
- Netlib.org. LAPACK: Linear Algebra PACKage. (n.d.). Subroutine DSYGVX.f. Retrieved from <http://www.netlib.org/lapack/explore-ht-ml/d2/d97/dsyevx-8f.html>
- Paul, S., & Ho, Y. K. (2009). Hydrogen atoms in Debye plasma environments. *Physics of Plasmas*, 16(6), 063302. <https://doi.org/10.1063/1.3152602>
- Paul, S., & Ho, Y. K. (2010). Two-colour three-photon transitions in a hydrogen atom embedded in Debye plasmas. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 43(6), 065701. <https://doi.org/10.1088/0953-4075/43/6/065701>
- Paul, S., & Ho, Y. K. (2011). Solution of the generalized exponential cosine screened Coulomb potential. *Computer Physics Communications*, 182(1), 130-133. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2010.06.014>
- Saha, B., Mukherjee, P. K., & Dierksen, G. H. F. (2002). Energy levels and structural properties of compressed hydrogen atom under Debye screening. *Astronomy & Astrophysics*, 396(1), 337-344. <https://doi.org/10.1051/0004-6361:20021350>
- Saha, J. K., Mukherjee, T. K., Mukherjee, P. K., & Fricke, B. (2011). Hyperpolarizability of hydrogen atom under spherically confined Debye plasma. *The European Physical Journal D*, 62(2), 205-211. <https://doi.org/10.1140/epjd/e2011-10668-4>

- Sasmal, G. P. (2014). On computation for a hydrogen atom in arbitrary magnetic fields using finite volume method. *Journal of Atomic and Molecular Sciences*, 5(3), 187-205. <https://doi.org/10.4208/jams.110813.021414a>
- Shukla, P. K., & Eliasson, B. (2008). Screening and wake potentials of a test charge in quantum plasmas. *Physics Letters A*, 372(16), 2897-2899. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2007.12.067>
- Soylu, A. (2012). Plasma screening effects on the energies of hydrogen atom. *Physics of Plasmas*, 19(7), 072701. <https://doi.org/10.1063/1.4736947>
- Thirumalai, A., & Heyl, J. S. (2009). Hydrogen and helium atoms in strong magnetic fields. *Physical Review A*, 79(1), 012514. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.79.012514>

---

**HIGHLY ACCURATE NUMERICAL ENERGY  
FOR THE GROUND STATE OF A HYDROGEN ATOM  
IN A PLASMA WITH THE PRESENCE OF A UNIFORM MAGNETIC FIELD**

*Ly Duy Nhat*<sup>1,2\*</sup>, *Hoang Do Ngoc Tram*<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Ho Chi Minh City University of Education, Vietnam*

<sup>2</sup>*Vietnam Atomic Energy Institute, Vietnam*

*\*Corresponding author: Ly Duy Nhat – Email: nhatld@hcmue.edu.vn*

*Received: March 31, 2020; Revised: May 21, 2020; Accepted: June 10, 2020*

**ABSTRACT**

*The FK operator method has been recently applied successfully to the problem of a hydrogen atom in a magnetic field with any intensity. In this work, this method is applied more generally, considering the screening effect. Screening effect plays an important role in practical astronomy research on hydrogen atom in a plasma environment. In this paper, the FK operator method is combined with the Kustaanheimo-Stiefel transformation, so the wavefunction is expanded in terms of the eigenfunctions of a four-dimensional harmonic oscillator. There is an improvement in algebraic calculations to obtain the matrix elements of the screening term in the Hamiltonian, which results in the explicit expressions of the matrix elements in the series expansion. These results help to build a FORTRAN program finding highly accurate numerical energies with the precision up to 32 decimal places. For an illustration purpose, energies for the ground state with the screening parameter ranging from 0 to 1 a.u. are shown in the paper.*

**Keywords:** algebraic method; hydrogen atom; screened Coulomb potential; annihilation and creation operators; basic set