

THAM SỐ TỰ DO VỚI SỰ HỘI TỤ CỦA PHƯƠNG PHÁP TOÁN TỬ FK

HOÀNG ĐỖ NGỌC TRÂM*, LÊ VĂN HOÀNG**

TÓM TẮT

Một điều kiện phổ quát được đưa ra cho việc chọn tham số tự do khi áp dụng phương pháp toán tử FK để giải phương trình Schrödinger. Chúng tôi chỉ ra rằng tốc độ hội tụ của chuỗi bô chính được cải thiện đáng kể bằng cách chọn tối ưu tham số tự do. Áp dụng cho trường hợp dao động tử phi điều hòa, nghiệm chính xác bằng số (hàm sóng và năng lượng) được tính bằng một giải thuật rất nhanh dựa trên phương pháp toán tử FK và điều kiện chọn tham số tối ưu.

Từ khóa: phương pháp toán tử FK, phương trình Schrödinger, tham số tự do, tốc độ hội tụ, điều kiện tối ưu.

ABSTRACT

Free parameter in regulation of convergence rate of the FK operator method

A universal criterion is proposed to define the free parameter when applying the FK operator method for solving the Schrödinger equation. We show that the convergence rate of approximation series can be regulated by this method of choosing the free parameter. Applying for an anharmonic oscillator as a sample problem, exact numerical solutions (wavefunctions and energies) for which are obtained by very fast algorithm based on the FK operator method and the proposed criterion.

Keywords: FK operator method, Schrödinger equation, free parameter, convergence rate, optimum condition.

1. Giới thiệu vấn đề

Phương pháp toán tử được xây dựng bởi hai giáo sư Feranchuk và Komarov vào những năm 1980 [4, 5], và đã được ứng dụng thành công cho một loạt các bài toán vật lý chất rắn, lý thuyết trường, cũng như vật lý nguyên tử, phân tử (xem công trình [6] và các trích dẫn trong đó). Nghiên cứu sâu hơn về nền tảng phương pháp, ngoài các công trình của nhóm của chính tác giả phương pháp còn có các nhóm khác, xem [2, 3]. Trong bài này và từ đây trở đi, chúng tôi sẽ gọi tên là phương pháp toán tử FK để phân biệt với các phương pháp sử dụng toán tử khác. Một trong các vấn đề quan trọng khi áp dụng phương pháp toán tử FK đó là vai trò của tham số tự do [1, 7]. Tham số này được đưa vào khi biểu diễn các biến số động lực x, p_x qua các toán tử sinh hủy $a(\omega), a^+(\omega)$. Chúng ta gọi là tham số tự do vì thực chất Hamiltonian của hệ không phụ thuộc vào sự chọn lựa tham số này. Tuy nhiên, ω đóng vai trò đặc biệt quan trọng trong phương pháp

* ThS, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

** PGS TSKH, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

toán tử FK do độ chính xác của nghiệm gần đúng phụ thuộc vào việc chọn lựa ω . Ngoài ra khi tính chuỗi các bô chính vào nghiệm để thu được nghiệm chính xác bằng số, tốc độ hội tụ cũng phụ thuộc rất lớn vào giá trị ω [7].

Tuy nhiên, cách chọn tham số ω vẫn chưa được nghiên cứu tương xứng. Ngay từ khi xây dựng phương pháp, cách chọn ω là dựa vào điều kiện không phụ thuộc của nghiệm chính xác vào tham số tự do [4, 5]. Phương pháp này tỏ ra hạn chế khi áp dụng cho các trạng thái kích thích, cho nên trong công trình [1] đưa ra phương pháp chọn lựa tối ưu tham số sau mỗi vòng lặp khi tính bô chính bậc cao vào năng lượng. Điều này dẫn đến việc tăng đáng kể khối lượng tính toán và không dễ dàng phát triển cho các hệ nhiều bậc tự do. Trong các công trình [2, 3] đưa ra phương pháp chọn lựa ngẫu nhiên tham số ω và thử nghiệm sao cho có được tốc độ hội tụ cao. Các phương pháp chọn lựa nêu trên được áp dụng cho đến bây giờ, tuy nhiên với các bài toán hệ nguyên tử, khi xét các trạng thái kích thích miền chọn lựa tham số rất hẹp, khó sử dụng phương pháp chọn lựa ngẫu nhiên. Chính vì vậy, việc tìm quy tắc xác định miền chọn lựa tham số tự do sao cho khi áp dụng phương pháp FK chúng ta có được chuỗi hội tụ nhanh nhất về nghiệm chính xác bằng số là rất cần thiết.

Trong công trình này, chúng tôi sẽ khảo sát vai trò của tham số ω đối với tốc độ hội tụ của phương pháp toán tử FK và đưa ra nguyên tắc cho việc chọn lựa vùng tham số tối ưu mà các ý tưởng đầu tiên đã đưa ra trong [7]. Xác định được vùng tham số tối ưu giúp ta áp dụng hiệu quả hơn phương pháp chọn lựa tham số ngẫu nhiên. Ngoài ra chúng tôi cũng so sánh hiệu quả sử dụng hai sơ đồ tính bô chính bậc cao là sơ đồ nhiễu loạn và sơ đồ vòng lặp. Để cụ thể hóa, trong bài này chúng tôi sử dụng dao động tử phi điều hòa cho các tính toán số, tuy nhiên kết quả mang tính phổ quát do các lập luận đưa ra không phụ thuộc vào hệ vật lý cụ thể.

Một trong những động lực khiến chúng tôi quay lại với bài toán này liên quan đến việc ứng dụng phương pháp toán tử FK trong phát triển bộ chương trình giải phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian cho nguyên tử, phân tử trong trường điện của xung laser.

2. Phương pháp toán tử FK cho bài toán dao động tử phi điều hòa

2.1. Dao động tử phi điều hòa và phương pháp nhiễu loạn

Chúng ta xét dao động tử phi điều hòa một chiều với Hamiltonian sau:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 + \lambda x^4, \tag{1}$$

trong đó hệ số phi điều hòa $\lambda > 0$. Ở đây, ta sử dụng hệ đơn vị không thứ nguyên. Để giải phương trình Schrödinger cho hệ (1) bằng phương pháp nhiễu loạn, thông thường người ta chọn

$$\hat{H}^0 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2, \quad \hat{V} = \lambda x^4, \tag{2}$$

và chỉ có thể thu được nghiệm trong trường hợp λ đủ nhỏ [8].

Thật vậy, điều kiện ứng dụng phương pháp lý thuyết nhiễu loạn [8] cho trạng thái n bất kì là:

$$\langle \psi_n | \hat{V} | \psi_n \rangle \ll \langle \psi_n | \hat{H}_0 | \psi_n \rangle \Rightarrow \lambda \ll \frac{2(2n+1)}{6n^2 + 6n + 3}, \quad (3)$$

đưa đến ngưỡng $\lambda \ll 0.67$ cho trạng thái cơ bản. Với các trạng thái kích thích hệ số λ còn nhỏ hơn nữa. Trong công trình [8], để minh họa cho sự hạn chế của phương pháp lý thuyết nhiễu loạn một số giá trị đã được tính với sơ đồ Rayleigh- Schrödinger. Cụ thể, ứng với $\lambda = 0.01$, khá nhỏ so với điều kiện nhiễu loạn (3) cho trạng thái cơ bản, với bộ chính bậc 10 thu được $E_0^{(10)} = 0.5072562044$, chính xác đến 10 chữ số sau dấu phẩy. Tuy nhiên, với $\lambda = 0.05$, mặc dù vẫn còn rất nhỏ, đã thấy dấu hiệu phân kì. Kết quả chỉ có thể chính xác đến hai chữ số sau dấu phẩy sau bộ chính đến bậc 10. Với $\lambda = 0.1$ kết quả phân kì sau bộ chính bậc 5. Tương tự với các trạng thái kích thích, trong công trình [8] cũng chỉ ra phương pháp lý thuyết nhiễu loạn chỉ có thể áp dụng cho một vùng rất bé hệ số λ

Trong phần tiếp theo ta sẽ xem phương pháp toán tử FK áp dụng hiệu quả thế nào trong việc giải bài toán này.

2.2. Phương pháp toán tử FK [4, 5]

Phương pháp toán tử FK giải phương trình Schrödinger về nguyên tắc vẫn theo tư tưởng phương pháp nhiễu loạn, tuy nhiên việc tách Hamiltonian ra làm hai phần không giống như (2) mà theo một quy trình như sau.

- **Bước một.** Đưa toán tử Hamilton về biểu diễn đại số

$$\hat{H}\left(x, \frac{d}{dx}\right) \rightarrow \hat{H}(\hat{a}, \hat{a}^+, \lambda)$$

bằng cách chuyển các biến số động lực qua các toán tử sinh hủy:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{\omega}{2}}\left(x + \frac{1}{\omega} \frac{d}{dx}\right), \quad \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{\omega}{2}}\left(x - \frac{1}{\omega} \frac{d}{dx}\right) \quad (4)$$

trong đó ω là tham số thực dương được đưa thêm vào để tối ưu quá trình tính toán, được gọi là tham số tự do. Hệ thức giao hoán giữa các toán tử sinh hủy

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1 \quad (5)$$

sẽ là công cụ chính trong tính toán. Với trường hợp dao động tử phi điều hòa ta viết lại toán tử Hamilton (2) như sau:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{1+\omega^2}{4\omega} (2\hat{a}^+ \hat{a} + 1) + \frac{1-\omega^2}{4\omega} [\hat{a}^2 + (\hat{a}^+)^2] + \frac{3\lambda}{4\omega^4} [2(\hat{a}^+ \hat{a})^2 + 2\hat{a}^+ \hat{a} + 1] \\ & + \frac{\lambda}{4\omega^2} [\hat{a}^4 + (\hat{a}^+)^4 + 4(\hat{a}^+)^3 \hat{a} + 4\hat{a}^+ \hat{a}^3 + 6(\hat{a}^+)^2 + 6\hat{a}^2]. \end{aligned} \quad (6)$$

- **Bước hai.** Tách Hamiltonian ở phương trình (6) thành hai thành phần:

$$\hat{H}(\hat{a}^+, \hat{a}, \lambda) = \hat{H}_0^{OM}(\hat{a}^+ \hat{a}, \lambda, \omega) + \hat{V}^{OM}(\hat{a}^+, \hat{a}, \lambda, \omega), \quad (7)$$

trong đó phần thứ nhất $\hat{H}_0^{OM}(\hat{a}^+ \hat{a}, \lambda, \omega)$ chỉ chứa $\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a}$, là toán tử trung hòa, nghĩa là các thành phần của nó có dạng tích của số toán tử sinh và số toán tử hủy bằng nhau. Phần còn lại $\hat{V}^{OM}(\hat{a}^+, \hat{a}, \lambda, \omega)$ không có chứa các thành phần trung hòa. Với trường hợp dao động từ phi điều hòa ta có:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0^{OM} &= \frac{1 + \omega^2}{4\omega} (2\hat{a}^+ \hat{a} + 1) + \frac{3\lambda}{4\omega^2} \left[2(\hat{a}^+ \hat{a})^2 + 2\hat{a}^+ \hat{a} + 1 \right], \\ \hat{V}^{OM} &= \frac{1 - \omega^2}{4\omega} \left[\hat{a}^2 + (\hat{a}^+)^2 \right] + \frac{\lambda}{4\omega^2} \left[\hat{a}^4 + (\hat{a}^+)^4 + 4(\hat{a}^+)^3 \hat{a} + 4\hat{a}^+ \hat{a}^3 + 6(\hat{a}^+)^2 + 6\hat{a}^2 \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

Như vậy, tương tự như trong lý thuyết nhiễu loạn, trong phương pháp toán tử FK toán tử Hamilton cũng được tách thành hai thành phần: thành phần ‘chính’ $\hat{H}_0^{OM}(\hat{a}^+ \hat{a}, \lambda, \omega)$ có nghiệm chính xác và thành phần $\hat{V}^{OM}(\hat{a}^+, \hat{a}, \lambda, \omega)$ đóng vai trò ‘nhiều loạn’. Tuy nhiên, nếu như trong lý thuyết nhiễu loạn việc phân chia phần chính và phần nhiễu loạn dựa vào yếu tố vật lý, theo đó phần nhiễu loạn liên quan đến tương tác trường ngoài, ở đây việc phân chia chỉ thuần túy dựa vào hình thức của các số hạng trong Hamiltonian cho nên có tính phổ quát cho tất cả các dạng hệ vật lý khác nhau.

Ta thấy hệ số trường ngoài λ có mặt trong cả hai phần của Hamiltonian cho thấy tương tác trường ngoài được phân bố cả trong phần chính lẫn phần nhiễu loạn. Ngoài ra ta có ω , được gọi là tham số tự do vì không có mặt trong toán tử Hamilton toàn phần $\hat{H}(\hat{a}, \hat{a}^+, \lambda)$, nhưng lại có mặt cả trong thành phần chính $\hat{H}_0^{OM}(\hat{a}^+ \hat{a}, \lambda, \omega)$ lẫn trong phần nhiễu loạn $\hat{V}^{OM}(\hat{a}^+, \hat{a}, \lambda, \omega)$ nên ta có thể xem nó như là ‘điều phối viên’. Bằng cách thay đổi ω ta có thể làm cho thành phần $\hat{V}^{OM}(\hat{a}^+, \hat{a}, \lambda, \omega)$ thực sự nhỏ và có thể xem là nhiễu loạn không phụ thuộc vào độ lớn trường ngoài. Nói khác hơn, bằng cách chọn tham số ω ta có thể đảm bảo điều kiện lý thuyết nhiễu loạn $\|\hat{V}\| \ll \|\hat{H}_0\|$ trong toàn miền thay đổi trường ngoài.

• **Bước ba.** Tìm nghiệm gần đúng bậc zero cho bài toán, chính là nghiệm riêng của toán tử $\hat{H}_0^{OM}(\hat{a}^+ \hat{a}, \lambda, \omega)$. Toán tử này giao hoán với toán tử $\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a}$ cho nên có nghiệm riêng là:

$$|\psi_n^{(0)}\rangle = |n(\omega)\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^{+n} |0(\omega)\rangle \quad (9)$$

Ở đây ta đã sử dụng ký hiệu và khái niệm Dirac để định nghĩa, khi đó nghiệm được gọi là vector trạng thái và nghiệm cơ bản là trạng thái “chân không” (vacuum) $|0\rangle$ được xác định bằng các phương trình:

$$\hat{a}(\omega)|0\rangle = 0, \quad \langle 0|0\rangle = 1. \quad (10)$$

Khi cần thiết chúng ta có thể sử dụng phương trình này để xác định dạng tường minh của hàm sóng, tuy nhiên chúng ta có thể tính toán thuần túy đại số bằng cách sử dụng hệ thức giao hoán (5) và phương trình (10).

Ta dễ dàng thu được $\hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle$ và từ đó có thể suy ra trị riêng của $\hat{H}_0(\hat{a}^+ \hat{a}, \lambda, \omega)$ là năng lượng gần đúng bậc zero :

$$E_n^{(0)} = \frac{1 + \omega^2}{4\omega} (2n + 1) + \frac{3\lambda}{4\omega^2} (2n^2 + 2n + 1). \tag{11}$$

Ta thấy năng lượng gần đúng bậc zero (11) phụ thuộc vào tham số tự do ω . Việc chọn giá trị nào cho tham số này được thảo luận trong các công trình [1-7]. Cụ thể cho gần đúng bậc zero tham số được tính từ phương trình:

$$\frac{\partial E_n^{(0)}(\omega)}{\partial \omega} = 0 \tag{12}$$

Chú ý rằng phương trình (12) không phải là từ nguyên lí biến phân và nó được sử dụng cho cả trạng thái cơ bản lẫn trạng thái kích thích. Ý nghĩa của (12) xuất phát từ một điều hiển nhiên là năng lượng chính xác của bài toán không phụ thuộc vào việc chọn tham số tự do. Mặc dù điều kiện (12) với một số bài toán cho kết quả gần đúng bậc zero tương đối chính xác, thêm nữa sai số không thay đổi đáng kể trong toàn miền thay đổi tham số trường ngoài, khi tính nghiệm số chính xác với giá trị ω từ điều kiện này không cho chúng ta tốc độ hội tụ cao nhất. Với các bài toán hệ nguyên tử mà chúng tôi đang nghiên cứu, miền tham số tối ưu cho sự hội tụ về nghiệm chính xác rất hẹp và với các trạng thái kích thích miền tối ưu cho tham số tự do không chứa nghiệm (12). Trong phần tiếp theo chúng tôi sẽ thảo luận và đưa ra phương trình mới, tổng quát để tìm tham số tự do này.

• **Bước bốn.** Tính các bậc chính bậc cao để thu được nghiệm số chính xác. Trong bước này, ta sử dụng các sơ đồ thích hợp để tính các bậc chính bậc cao. Lí thuyết nhiễu loạn có thể sử dụng ở đây với thành phần nhiễu loạn $\hat{V}^{OM}(\hat{a}^+, \hat{a}, \lambda, \omega)$ được điều chỉnh thông qua tham số ω . Tuy nhiên, trong rất nhiều bài toán (xem [6]) sơ đồ vòng lặp tỏ ra hiệu quả hơn về tốc độ hội tụ đến nghiệm chính xác và sự giảm đáng kể khối lượng tính toán. Ta sẽ nêu ý tưởng chính của sơ đồ vòng lặp.

Hàm sóng chính xác của bài toán có thể biểu diễn qua chồng chập các trạng thái (9) như sau:

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq n}}^{+\infty} C_k |k\rangle. \tag{13}$$

Tuy nhiên, chúng ta chỉ có thể xác định các hệ số C_k theo từng vòng lặp, với hàm sóng gần đúng ở vòng lặp thứ (s) được định nghĩa như sau:

$$|\psi_n^{(s)}\rangle = |n\rangle + \sum_{\substack{k=\max(0, n-s) \\ k \neq n}}^{n+s} C_k^{(s)} |k\rangle \quad (14)$$

Đem (14) thế vào phương trình Schrödinger ta thu được hệ phương trình sau:

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

$$(E_n^{(s)} - H_{jj})C_j^{(s)} = V_{jn} + \sum_{\substack{k=\max(0, n-s) \\ k \neq n}}^{n+s} C_k^{(s)} V_{jk}, \quad (j = 0, 1, 2, \neq n, \dots, n+s). \quad (15)$$

Trong các công thức trên, ta ký hiệu các yếu tố ma trận:

$$H_{kk} = \langle k | \hat{H}_0^{OM} | k \rangle, \quad V_{jk} = \langle j | \hat{V}^{OM} | k \rangle. \quad (16)$$

Các phần tử ma trận này có thể tính một cách dễ dàng bằng các biến đổi thuận đại số nhờ các công thức (5), (10). Để tiện trong tính toán ta đưa ra hai công thức sau:

$$\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle; \quad \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad (17)$$

và từ đây tính được các phần tử ma trận khác không như sau:

$$H_{nn} = \frac{1+\omega^2}{4\omega} (2n+1) + \frac{3\lambda}{4\omega^2} (2n^2 + 2n + 1),$$

$$V_{n, n+2} = \left[\frac{1-\omega^2}{4\omega} + \frac{\lambda}{2\omega^2} (2n+3) \right] \sqrt{(n+2)(n+1)},$$

$$V_{n, n+4} = \frac{\lambda}{4\omega^2} \sqrt{(n+4)(n+3)(n+2)(n+1)} \quad (18)$$

Còn các phần tử ma trận khác thu được dựa vào tính đối xứng $V_{nm} = V_{mn}$

3. Sự hội tụ của phương pháp toán tử FK

3.1. Nghiệm chính xác bằng số

Sử dụng các bước của phương pháp toán tử FK cùng các công thức của các yếu tố ma trận đưa ra đối với dao động tử phi điều hòa trong phần 2, về nguyên tắc chúng ta có thể tìm năng lượng và hàm sóng chính xác bằng số đến độ chính xác bất kì. Chúng tôi xây dựng chương trình QAO_FKOM_IT để tính nghiệm chính xác đến 15 chữ số sau dấu phẩy cho trường hợp hệ số phi điều hòa λ bất kì, được kiểm tra cho đến giá trị $\lambda = 100$. Chương trình làm việc cho trạng thái kích thích lên đến $n = 50$. Trong bảng 1 đưa ra một số giá trị minh họa cho trạng thái cơ bản ứng với các giá trị λ nhỏ, trung bình và lớn. Tương tự, bảng 2 minh họa cho trường hợp trạng thái kích thích $n = 4$. Trong các trường hợp trên, giá trị tham số tự do ω được chọn theo điều kiện (12).

Mặc dù tham số tự do được chọn chưa phải tối ưu, ta thấy nghiệm thu được có tốc độ hội tụ rất cao không những cho năng lượng mà cả hàm sóng (trong bảng ta chỉ đưa ra minh họa vài hệ số đầu tiên). Như vậy, ta thấy phương pháp toán tử FK cho ta

nghiệm chính xác bằng số với giá trị tham số nhiễu loạn bất kì. Chúng tôi cũng xây dựng chương trình QAO_FKOM_PT trong đó thay vì sơ đồ vòng lặp (15) sử dụng lý thuyết nhiễu loạn để tính bỏ chính năng lượng và hàm sóng. Tuy nhiên, kết quả (không đưa ra đây) cho thấy sơ đồ vòng lặp cho kết quả hội tụ về nghiệm chính xác nhanh hơn và tài nguyên tính toán cho mỗi bậc vòng lặp ít hơn so với mỗi bậc nhiễu loạn. Chú ý là từ trước đến nay, trong các công trình áp dụng phương pháp toán tử FK thì sơ đồ vòng lặp được mặc định sử dụng mặc dù chưa có tuyên bố nào về sự so sánh giữa hai sơ đồ. Sơ đồ vòng lặp (15) chúng tôi đưa ra cũng khác với sơ đồ trong các công trình trước đây [6] do định nghĩa vòng lặp khác nhau. Chúng tôi sẽ thảo luận điều này trong công trình khác về vai trò của sơ đồ vòng lặp trong phương pháp toán tử FK.

3.2. Sự phụ thuộc tốc độ hội tụ vào tham số tự do

Để thu được các kết quả chỉ ra trong các bảng 1 và 2, tham số tự do ω được chọn bằng phương trình (12) tuy nhiên ta cũng có thể chọn bằng cách thử nghiệm sao cho nghiệm thu được theo từng vòng lặp

$$E_n^{(0)}(\omega), E_n^{(1)}(\omega), E_n^{(2)}(\omega), \dots, E_n^{(s)}(\omega), \dots \quad (19)$$

hội tụ nhanh nhất về nghiệm chính xác. Ở đây ta thấy rằng với các giá trị ω khác nhau thì chuỗi (19) sẽ khác nhau nhưng hội tụ về cùng một giá trị không phụ thuộc vào giá trị tham số đã chọn. Chính vì vậy quy trình này cho ta nghiệm chính xác bằng số. Bảng 3 cho ví dụ minh họa về tốc độ hội tụ phụ thuộc vào tham số tự do.

Ta thấy rằng giá trị tham số ω khác nhau cho tốc độ hội tụ khác nhau. Mặc dù, bảng 3 chỉ đưa ra các số liệu cho trạng thái cơ bản, nhưng ta có kết quả tương tự với các trạng thái kích thích và với miền thay đổi lớn giá trị hệ số phi nhiễu loạn λ . Thử nghiệm với các ω khác nhau ta thấy có một miền giá trị tối ưu cho tốc độ hội tụ nhanh nhất. Trên hình 1, biểu diễn tốc độ hội tụ phụ thuộc vào tham số tự do ứng với trường hợp λ nhỏ (a) và lớn (b). Trục hoành là giá trị ω trong khi trục tung chỉ bậc vòng lặp (s) khi năng lượng thu được chính xác đến 15 chữ số sau dấu phẩy. Giá trị (s) càng nhỏ, tốc độ hội tụ càng cao. Trên đồ thị cũng biểu diễn sự phụ thuộc tốc độ hội tụ sơ đồ nhiễu loạn vào chọn lựa tham số tự do, lúc này (s) là bậc bỏ chính nhiễu loạn để có giá trị năng lượng chính xác đến 15 chữ số sau dấu phẩy. Ta thấy rằng có một vùng giá trị của tham số tự do sẽ cho tốc độ hội tụ cao, và rõ ràng sơ đồ vòng lặp có tốc độ hội tụ cao hơn sơ đồ nhiễu loạn. Hình 2 cho sự phụ thuộc tốc độ hội tụ vào tham số tự do không những cho trạng thái cơ bản mà cả cho trạng thái kích thích $n=4$.

Bảng 1. Năng lượng $E_0^{(s)}$ và hàm sóng (các hệ số $C_k^{(s)}$) bằng phương pháp toán tử FK theo sơ đồ vòng lặp cho trạng thái cơ bản ($n = 0$).

s	$E_0^{(s)}$	$C_2^{(s)}$	$C_4^{(s)}$	$C_6^{(s)}$	$C_8^{(s)}$	$C_{10}^{(s)}$	$C_{12}^{(s)}$
$\lambda = 0.01$							
0,1	0.5072875252						
2	0.5072562571	$0.8479848149 \times 10^{-4}$	$-0.2701949505 \times 10^{-2}$				
3	0.5072562103	$0.8311329094 \times 10^{-4}$	$-0.2705978498 \times 10^{-2}$	$0.8434024829 \times 10^{-4}$			
4	0.5072562046	$0.8316314562 \times 10^{-4}$	$-0.2706470120 \times 10^{-2}$	$0.8273811988 \times 10^{-4}$	$0.2514982433 \times 10^{-1}$		
5	0.5072562045	$0.8316216632 \times 10^{-4}$	$-0.2706477769 \times 10^{-2}$	$0.8279486765 \times 10^{-4}$	$0.2536769322 \times 10^{-1}$	$-0.2774039537 \times 10^{-5}$	
6	0.5072562045	$0.8316218863 \times 10^{-4}$	$-0.2706477845 \times 10^{-2}$	$0.8279394010 \times 10^{-4}$	$0.2537301957 \times 10^{-1}$	$-0.2750935104 \times 10^{-5}$	$-0.2494695597 \times 10^{-6}$
7	0.5072562045	$0.8316218848 \times 10^{-4}$	$-0.2706477855 \times 10^{-2}$	$0.8279396133 \times 10^{-4}$	$0.2537341306 \times 10^{-1}$	$-0.2752753421 \times 10^{-5}$	$-0.2582269208 \times 10^{-6}$
8	0.5072562045	$0.8316218848 \times 10^{-4}$	$-0.2706477845 \times 10^{-2}$	$0.8279396167 \times 10^{-4}$	$0.2537341267 \times 10^{-1}$	$-0.2752765967 \times 10^{-5}$	$-0.2581791608 \times 10^{-6}$
9	0.5072562045	$0.8316218848 \times 10^{-4}$	$-0.2706477855 \times 10^{-2}$	$0.8279396165 \times 10^{-4}$	$0.2537341310 \times 10^{-1}$	$-0.2752766956 \times 10^{-5}$	$-0.2581938518 \times 10^{-6}$
10	0.5072562045	$0.8316218848 \times 10^{-4}$	$-0.2706477855 \times 10^{-2}$	$0.8279396165 \times 10^{-4}$	$0.2537341311 \times 10^{-1}$	$-0.275276614 \times 10^{-5}$	$-0.2581938766 \times 10^{-6}$
$\lambda = 1.0$							
0,1	0.8125000000						
2	0.8046068331	$0.9384509682 \times 10^{-2}$	$-0.2577897501 \times 10^{-1}$				
3	0.8037949675	$0.8791292775 \times 10^{-2}$	$-0.2843051679 \times 10^{-1}$	$0.6246915410 \times 10^{-2}$			
4	0.8037947348	$0.8802000649 \times 10^{-2}$	$-0.2843127707 \times 10^{-1}$	$0.6205054608 \times 10^{-2}$	$0.8597730867 \times 10^{-1}$		
5	0.8037753545	$0.8832728944 \times 10^{-2}$	$-0.2849457256 \times 10^{-1}$	$0.6174049879 \times 10^{-2}$	$0.4407730850 \times 10^{-1}$	$-0.6651517547 \times 10^{-3}$	
6	0.8037708634	$0.8832594751 \times 10^{-2}$	$-0.2850924044 \times 10^{-1}$	$0.6195978744 \times 10^{-2}$	$0.4656497973 \times 10^{-1}$	$-0.8248988121 \times 10^{-3}$	$0.2791683248 \times 10^{-4}$
7	0.8037707137	$0.8832118882 \times 10^{-2}$	$-0.2850972964 \times 10^{-1}$	$0.6198601781 \times 10^{-2}$	$0.4627536659 \times 10^{-1}$	$-0.8305910106 \times 10^{-3}$	$0.3066180895 \times 10^{-4}$
8	0.8037706870	$0.8832231997 \times 10^{-2}$	$-0.2850981678 \times 10^{-1}$	$0.6198274929 \times 10^{-2}$	$0.4638017904 \times 10^{-1}$	$-0.8314519572 \times 10^{-3}$	$0.3038932271 \times 10^{-4}$
9	0.8037706573	$0.8832263444 \times 10^{-2}$	$-0.2850991382 \times 10^{-1}$	$0.6198290259 \times 10^{-2}$	$0.4642219461 \times 10^{-1}$	$-0.8324838849 \times 10^{-3}$	$0.3044960471 \times 10^{-4}$
10	0.8037706515	$0.8832261665 \times 10^{-2}$	$-0.2850993263 \times 10^{-1}$	$0.6198324827 \times 10^{-2}$	$0.4642411475 \times 10^{-1}$	$-0.8326899763 \times 10^{-3}$	$0.3049158592 \times 10^{-4}$
$\lambda = 100$							
0,1	3.1924440443						
2	3.1391826732	$0.1422605387 \times 10^{-1}$	$-0.3122683662 \times 10^{-1}$				
3	3.1316420454	$0.1349305816 \times 10^{-1}$	$-0.3564786350 \times 10^{-1}$	$0.8791955677 \times 10^{-2}$			
4	3.1316308097	$0.1344761651 \times 10^{-1}$	$-0.3565445093 \times 10^{-1}$	$0.8947295315 \times 10^{-2}$	$-0.2741314656 \times 10^{-3}$		
5	3.1314555589	$0.1352105244 \times 10^{-1}$	$-0.3575719944 \times 10^{-1}$	$0.8861485807 \times 10^{-2}$	$0.2851045682 \times 10^{-3}$	$-0.9133320251 \times 10^{-3}$	
6	3.1313900256	$0.1352602607 \times 10^{-1}$	$-0.3579562127 \times 10^{-1}$	$0.8901518655 \times 10^{-2}$	$0.3552300992 \times 10^{-3}$	$-0.1228609902 \times 10^{-2}$	$0.4850460325 \times 10^{-3}$
7	3.1313848138	$0.1352437443 \times 10^{-1}$	$-0.3579867688 \times 10^{-1}$	$0.8911268231 \times 10^{-2}$	$0.3481528688 \times 10^{-3}$	$-0.1251293102 \times 10^{-2}$	$0.5677794535 \times 10^{-3}$
8	3.1313847637	$0.1352450669 \times 10^{-1}$	$-0.3579870631 \times 10^{-1}$	$0.8910886887 \times 10^{-2}$	$0.3490006033 \times 10^{-3}$	$-0.1251684514 \times 10^{-2}$	$0.5653799791 \times 10^{-3}$
9	3.1313843452	$0.1352466066 \times 10^{-1}$	$-0.3579895162 \times 10^{-1}$	$0.8910750540 \times 10^{-2}$	$0.3502037250 \times 10^{-3}$	$-0.1253840167 \times 10^{-2}$	$0.5658408325 \times 10^{-3}$
10	3.1313841853	$0.1352467351 \times 10^{-1}$	$-0.3579904538 \times 10^{-1}$	$0.8910845937 \times 10^{-2}$	$0.3503792841 \times 10^{-3}$	$-0.1254610397 \times 10^{-2}$	$0.5670090738 \times 10^{-3}$

Bảng 2. Năng lượng $E_n^{(1)}$ và hàm sóng (các hệ số $C_k^{(1)}$) bằng phương pháp toán tử FK theo sơ đồ vòng lặp cho trạng thái kích thích $n = 4$

s	$E_4^{(s)}$	$C_0^{(s)}$	$C_2^{(s)}$	$C_6^{(s)}$	$C_8^{(s)}$	$C_{10}^{(s)}$	$C_{12}^{(s)}$
$\lambda = 0.0001$							
0	4.503070809						
1	4.5030712063		-0.5750897467x10 ⁻³	0.3636916720x10 ⁻⁵			
2	4.5030712063	0.3062048696x10 ⁻³	-0.5751013097x10 ⁻³	0.3637549652x10 ⁻³	-0.2550254888x10 ⁻³		
3	4.5030709494	0.3062048696x10 ⁻³	-0.5751013097x10 ⁻³	0.3637549652x10 ⁻³	-0.2550255473x10 ⁻³	-0.7162559645x10 ⁻¹⁰	0.8640823991x10 ⁻⁷
4	4.5030709494	0.3062048696x10 ⁻³	-0.5751013097x10 ⁻³	0.3637549653x10 ⁻³	-0.2550255473x10 ⁻³	-0.1484326840x10 ⁻⁹	0.8640832624x10 ⁻⁷
5	4.5030709494	0.3062048696x10 ⁻³	-0.5751013097x10 ⁻³	0.3637549653x10 ⁻³	-0.2550255473x10 ⁻³	-0.1483831875x10 ⁻⁹	0.8640835043x10 ⁻⁷
6	4.5030709494	0.3062048696x10 ⁻³	-0.5751013097x10 ⁻³	0.3637549653x10 ⁻³	-0.2550255473x10 ⁻³	-0.1483831874x10 ⁻⁹	0.8640835043x10 ⁻⁷
7	4.5030709494	0.3062048696x10 ⁻³	-0.5751013097x10 ⁻³	0.3637549653x10 ⁻³	-0.2550255473x10 ⁻³	-0.1483831874x10 ⁻⁹	0.8640835043x10 ⁻⁷
8	4.5030709494	0.3062048696x10 ⁻³	-0.5751013097x10 ⁻³	0.3637549653x10 ⁻³	-0.2550255473x10 ⁻³	-0.1483831874x10 ⁻⁹	0.8640835043x10 ⁻⁷
9	4.5030709494	0.3062048696x10 ⁻³	-0.5751013097x10 ⁻³	0.3637549653x10 ⁻³	-0.2550255473x10 ⁻³	-0.1483831874x10 ⁻⁹	0.8640835043x10 ⁻⁷
$\lambda = 0.01$							
0							
1	4.7763701645		-0.4202398796x10 ⁻¹	0.2649137540x10 ⁻¹			
2	4.7749147310	0.2904384116x10 ⁻²	-0.4212743218x10 ⁻¹	0.2679187001x10 ⁻¹	-0.17932557570x10 ⁻¹		
3	4.7749147267	0.2904383741x10 ⁻²	-0.4212740557x10 ⁻¹	0.2679339823x10 ⁻¹	-0.1793150903x10 ⁻¹	-0.2470823550x10 ⁻²	
4	4.7749131264	0.2904384820x10 ⁻²	-0.4212740479x10 ⁻¹	0.2679521363x10 ⁻¹	-0.1794965710x10 ⁻¹	-0.4889364742x10 ⁻²	0.4077866618 x10 ⁻⁵
5	4.7749131201	0.2904384839x10 ⁻²	-0.4212740586x0 ⁻¹	0.2679515936x10 ⁻¹	-0.1794977396x10 ⁻¹	-0.4799528075x10 ⁻²	0.4094457112x10 ⁻³
6	4.7749131186	0.2904384840x10 ⁻²	-0.4212740582x10 ⁻¹	0.2679516326x10 ⁻¹	-0.1794978867x10 ⁻¹	-0.4805370196x10 ⁻²	0.4098116913x10 ⁻³
7	4.7749131186	0.2904384840x10 ⁻²	-0.4212740583x10 ⁻¹	0.2679516316x10 ⁻¹	-0.1794978922x10 ⁻¹	-0.4805194482x10 ⁻²	0.409821929 x10 ⁻³
8	4.7749131186	0.2904384840x10 ⁻²	-0.4212740583x10 ⁻¹	0.2679516317x10 ⁻¹	-0.1794978923x10 ⁻¹	-0.48052019035x10 ⁻²	0.4098221089x10 ⁻³
9	4.7749131186	0.2904384840x10 ⁻²	-0.4212740583x10 ⁻¹	0.2679516317x10 ⁻¹	-0.1794978923x10 ⁻¹	-0.4805201841x10 ⁻²	0.4098221406x10 ⁻³
$\lambda = 100$							
0	53.475000000						
1	47.970488935		0.7420786551x10 ⁻¹	-0.3481283075			
2	47.901645352	0.2534749067x10 ⁻¹	0.6786150520x10 ⁻¹	-0.3759899614	0.3750140576x10 ⁻¹		
3	47.781595429	0.2536505208x10 ⁻¹	0.6950153285x10 ⁻¹	-0.3689180618	0.3780572331x10 ⁻¹	0.3292080071x10 ⁻¹	-0.2053967487x10 ⁻¹
4	47.713576332	0.2541279483x10 ⁻¹	0.6921411267x10 ⁻¹	-0.3714361664	0.130807697x10 ⁻¹	0.4658243022x10 ⁻¹	-0.2390934305x10 ⁻¹
5	47.708068746	0.2541979051x10 ⁻¹	0.6909018677x10 ⁻¹	-0.3721763460	0.1200951634x10 ⁻¹	0.4728262187x10 ⁻¹	-0.2378815518x10 ⁻¹
6	47.707923347	0.2541959048x10 ⁻¹	0.6909931288x10 ⁻¹	-0.3721297826	0.1191689867x10 ⁻¹	0.4735125804x10 ⁻¹	-0.2387502731x10 ⁻¹
7	47.707368094	0.2541983292x10 ⁻¹	0.6910073676x10 ⁻¹	-0.3721248559	0.1185387654x10 ⁻¹	0.4748221383x10 ⁻¹	-0.2387502731x10 ⁻¹
8	47.707216612	0.2541995829x10 ⁻¹	0.6910048950x10 ⁻¹	-0.3721336869	0.1185378977x10 ⁻¹	0.4751022239x10 ⁻¹	-0.2393107883x10 ⁻¹
9	47.707208950	0.2541997033x10 ⁻¹	0.6910024265x10 ⁻¹	-0.3721351136	0.1185543304x10 ⁻¹	0.4751089570x10 ⁻¹	-0.2393702944x10 ⁻¹

3.3. Điều kiện để chọn tham số tự do tối ưu

Như vậy, ta đã biết được sự tồn tại miền tham số tự do tối ưu. Việc xác định miền này rất quan trọng trong việc áp dụng phương pháp toán tử FK giải phương trình Schrödinger, đặc biệt là cho các bài toán phức tạp như hệ nguyên tử. Chúng tôi xuất phát từ điều kiện lí thuyết nhiễu loạn:

$$\frac{\|V^{OM}(\omega)\|}{\|H_0^{OM}(\omega)\|} \ll 1, \tag{20}$$

với định nghĩa như sau:

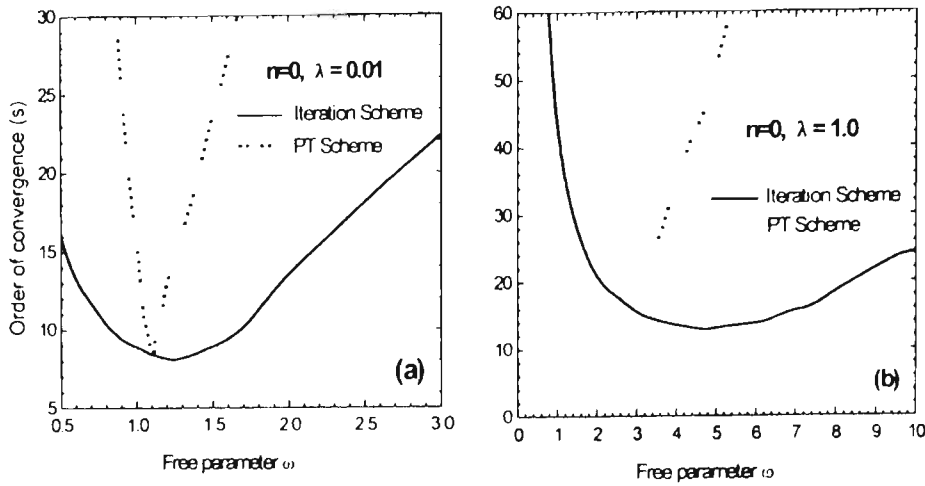
$$\|V^{OM}(\omega)\| = \langle \psi | V^{OM} V^{OM} | \psi \rangle^{1/2} \quad \|H_0^{OM}(\omega)\| = \langle \psi | H_0^{OM} | \psi \rangle.$$

Rõ ràng đây là một điều kiện rất tự nhiên. Tuy nhiên, vấn đề là làm sao định nghĩa được $\|V^{OM}(\omega)\|$, $\|H_0^{OM}(\omega)\|$ khi chúng ta không có nghiệm chính xác. Trong lí thuyết nhiễu loạn điều kiện này cũng chỉ mang tính ước lệ vì ta không thể so sánh độ lớn hai toán tử mà chỉ có thể có điều kiện (20) dạng gần đúng. Chính vì vậy ta sẽ dựa vào (20) để định nghĩa một hàm số theo biến số là tham số tự do như sau:

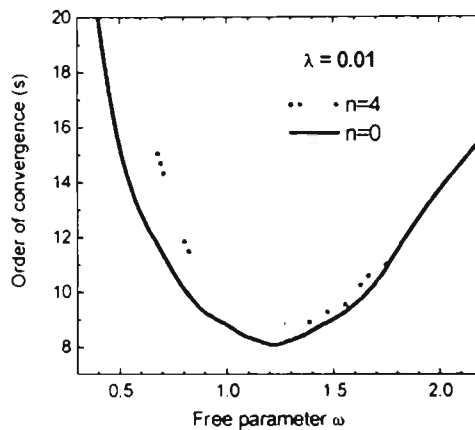
$$\beta^{(s)}(\omega) = \frac{\langle \psi^{(s)} | V^{OM} V^{OM} | \psi^{(s)} \rangle^{1/2}}{\langle \psi^{(s)} | H_0^{OM} | \psi^{(s)} \rangle}. \tag{21}$$

Bảng 3. Năng lượng $E_0^{(s)}$ cho trạng thái cơ bản và hệ số phi điều hòa $\lambda = 1.0$ thu được bằng phương pháp toán tử FK theo sơ đồ vòng lặp ứng với các giá trị khác nhau của tham số tự do. Cột đầu tiên ứng với ω lấy bất kì và năng lượng hội tụ khi $s=38$, cột thứ hai ω chọn theo điều kiện (12) cho hội tụ ở $s=20$, cột 3 với ω chọn tối ưu cho hội tụ ở $s=13$.

s	$\omega = 1.06893999980$ (s=38)	$\omega = 2.00000000000$ (s=20)	$\omega = 4.66533999988$ (s=13)
0	1.15749038965280	0.812500000000000	1.25438002723422
1	0.805293754387089	0.812500000000000	0.870523726412399
2	0.804091586712698	0.804606833140588	0.809810146292740
3	0.803776975428709	0.803794967592446	0.803980268993323
4	0.803772780786474	0.803794734802707	0.803771187489869
5	0.803770668823167	0.803775354597840	0.803770919927074
6	0.803770668799550	0.803770863494731	0.803770661047707
7	0.803770651982284	0.803770713706933	0.803770651501296
8	0.803770651314005	0.803770687027535	0.803770651277780
9	0.803770651257317	0.803770657313593	0.803770651234731
10	0.803770651234720	0.803770651554483	0.803770651234456
11	0.803772092439650	0.803770651363555	0.803770651234276
12	0.803771159346335	0.803770651314907	0.803770651234275
13	0.803770777050719	0.803770651252256	0.803770651234274
14	0.803770672948468	0.803770651235764	0.803770651234274
15	0.803770657502463	0.803770651234518	0.803770651234274
16	0.803770657303735	0.803770651234498	0.803770651234274
17	0.803770656143280	0.803770651234354	0.803770651234274
18	0.803770654043907	0.803770651234286	0.803770651234274
19	0.803770652437468	0.803770651234275	0.803770651234274
20	0.803770651623309	0.803770651234274	0.803770651234274
$E_0^{(r)}$	0.803770651234274		



Hình 1. Tốc độ hội tụ của phương pháp toán tử FK cho trạng thái cơ bản ($n = 0$) ứng với hệ số phi điều hòa (a) $\lambda = 0.01$ và (b) $\lambda = 1.0$; đường liền nét khi sử dụng sơ đồ vòng lặp, đường đứt khúc khi sử dụng sơ đồ lý thuyết nhiễu loạn

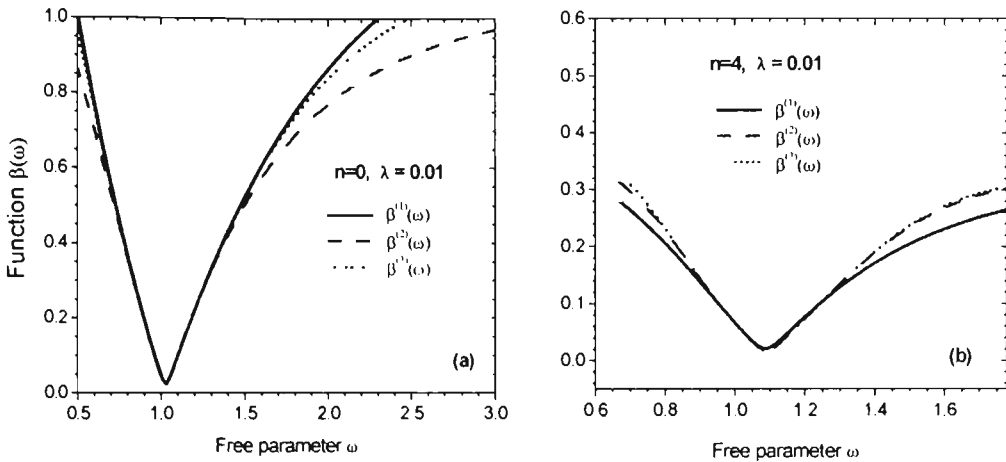


Hình 2 Tốc độ hội tụ của bài toán khi giải bằng phương pháp toán tử FK cho một số trạng thái

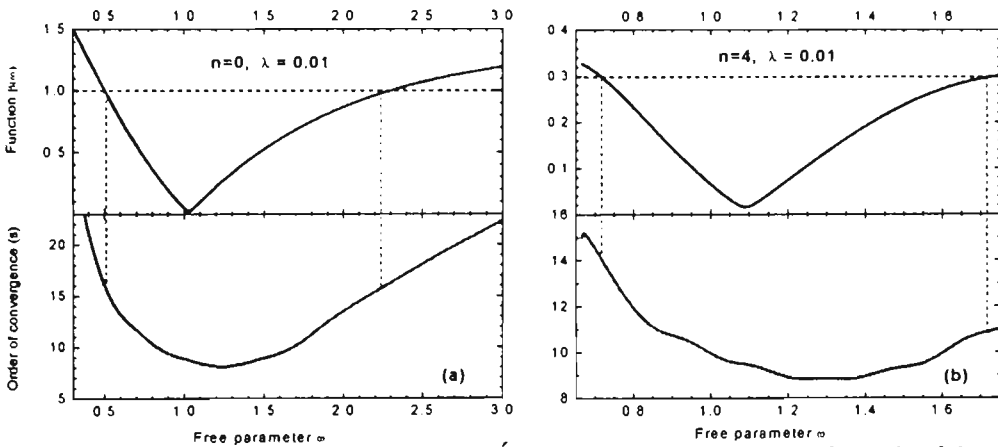
Hình 3 vẽ hàm số (21) cho các bậc (s) khác nhau từ zero tăng dần. Ta thấy hàm $\beta(\omega)$ có miền cực tiểu theo biến số ω với giá trị hàm số nhỏ hơn 1:

$$\beta(\omega) \ll 1. \tag{22}$$

Ở đây, ta không ký hiệu bậc gần đúng (s) trên hàm số $\beta(\omega)$ là do quan sát thấy đến một bậc gần đúng (s_{\max}) nào đó miền cực trị của hàm không thay đổi đáng kể. Ta thấy, tùy theo bậc kích thích của trạng thái (trên hình ta chỉ minh họa hai trường hợp $n = 0$ và $n = 4$) và tùy theo hệ số λ lớn hay nhỏ mà s_{\max} có các giá trị khác nhau nhưng không quá giá trị $s_{\max} \leq 4$. Như vậy nhiều nhất là ta sử dụng đến vòng lặp thứ 4 để có được hàm so sánh $\beta(\omega)$ và sau đó sẽ tìm miền cực trị của nó thỏa mãn điều kiện (22).



Hình 3. Hàm $\beta(\omega)$ ứng với bốn bậc đầu tiên cho trường hợp trạng thái cơ bản ($n=0$) và trạng thái kích thích ($n=4$)



Hình 4. So sánh vùng thử nghiệm tối ưu và vùng giá trị nhỏ của hàm $\beta(\omega)$ cho trạng thái cơ bản $n=0$ và trạng thái kích thích $n=4$

Trong hình 4, trên mỗi đồ thị biểu diễn đồng thời hàm số $\beta(\omega)$ và hàm số $s(\omega)$ thu được từ thử nghiệm, thể hiện sự phụ thuộc tốc độ hội tụ vào tham số ω . Ta chọn thang trên trục tung phù hợp cho hai hàm số sao cho có thể so sánh miền cực trị của nó. Kết quả thu được như trên hình cho thấy miền tham số ω tối ưu phù hợp với miền cực tiểu của hàm $\beta(\omega)$ theo điều kiện (22). Kết quả này rất thú vị và có ý nghĩa thực tiễn cho ta điều kiện để chọn tham số tự do tối ưu thay vì mò mẫm thử nghiệm. Chúng tôi đưa ra hai trường hợp cho trạng thái cơ bản ($n=0$) và trạng thái kích thích $n=4$ cho thấy điều kiện tìm tham số tự do tối ưu (22) mang tính phổ quát.

4. Kết luận

Như vậy, trong bài báo này trước tiên chúng tôi nhắc lại một cách tổng quan phương pháp toán tử FK giải phương trình Schrödinger và qua ví dụ minh họa về dao động tử phi điều hòa chúng tôi chỉ ra thế mạnh của nó so với phương pháp lí thuyết nhiễu loạn truyền thống. Có thể nói phương pháp toán tử FK mang trong nó tư tưởng lí thuyết nhiễu loạn nhưng dùng để giải các bài toán phi nhiễu loạn. Ở đây, chúng tôi nhấn mạnh đến thế mạnh của phương pháp FK khi tìm nghiệm chính xác bằng số và chỉ ra sự phụ thuộc tốc độ hội tụ vào tham số tự do. Việc chọn tham số tự do vì vậy rất có ý nghĩa, cho phép chúng ta tiết kiệm rất nhiều tài nguyên tính toán. Điều này là thực

sự quan trọng liên quan đến tiết kiệm tài nguyên tính toán khi chúng tôi sử dụng phương pháp LK cho các nghiên cứu trong các bài toán nguyên tử và như một phần của bộ chương trình giải số phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian cho bài toán nguyên tử, phân tử trong trường điện của chùm laser xung cực ngắn. Tiếp theo chúng tôi chỉ ra sự tồn tại miền tham số tự do tối ưu cho tốc độ hội tụ cao về nghiệm số chính xác. Kết quả chính của bài báo là việc đưa ra điều kiện phổ quát để chọn tham số tự do tối ưu. Tuy kết quả phân tích số dựa trên bài toán cụ thể là dao động từ phi điều hòa nhưng điều kiện đưa ra dựa trên nguyên tắc rất phổ quát là chọn tham số tự do sao cho đóng góp của ‘phần nhiễu loạn’ nhỏ hơn nhiều so với phần chính của Hamiltonian. Chính vì vậy, chúng tôi hy vọng nó sẽ làm việc tốt cho các bài toán hệ nguyên tử trong các nghiên cứu tiếp theo.

Ghi chú: Công trình này thuộc đề tài khoa học và công nghệ cấp cơ sở mã số CS.2011.19.51 của tác giả Hoàng Đỗ Ngọc Trâm và cũng nằm trong Đề tài được tài trợ của Quỹ phát triển khoa học và công nghệ quốc gia (NAFOSTED) 2011.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Chan Za An, I. D. Feranchuk, L. I. Komarov and L. S. Nakhamchik (1986), “Optimal choice of a parameter for the operator method of the solution of the Schrödinger equation”, *J. Phys. A* **19** 1583-1587.
2. F. M. Fernandez, A. M. Meseon, and E. A. Castro (1984). “On the convergence of the operator method perturbation series”. *Phys. Lett. A* **104** 401-404.
3. F. M. Fernandez, A. M. Meseon, and E. A. Castro (1985). “A simple iterative solution of the Schrödinger equation in matrix representation form” *J. Phys. A* **18** 1389-1398.
4. I. D. Feranchuk and L. I. Komarov (1982). “The Operator Method of Approximate Solution of the Schrödinger Equation” *Phys. Lett. A* **88** 212-214.
5. I. D. Feranchuk, L. I. Komarov, I. V. Nichipor, and A. P. Ulyanenkov (1995), “Operator Method in the Problem of Quantum Anharmonic Oscillator”, *Ann. Phys.* **238** 370-440.
6. I. D. Feranchuk and A. A. Ivanov (2004). “Operator Method for Nonperturbative Description of Quantum Systems”, in book “Etudes on Theoretical Physics”, ed. L. M. Barkovsky, I. D. Feranchuk, Yakov M. Shnir, Singapore: World Scientific Pub.
7. Hoang Quoc Khanh, Le Van Hoang, L. I. Komarov (1997), “Convergence of the operator method and the free constant choice”, *Proc. Nat. Acad. Sci. Belarus (Phys. Math. Ser.)* **3** 71-75.
8. Hoàng Đỗ Ngọc Trâm (2008), “Phương pháp toán tử giải phương trình Schrödinger cho exciton hai chiều trong từ trường với cường độ bất kỳ”, *Luận văn Thạc sĩ chuyên ngành Vật lý lý thuyết và Vật lý toán*, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên ĐHQG TP HCM.(8)

(Ngày Tòa soạn nhận được bài: 20-11-2011; ngày chấp nhận đăng: 20-12-2011)