

ỨNG DỤNG CHƯƠNG TRÌNH TÍNH TOÁN DÀNH CHO SỰ PHÂN TÍCH CÁC MÔ HÌNH HỆ THỐNG LƯỢNG TỬ ÍT CHIỀU

Lương Lê Hải^{1*}, Trần Thị Lua^{1,2}, A. A. Gusev³, S. I. Vinitsky³ và O. Chuluunbaatar³

¹Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh

²Trường TH, THCS và THPT EMASI Vạn Phúc, Thành phố Hồ Chí Minh

³Viện Liên hiệp Nghiên cứu Hạt nhân Dubna, Thành phố Dubna, Liên Bang Nga

*Người chịu trách nhiệm về bài viết: Lương Lê Hải (email: llhai611987@gmail.com)

Thông tin chung:

Ngày nhận bài: 20/03/2019

Ngày nhận bài sửa: 14/06/2019

Ngày duyệt đăng: 22/07/2019

Title:

Applying a calculating program for analysis of models of the low-dimensional quantum systems

Từ khóa:

Bài toán biên, KANTBP 4M, phương pháp phần tử hữu hạn

Keywords:

Boundary value problem, KANTBP 4M, finite element method

ABSTRACT

In the paper, a calculating program named “KANTBP 4M – A program for solving boundary problems of the self-adjoint system of ordinary second order differential equations” is presented. The computational schemes and algorithms are implemented in the form of problem-oriented complexes programs in the Maple environment for the numerical and qualitative study of mathematical models of low-dimensional quantum systems in external fields, which are reduced to boundary value problems for systems of ordinary second order differential equations with real-valued variable coefficients and homogeneous boundary conditions. The reduced boundary value problems are solved by KANTBP 4M program, the code of which is based on the high-order finite element method with interpolation Hermite polynomials. The mathematical models are studied by the KANTBP 4M as: the eigenvalue and scattering problems for the Schrodinger equation with the one-dimensional and d - dimensional potentials in real form; the eigenvalue and scattering problems with constant or piece-wise continuous potentials; and the multichannel scattering problem of tunneling of two identical particles with the oscillator interaction through the potential barrier, etc.

TÓM TẮT

Bài viết giới thiệu chương trình có tên “KANTBP 4M – A program for solving boundary problems of the self-adjoint system of ordinary second order differential equations” (Luong et al., 2015) và đưa ra những ứng dụng của chương trình để phân tích các mô hình hệ thống lượng tử ít chiều. Các mô hình vật lý lượng tử ít chiều ban đầu được đưa về các mô hình toán học được đặc trưng bởi bài toán biên có chứa hệ phương trình vi phân thường bậc hai với các điều kiện biên được đơn giản hóa trong miền hữu hạn. Bài toán biên thu được sẽ được phân tích bằng chương trình tính toán KANTBP 4M với code (mã) sơ đồ tính toán dựa trên phương pháp phần tử hữu hạn với đa thức nội suy Hermite. Chương trình KANTBP 4M được viết trên phần mềm Maple để khảo sát các mô hình toán học phức tạp như bài toán trị riêng và bài toán tán xạ đối với phương trình Schrodinger với các hố thế năng một chiều hoặc nhiều chiều; bài toán trị riêng và bài toán tán xạ với các hố thế năng không đối và liên tục từng phần; và bài toán tán xạ nhiều kênh mô tả sự truyền qua hàng rào thế năng của hệ hai hạt đồng nhất với tương tác dao động...

Trích dẫn: Lương Lê Hải, Trần Thị Lua, A. A. Gusev, S. I. Vinitsky và O. Chuluunbaatar, 2019. Ứng dụng chương trình tính toán dành cho sự phân tích các mô hình hệ thống lượng tử ít chiều. Tạp chí Khoa học Trường Đại học Cần Thơ. 55(Số chuyên đề: Khoa học Giáo dục): 47-55.

1 GIỚI THIỆU

Chương trình KANTBP 4M (Luong *et al.*, 2015) được soạn trên phần mềm Maple (Maplesoft, 2019) bởi tác giả của đề tài cùng các cộng tác viên khoa học ở Viện Liên hiệp Hạt nhân Dubna, Liên Bang Nga. Chương trình có chứa hơn 1.000 mã code và thuật toán phức hợp được thể hiện qua các sơ đồ tính toán dựa trên phương pháp phần tử hữu hạn với đa thức nội suy Hermite để khảo sát các mô hình toán học được đơn giản hóa từ các mô hình vật lý lượng tử ít chiều phức tạp.

$$(D-EI)\Phi(z) \equiv \left(-\frac{1}{f_B(z)} \mathbf{I} \frac{d}{dz} f_A(z) \frac{d}{dz} + \mathbf{V}(z) + \frac{f_A(z)}{f_B(z)} \mathbf{Q}(z) \frac{d}{dz} + \frac{1}{f_B(z)} \frac{d f_A(z) \mathbf{Q}(z)}{dz} - EI \right) \Phi(z) = 0 \quad (1)$$

với $f_A(z) > 0$ và $f_B(z) > 0$ là những hàm liên tục hoặc liên tục từng phần, \mathbf{I} là ma trận đơn vị, $\mathbf{V}(z)$ là ma trận đối xứng ($V_{ij}(z) = V_{ji}(z)$) và $\mathbf{Q}(z)$ là ma trận phản xứng ($Q_{ij} = -Q_{ji}$). Các ma trận này có kích thước $N \times N$ và các phần tử của chúng là những hệ số liên tục hoặc liên tục từng phần mang giá trị thực hoặc phức thuộc không gian Sobolev $\mathcal{H}_2^{s \geq 1}(\Omega)$. Nghiệm của phương trình (1) thỏa mãn các điều kiện biên thuần nhất: Dirichlet (loại I) hoặc Neumann (loại II) hoặc loại III tại các điểm biên trong khoảng $z \in (z^{\min}, z^{\max})$ với giá trị được cho trước của các phần tử của ma trận $\mathcal{R}(z^t)$ có kích thước $N \times N$.

(I): $\Phi(z^t) = 0$, $t = \min$ và/hoặc \max (2)

$$-f^A(z^{\max}) \Phi^{\bullet}(z^{\max}) \mathbf{G}(z^{\max}) \Phi(z^{\max}) + f^A(z^{\min}) \Phi^{\bullet}(z^{\min}) \mathbf{G}(z^{\min}) \Phi(z^{\min}) \quad (5)$$

$$\mathbf{\Pi}(\Phi, E, z^{\min}, z^{\max}) =$$

$$\int_{z^{\min}}^{z^{\max}} \left[f^A(z) \frac{d\Phi^{\bullet}(z)}{dz} \frac{d\Phi(z)}{dz} + f^B(z) \Phi^{\bullet}(z) \mathbf{V}(z) \Phi(z) + f^A(z) \Phi^{\bullet}(z) \mathbf{Q}(z) \frac{d\Phi(z)}{dz} - f^A(z) \frac{d\Phi(z)}{dz} \mathbf{Q}(z) \Phi(z) - f^B(z) E \Phi^{\bullet}(z) \Phi(z) \right] dz \quad (6)$$

với $\mathbf{G}(z) = \mathcal{R}(z) - \mathbf{Q}(z)$ là ma trận đối xứng có kích thước $N \times N$, dấu \bullet là hoán vị T hoặc liên hợp

$$\Omega^{hj}(z) \left[z^{\min}, z^{\max} \right] = \{ z^{\min} = z_1^{\min}, z_j^{\max} = z_j^{\min} + h_j = 1, \dots, n-1, z_n^{\max} = z_n^{\min} + h_n = z^{\max} \}$$

2 SƠ LƯỢC VỀ SỰ THÀNH LẬP CHƯƠNG TRÌNH KANTBP 4M

2.1 Bài toán biên đối với hệ phương trình vi phân thường và phiếm hàm bậc hai đối xứng

Xét bài toán biên có chứa hệ gồm N phương trình vi phân thường bậc hai đối với hàm số cần tìm $\Phi(z) = (\Phi_1(z), \dots, \Phi_N(z))^T$ của biến số độc lập $z \in (z^{\min}, z^{\max})$ (Streng and Fics, 1977):

(II): $\lim_{z \rightarrow z^t} f_A(z) \left(\mathbf{I} \frac{d}{dz} - \mathbf{Q}(z) \right) \Phi(z) = 0$, $t = \min$ và/hoặc \max (3)

(III): $\left(\mathbf{I} \frac{d}{dz} - \mathbf{Q}(z) \right) \Phi(z) \Big|_{z=z^t} = \mathbf{R}(z^t) \Phi(z^t)$ (4)

Nghiệm $\Phi(z) \in \mathcal{H}_2^{s \geq 1}(\bar{\Omega})$ của các bài toán biên (1)–(4) được rút gọn theo phép tính toán số học các điểm dừng của phiếm hàm bậc hai đối xứng bằng cách sử dụng phương pháp phần tử hữu hạn.

$$\Xi(\Phi, E, z^{\min}, z^{\max}) \equiv$$

$$\int_{z^{\min}}^{z^{\max}} (z) (\mathbf{D} - E \mathbf{I}) \Phi(z) dz = \mathbf{\Pi}(\Phi, E, z^{\min}, z^{\max})$$

Hermite [†], tức là chuyển vị với liên hợp phức phụ thuộc vào loại bài toán cần giải.

2.2 Sự hình thành phương pháp phần tử hữu hạn của bài toán đại số

Trong không gian một chiều, khoảng $[z^{\min}, z^{\max}]$ được chia thành nhiều phần nhỏ mà mỗi phần nhỏ đó được xem như là một phần tử. Khoảng $\Delta = [z^{\min}, z^{\max}]$ chứa một bộ gồm n phần tử

$$\Delta_j = [z_j^{\min}, z_j^{\max} \equiv z_{j+1}^{\min}], \text{ tức là } \Delta = \bigcup_{j=1}^n \Delta_j.$$

Vì vậy, chúng ta thu được một mạng lưới:

trong đó, $z_j^{\min} \equiv z_{j-1}^{\max}, j=2, \dots, n$ là các điểm mắt và $h_j = z_j^{\max} - z_j^{\min}$ là độ dài (bước) của mỗi phần tử Δ_j .

Đa thức nội suy Hermite: Trong mỗi phần tử Δ_j chúng ta định nghĩa một mạng lưới con cách đều

$$\Omega_j^{hj(z)} [z_j^{\min}, z_j^{\max}] = \{z(j-1)p = z_j^{\min}, z(j-1)p+r, r=1, \dots, p-1, zjp = z_j^{\max}\}$$

với điểm nút $z_r \equiv z(j-1)p+r$ được xác định bởi công thức (Gusev *et al.*, 2014; Luong *et al.*, 2014):

$$z(j-1)p+r = \left((p-r)z_j^{\min} + rz_j^{\max} \right) / p, \quad r=0, \dots, p.$$

(7)

Để chọn bộ hàm cơ sở $\{N_l(z, z_j^{\min}, z_j^{\max})\}_{l=0}^{l^{\max}}$, $l^{\max} = \sum_{r=0}^p \kappa_r^{\max}$, chúng ta sử dụng đa thức nội suy Hermite $\{\{\varphi_r^{\kappa}(z)\}_{\kappa=0}^{\kappa_r^{\max}-1}\}$ được cho tại các điểm nút $z_r, r=0, \dots, p$ của mạng lưới (7). Tại mỗi điểm nút z_r , giá trị của hàm $\varphi_r^{\kappa}(z)$ cùng với đạo hàm đến bậc $(\kappa_r^{\max}-1)$, nghĩa là $\kappa=0, \dots, \kappa_r^{\max}-1$, với κ_r^{\max} được gọi là bội số của điểm nút z_r , được xác định bằng biểu thức (Berezin and Zhidkov, 1962):

$$\varphi_r^{\kappa}(z_{r'}) = \delta_{rr'} \delta_{\kappa 0}, \quad \frac{d^{\kappa'}}{dz^{\kappa'}} \varphi_r^{\kappa}(z) \Big|_{z=z_{r'}} = \delta_{rr'} \delta_{\kappa \kappa'} \quad (8)$$

Bậc của tất cả các đa thức nội suy Hermite $\varphi_r^{\kappa}(z)$ không phụ thuộc vào κ và bằng $p' = \sum_{r=0}^p \kappa_r^{\max} - 1$. Chỉ xét đa thức nội suy Hermite với các nút có bội số bằng nhau và bằng $\kappa_r^{\max} = \kappa^{\max}, r=0, \dots, p$. Trong trường hợp này bậc của đa thức bằng $p' = \kappa^{\max}(p+1) - 1$. Đối với đa thức nội suy Hermite ta dùng kí hiệu:

$$N_{\kappa^{\max}}^{\max_{r+\kappa}}(z, z_j^{\min}, z_j^{\max}) =$$

$$\varphi_r^{\kappa}(z), \quad r=0, \dots, p, \quad \kappa=0, \dots, \kappa^{\max}-1$$

Các đa thức nội suy Hermite này tạo một thành một cơ sở trong không gian đa thức bậc $p' = \kappa^{\max}(p+1) - 1$ trên mỗi phần tử $z \in [z_j^{\min}, z_j^{\max}]$ và có đạo hàm liên tục đến bậc $\kappa^{\max}-1$ tại các điểm biên z_j^{\min} và z_j^{\max} của phần tử $z \in [z_j^{\min}, z_j^{\max}]$.

3 MÔ TẢ NGẮN GỌN CÁC LOẠI BÀI TOÁN

3.1 Bài toán trị riêng đại số

Chương trình KANTBP 4M tính toán bộ M trị riêng $E: \Re E_1 \leq \Re E_2 \leq \dots \leq \Re E_M$ tương ứng với bộ hàm riêng $\Phi(z) = \{\Phi^m(z)\}_{m=1}^M, \Phi^m(z) = (\Phi_1^{(m)}(z), \dots, \Phi_N^{(m)}(z))^T$ thuộc không gian \mathcal{H}_2^2 của hệ (1). Chỉ xét hàm thế có giá trị thực, dấu \bullet trong phiếm hàm bậc hai (5) là liên hợp Hermite \dagger , khi đó điều kiện chuẩn hóa và trực giao của hàm riêng là:

$$\langle \Phi^{(m)} | \Phi^{(m')} \rangle = \int_{z^{\min}}^{z^{\max}} f_B(z) (\Phi^{(m)}(z))^{\dagger} \Phi^{(m')}(z) dz = \delta_{mm'} \quad (9)$$

Để giải bài toán của các trạng thái liên kết giới hạn trên trực hoặc nửa trực, bài toán ban đầu được đơn giản hóa thành bài toán biên (1)–(4) trên khoảng hữu hạn $z \in (z^{\min}, z^{\max})$ với các điều kiện biên (2)–(4).

3.2 Bài toán tán xạ nhiều kênh

Trên trục $z \in (-\infty, +\infty)$ với giá trị năng lượng không đổi $E = \Re E$, nghiệm cần tìm $\Phi(z) = \{\Phi_V^{(i)}(z)\}_{i=1}^N, \Phi_V^{(i)}(z) = (\Phi_{1V}^{(i)}(z), \dots, \Phi_{N_V}^{(i)}(z))^T$ của bài toán biên (1) (chi số dưới v chỉ hướng ban đầu của sóng tới từ trái sang phải \rightarrow hoặc từ phải sang trái \leftarrow) trong khoảng $z \in (z^{\min}, z^{\max})$ được tính toán bằng phương trình KANTBP 4M. Các nghiệm này phải thỏa mãn điều kiện (4) tại các điểm biên trong khoảng $z \in (z^{\min}, z^{\max})$ với tiệm cận có dạng “sóng tới + sóng truyền qua” trong các kênh mở $i=1, \dots, N_O$ (Gusev *et al.*, 2016):

$$\Phi_{\nu}(z \rightarrow \pm\infty) = \begin{cases} \mathbf{X}^{(+)}(z)\mathbf{T}_{\nu}, & z \in [z^{\max}, +\infty), \\ \mathbf{X}^{(+)}(z) + \mathbf{X}^{(-)}(z)\mathbf{R}_{\nu}, & z \in (-\infty, z^{\min}], \end{cases} \quad \nu = \rightarrow, \quad (10)$$

$$\begin{cases} \mathbf{X}^{(-)}(z) + \mathbf{X}^{(+)}(z)\mathbf{R}_{\nu}, & z \in [z^{\max}, +\infty), \\ \mathbf{X}^{(-)}(z)\mathbf{T}_{\nu}, & z \in (-\infty, z^{\min}], \end{cases} \quad \nu = \leftarrow,$$

với \mathbf{T}_{ν} và \mathbf{R}_{ν} lần lượt là ma trận biên độ của sóng truyền qua và sóng phản xạ. Ma trận tán xạ \mathbf{S} là ma trận đối xứng và đơn nhất có kích thước $N_O \times N_O$: $\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{\rightarrow} & \mathbf{T}_{\leftarrow} \\ \mathbf{T}_{\rightarrow} & \mathbf{R}_{\leftarrow} \end{pmatrix}$.

4 ỨNG DỤNG CHƯƠNG TRÌNH KANTBP 4M

4.1 Bài toán trị riêng đối dao động tử điều hòa một chiều và d -chiều ($d \geq 2$)

Từ phương trình (1) khi $f_B(z) = f_A(z) = z^{d-1}$, $N=1, V(z) \equiv V_{11}(z) = z^2$, ta được phương trình Schrodinger của dao động tử điều hòa d -chiều cho các trạng thái liên kết:

$$(\mathbf{D} - E_m)\Phi_m(z) = \left(-\frac{1}{z^{d-1}} \frac{d}{dz} z^{d-1} + z^2 - E_m \right) \Phi_m(z) = 0 \quad (11)$$

Phương trình (11) có nghiệm giải tích – trị riêng E_m^{exact} và hàm riêng của $\Phi_m^{\text{exact}}(z)$, được chuẩn hóa bởi điều kiện (9).

Khi $d=1$ trên khoảng vô hạn $z \in (-\infty, +\infty)$ ta có trị riêng $E_m^{\text{exact}} = 2m+1$, $m=0,1,\dots$, và hàm riêng được chuẩn hóa $\Phi_m^{\text{exact}}(z) = \frac{\exp(-z^2/2) H_{m-1}(z)}{\sqrt{4\pi} \sqrt{2^{m-1}} \sqrt{(m-1)!}}$. Khi

$d \geq 2$ trên nửa khoảng vô hạn $z \in (0, +\infty)$ ta có trị riêng $E_m^{\text{exact}} = d+4m$, $m=0,1,\dots$, và hàm riêng được chuẩn hóa $\Phi_m^{\text{exact}}(z) = \frac{\sqrt{2\Gamma(m+d/2)/\Gamma(m+1)}}{(d/2)} \exp(-z^2/2) {}_1F_1(-m, d/2, z^2)$

Kết quả tính toán bởi chương trình KANTBP 4M được biểu diễn trên các Hình 1, Hình 2 và Hình 3.

Hình 1 biểu diễn hàm riêng và trị riêng tương ứng của trạng thái thứ 4 và thứ 5 của dao động tử

điều hòa $d=1$ chiều và trạng thái thứ 6 của dao động tử điều hòa $d=5$ chiều (từ trái sang phải) được tính toán bằng chương trình KANTBP 4M, với $p=3, k^{\max}=2, p'=7$.

Hình 2 biểu diễn sai số của hàm riêng của trạng thái thứ 4 và thứ 5 của dao động tử điều hòa $d=1$ chiều và trạng thái thứ 6 của dao động tử điều hòa $d=5$ chiều (từ trái sang phải). Sai số của hàm riêng được biểu diễn bằng đồ thị ở dạng thang đo Logarit của giá trị tuyệt đối của hiệu số $|\Phi_m^h(z) - \Phi_m^{\text{exact}}(z)|$ giữa hàm riêng giải tích $\Phi_m^{\text{exact}}(z)$ và hàm riêng $\Phi_m^h(z)$ được tính toán bằng chương trình KANTBP 4M, với $p=3, k^{\max}=2, p'=7$.

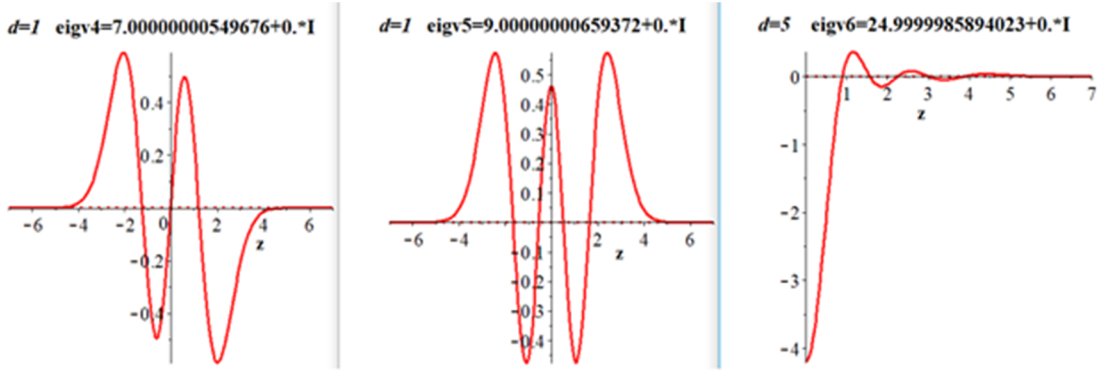
Hình 3 biểu diễn sai số của trị riêng (trái) và hàm riêng (phải) của trạng thái thứ năm đối với dao động tử điều hòa $d=1$ chiều (hàng trên) và $d=5$ chiều (hàng dưới) với các giá trị khác nhau của p, k^{\max}, p' tương ứng trên các khoảng cách đều $z \in (-10, 10)$ và $z \in (0, 10)$ trong sự phụ thuộc vào số hàng L của ma trận của bài toán trị riêng đại số. Hình vẽ cho thấy đồ thị biểu diễn sai số tính toán ở dạng thang đo Logarit kép gần giống như những đường thẳng, độ nghiêng của các đường thẳng này chỉ rõ sự đúng đắn của ước tính lý thuyết $|E_m^h - E_m| \leq c_1 h^{2p'}$ và $\|\Phi_m^h(z) - \Phi_m(z)\|_0 \leq c_2 h^{p'+1}$

(Chuluunbaatar et al., 2007; Steng and Fics, 1977).

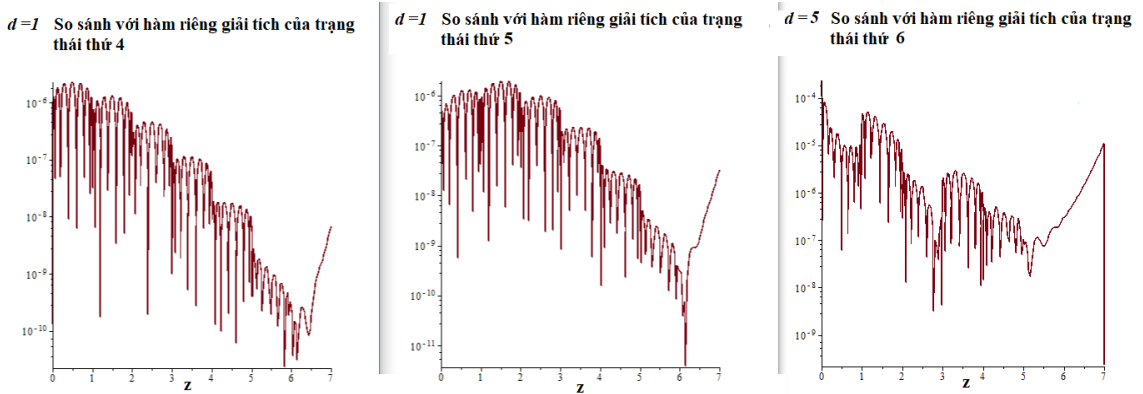
4.2 Bài toán trị riêng và bài toán tán xạ với hàm thế không đối liên tục từng phần

4.2.1 Bài toán trị riêng

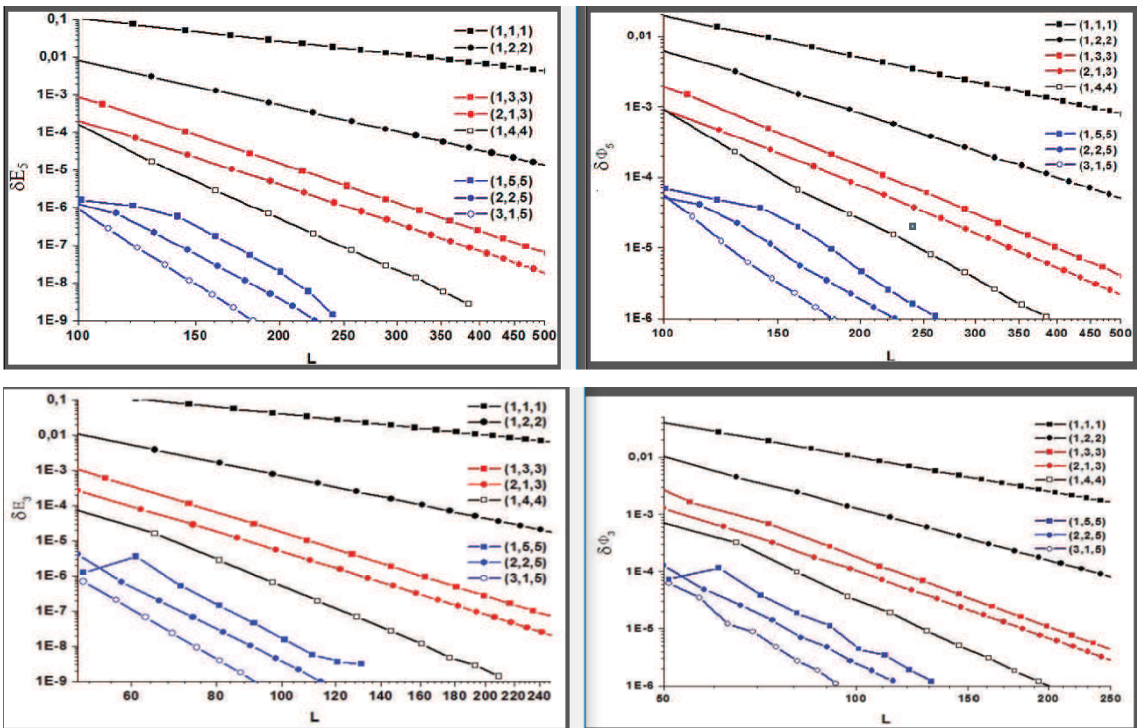
Trong phương trình (1) khi $f_B(z) = f_A(z) = 1, Q(z) = 0$, ta được:



Hình 1: Hàm riêng và trị riêng tương ứng của trạng thái thứ 4, thứ 5 và thứ 6



Hình 2: Sai số của các hàm riêng của trạng thái thứ 4, thứ 5 và thứ 6



Hình 3: Sai số của trị riêng (trái) và hàm riêng (phải) trong sự phụ thuộc vào số hàng L của ma trận của bài toán trị riêng đại số

$$\left(-\mathbf{I} \frac{d^2}{dz^2} + \mathbf{V}(z) - E_t \mathbf{I} \right) \Phi_t(z) = 0,$$

$$\int_{z_{\min}}^{z_{\max}} (\Phi_t(z))^T \Phi_{t'}(z) dz = \delta_{tt'}, \quad (12)$$

$$V_{ij}(z) = V_{ji}(z) = \{V_{ij;1}, z \leq z_1; V_{ij;2}, z \leq z_2; \dots; V_{ij;k-1}, z \leq z_{k-1}; V_{ij;k}, z > z_{k-1}\} \quad (13)$$

Đây là bài toán mô tả mô hình sóng ngang của dạng ống dẫn sóng (Gevorkyan *et al.*, 2015). Vì các hàm riêng của phổ gián đoạn giảm theo hàm mũ khi $z \rightarrow \infty$, nên bài toán ban đầu được đơn giản hóa

thành bài toán (1)–(3) trên đoạn $z \in (z_{\min}, z_{\max})$ ($z_{\min} < z_1$ và $z_{\max} > z_{k-1}$).

Với $k = 3$ và $N = 3$ ta có thể cho hàm thế ở dạng như sau:

$$V(z) = \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 10 \end{pmatrix}, z < -2; \begin{pmatrix} -5 & 4 & 4 \\ 4 & 0 & 4 \\ 4 & 4 & 10 \end{pmatrix}, -2 \leq z \leq 2; \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 10 \end{pmatrix}, z > 2 \right\}. \quad (14)$$

Kết quả tính toán bởi chương trình KANTBP 4M được biểu diễn trên Hình 4. Hình góc trên bên trái biểu diễn số thứ tự và số lượng hàm sóng thành phần chứa trong hệ phương trình (12) của bài toán đang xét, cụ thể ở đây có hệ ba phương trình nên sẽ có ba hàm riêng cần tìm ứng với ba màu của các đường nằm ngang. Bộ hàm riêng $\Phi_t(z) = (\Phi_{1t}(z), \Phi_{2t}(z), \Phi_{3t}(z))^T$ và trị riêng ($E_t = \text{eigvt}$, $t=1, \dots, 5$) tương ứng của năm trạng thái đầu tiên, với $z_{\min} = -12, h_j = 1, \dots, 10 = 1, h_j = 11, \dots, 20 = 0.4$,

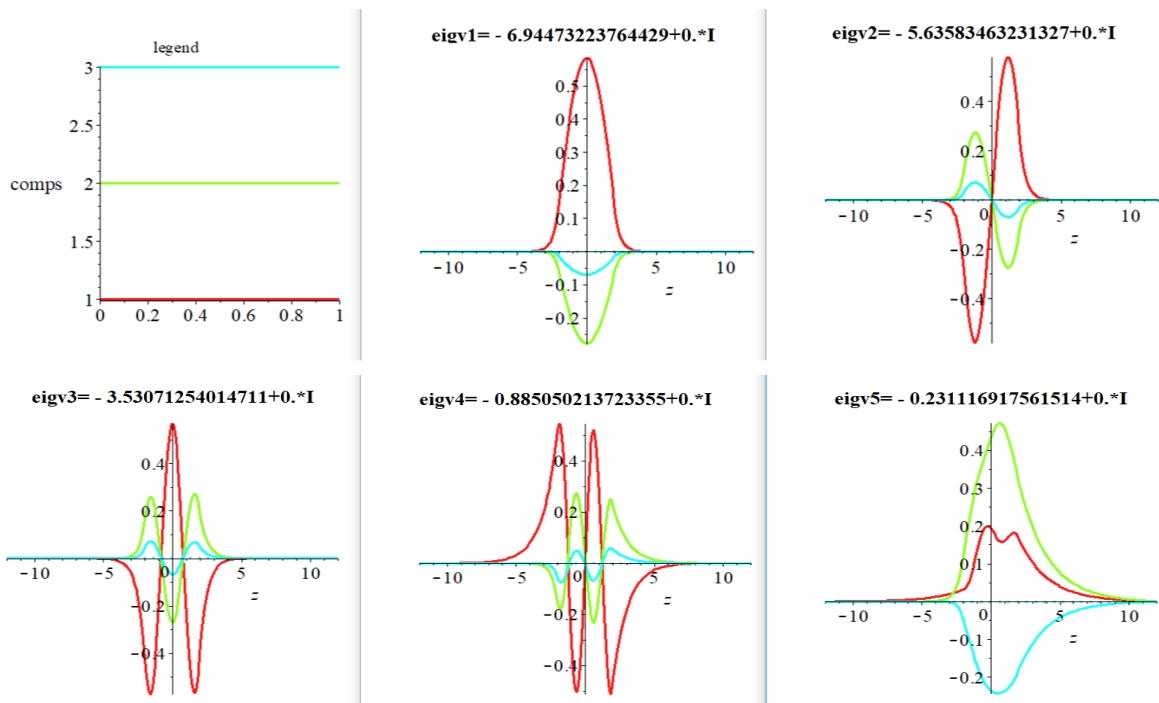
Nghiệm của bài toán biên (12) được tính toán bởi chương trình KANTBP 4M cho độ chính xác là 10^{-9} so với nghiệm của bài toán ban đầu trên toàn trục $z \in (-\infty, +\infty)$ (Gevorkyan *et al.*, 2015).

4.2.2 Bài toán tán xạ

Xét bài toán tán xạ với giá trị thực cho trước của tham số phổ năng lượng E trên trục $z \in (-\infty, +\infty)$

(Gevorkyan *et al.*, 2015; Gusev *et al.*, 2016):

$h_j = 21, \dots, 30 = 1, z_{\max} = 12$ và $p = 3, k^{\max} = 2, p' = 7$.



Hình 4: Bộ hàm riêng và trị riêng tương ứng của năm trạng thái đầu tiên

$$\left(-\mathbf{I} \frac{d^2}{dz^2} + \mathbf{V}(z) - E_t \mathbf{I} \right) \Phi_t(z) = 0, \quad (15)$$

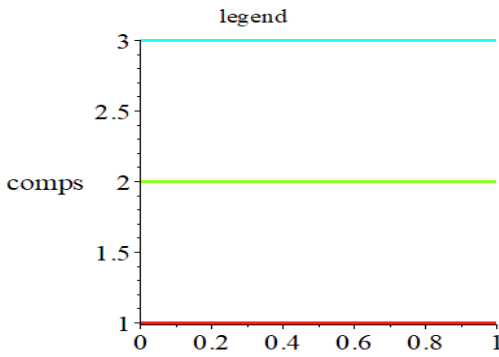
Với \mathbf{I} – ma trận đơn vị, $\mathbf{V}(z)$ – ma trận hàm thế không đổi và liên tục từng phần kích thước $N \times N$ được cho ở dạng (13) và (14).

Kết quả tính toán được thể hiện trên Hình 5, trong đó bộ hàm riêng $\Phi_{1;\rightarrow}(z), \Phi_{1;\leftarrow}(z), \Phi_{2;\leftarrow}(z)$ và ma trận tán xạ \mathbf{S} của bài toán tán xạ nhiều kênh với $z_{\min} = -6, h_j = 1, \dots, 30 = 0.4, z_{\max} = 6$ và $p=3, k^{\max}=2, p'=7$. Từ Hình 5 ta thấy, với giá trị $E=3,8$ đối với sóng tới từ bên trái sẽ có $N^L_o=1$ kênh mở, và từ bên phải sẽ có $N^R_o=2$ kênh mở. Hình góc trên bên trái được miêu tả tương tự như bài toán trị riêng được khảo sát ở phần trước. Các hình còn

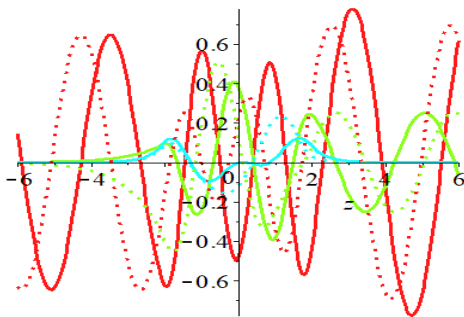
lại biểu diễn hàm sóng của bài toán trị riêng và bài toán tán xạ, đồ thị nét liền biểu diễn phần thực còn nét đứt biểu diễn phần ảo của hàm sóng.

Trong chương trình KANTBP 4M có chứa một chương trình phụ có tên gọi là SMART. Chương trình này tính toán nghiệm giải tích của bài toán ở dạng tổ hợp tuyến tính của các hàm lượng giác và hàm số mũ với các hệ số chưa biết.

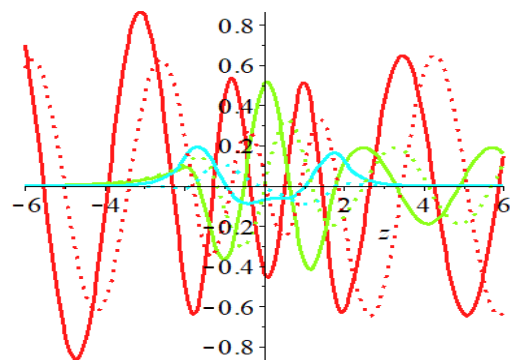
So sánh các kết quả thu được bởi chương trình KANTBP 4M với các kết quả nhận được từ hệ phương trình bởi chương trình SMART cho độ chính xác $\text{accuracy} = \text{San} - \text{Smatr}$ của tính toán các ma trận vuông của biên độ phản xạ $R \rightarrow$ và $R \leftarrow$ với kích thước 1×1 và 2×2 , và ma trận chữ nhật của biên độ truyền qua $T \rightarrow$ và $T \leftarrow$ với kích thước 2×1 và 1×2 vào khoảng $\sim 10^{-13}$. Ngoài ra, độ chính xác của việc kiểm tra điều kiện đối xứng và đơn nhất của ma trận tán xạ $\mathbf{S} \sim 10^{-13}$.



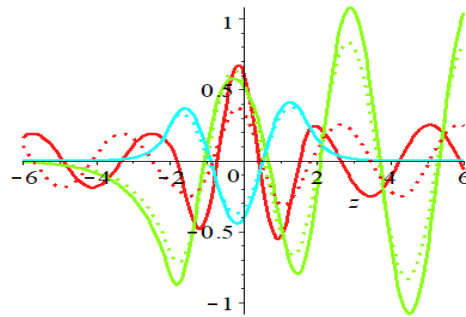
Sóng tới từ phải sang trái RL(1): E=3.8



Sóng tới từ trái sang phải LR(1): E=3.8



Sóng tới từ phải sang trái RL(2): E=3.8



$$\text{Smatr} = \begin{bmatrix} 0,172112308697617 + 0,287217875108078 \text{ I} & 0,805053671635163 - 0,412009312027338 \text{ I} & 0,0370164789722525 + 0,262011332364042 \text{ I} \\ 0,805053671635159 - 0,412009312027337 \text{ I} & 0,0596794820525667 + 0,234838091811337 \text{ I} & -0,3160717111078588 + 0,153378668991837 \text{ I} \\ 0,0370164789722513 + 0,262011332364041 \text{ I} & -0,3160717111078588 + 0,153378668991838 \text{ I} & 0,228490505982369 + 0,868530706438974 \text{ I} \end{bmatrix}$$

Hình 5: Bộ hàm riêng và ma trận tán xạ của bài toán tán xạ nhiều kênh

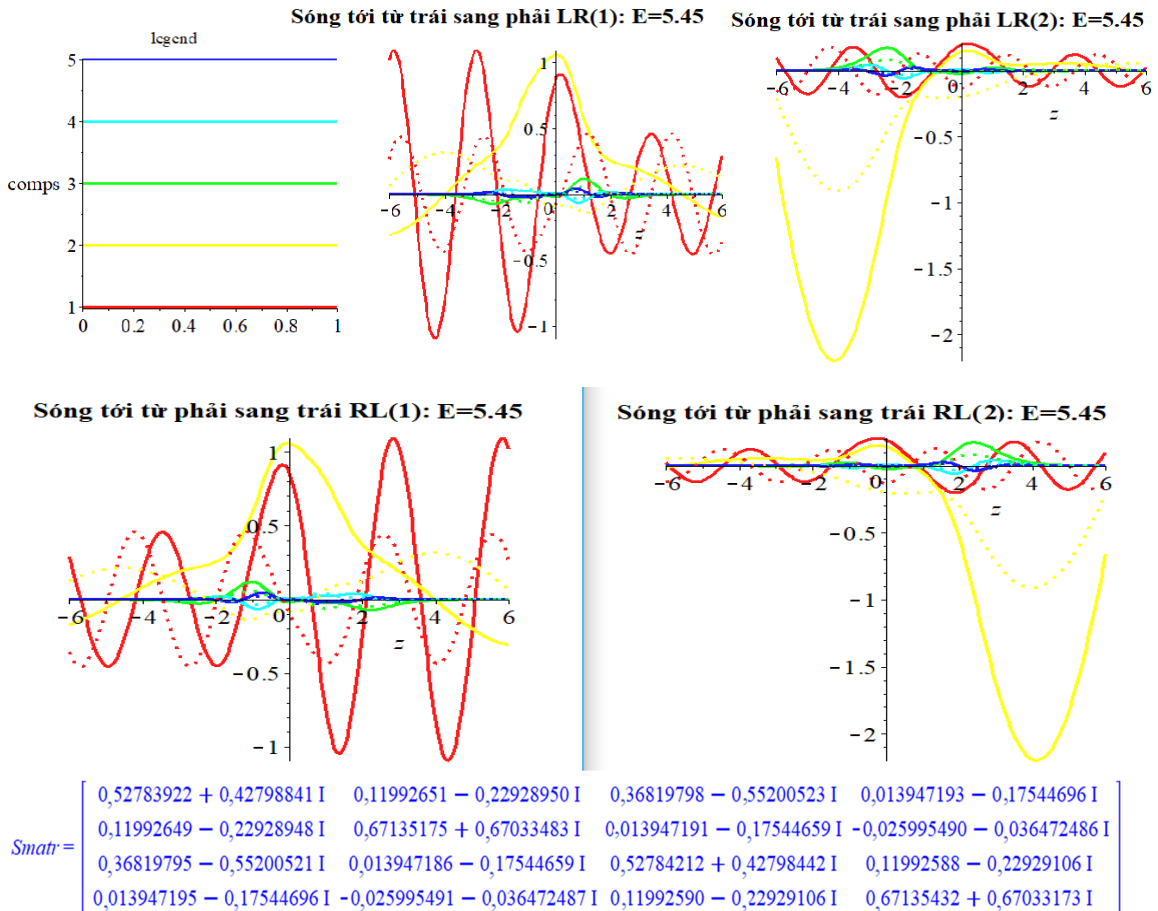
4.3 Bài toán tán xạ nhiều kênh mô tả sự truyền qua rào thế của hệ hai hạt đồng nhất với tương tác dao động

Xét hệ hai hạt đồng nhất có tọa độ x_1 và x_2 truyền qua rào thế Gaussian $V_G(x_s) = \alpha / (\sigma\sqrt{2\pi}) \exp(-x_s^2/\sigma^2)$ với tương tác dao động $V_{osc}(x_1-x_2) = (x_1-x_2)^2/2$, trong đó $s=1,2, \sigma=0.1, \alpha=alpha =5$. Trong hệ phương trình (1), ta cho $Q_{ij}(z)=0, f_A(z)=f_B(z)=1$ và $V_{ij}(z)$ được cho ở dạng giải tích (Gusev *et al.*, 2014; Vinitsky, *et al.*, 2014):

$$V_{ij}(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Phi_i^{osc}(x) (V_G((z-x)/\sqrt{2}) + V_G((z+x)/\sqrt{2})) \Phi_j^{osc}(x)$$

với $\Phi_j^{osc}(x)$ là hàm riêng của dao động từ điều hòa với hàm thế $V_{osc}(x) = x^2$ và trị riêng $E_{osc} = 1, 5, 9, 13, \dots$

Nghiệm Φ_{even} và Φ_{odd} của bài toán tán xạ nhiều kênh trên bán trục $z \in (0, +\infty)$ được tính toán bởi chương trình KANTBP 4M được biểu diễn trên Hình 6. Hình ngoài cùng bên trái biểu diễn số thứ tự và số lượng hàm sóng ($N=5$) của bài toán. Các hình còn lại biểu diễn hàm sóng của bài toán. Đồ thị nét liền biểu diễn phần thực còn nét đứt biểu diễn phần ảo của hàm sóng. Nghiệm của bài toán biên (1) thỏa điều kiện biên loại ba (4) và ma trận tán xạ S được tính toán bằng chương trình KANTBP 4M trên một mạng lưới đồng nhất với $z_{min} = -6, z_{max} = 6, N=5, p=3, k^{max}=2$.



Hình 6: Nghiệm của bài toán biên thỏa điều kiện biên loại ba và ma trận tán xạ

5 KẾT LUẬN

Bài báo đã giới thiệu chương trình KANTBP 4M và những ứng dụng của chương trình trong việc

phân tích các mô hình hệ thống lượng tử ít chiều được đưa về các mô hình toán học. Kết quả tính toán số học bởi chương trình cho độ chính xác cao so với

các phương pháp số học hoặc giải tích được trình bày trong các công trình khác.

Chương trình KANTBP 4M là một công cụ hữu ích cho các nhà nghiên cứu đặc biệt trong lĩnh vực khoa học tự nhiên và khoa học kỹ thuật để khảo sát các hàng loạt các mô hình tính toán dựa trên các mô hình vật lý như vật lý lượng tử, vật lý hạt nhân nguyên tử, vật lý chất rắn,...

LỜI CẢM ƠN:

Nghiên cứu này được hỗ trợ bởi Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh qua đề tài cấp Trường với mã số CS.2018.19.50.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Berezin, I.S., and Zhidkov, N.P., 1962. Calculation Methods, 2nd Edition. Moscow. Russia, 464 pages.

Chuluunbaatar, O., Gusev, A. A., Abrashkevich, A. G. *et al.*, 2007. KANTBP: A program for computing energy levels, reaction matrix and radial wave functions in the coupled-channel hyperspherical adiabatic approach. Computer Physic Communication. 177: 649-675.

Gevorkyan, M. N., Kulyabov, D.S., Lovetskiy, K.P., Sevastyanov, A.L., and Sevastyanov, L.A., 2015. Waveguide modes of a planar optical waveguide. Mathematical modeling and geometry. 3(1): 43- 63

Gusev, A.A., Gerdt, V.P., Luong, L.H., Derbov, V.L., Vinitzky, S.I., and Chuluunbaatar, O., 2016. Symbolic-Numeric Algorithms for Solving BVPs for a System of ODEs of the Second Order: Multichannel Scattering and Eigenvalue Problems. Springer International Publishing

Switzerland. 9890: 212-227.

Gusev, A.A., Vinitzky, S.I., Luong, L.H. *et al.*, 2014. Resonant tunneling of the few bound particles through repulsive barriers. Physics of Atomic Nuclei. 77: 389-413.

Gusev, A.A., Vinitzky, S.I., Luong, L.H. *et al.*, 2014. Symbolic-numerical solution of boundary-value problems with self-adjoint second-order differential equation using the finite element method with Interpolation Hermite polynomials. Springer International Publishing Switzerland. 8660: 138-154.

Hai, L.L., Gusev, A.A., Chuluunbaatar, O., and Vinitzky, S.I., 2015. KANTBP 4M – A program for solving boundary problems of the self-adjoint system of ordinary second order differential equations, accessed on 15 November 2015. Available from <http://www.info.jinr.ru/programs/jinrlib/kantbp4m/indexe>

Luong, L.H., Gusev, A.A., 2014. Calculation Schemes for Solving Sturm–Liouville Problem by Finite-Element Method with Interpolating Hermite Polynomials. Vestnik of Peoples' Friendship University of Russia. 4: 33-49.

Maplesoft. Mathematics-based software & services for education, engineering, and research. accessed in January 2019. Available from <http://www.maplesoft.com>

Streng, G., and Fics, G., 1977. Theory of finite element method. World. Moscow, 351 pages.

Vinitzky, S.I., Gusev, A.A., Luong, L.H. *et al.*, 2014. Symbolic numerical algorithm for solving quantum tunneling problem of a diatomic molecule through repulsive barriers. Springer International Publishing Switzerland. 8660: 472-490.