GIẢ THẾ CỦA DAO ĐỘNG PHI ĐIỀU HÒA MỘT CHIỀU TRONG GẦN ĐÚNG BẬC NHẤT CỦA LÝ THUYẾT NHIỄU LOẠN

Nguyễn Thị Thanh Hương
Trường đại học sư phạm. ĐHQG HN

I- MỞ ĐẦU

Lý thuyết giả thế đã được nghiên cứu đối với kim loại [1], trong nhiệt động lực học thống kê [2]. Người ta đã ứng dụng giả thế phụ thuộc nhiệt độ để phát triển lý thuyết chuyển pha [3, 4], lý thuyết nóng chảy [5, 6], thế năng tương tác giữa các nguyên tử trong kim loại [7].

Giả thế của dao động tử phi điều hòa cho phép nghiên cứu nhiều tính chất nhiệt động của kim loại và hợp kim. Tuy nhiên, hiện nay vấn đề này vẫn chưa được nghiên cứu. Vì vậy, trong bài báo này chúng tôi đặt vấn đề tính biểu thức giải tích giả thế của dao động tử phi điều hòa.

Để đơn giản trong tính toán chúng tôi xét trường hợp dao động tử phi điều hòa một chiều trong gần đúng bậc nhất của lý thuyết nhiễu loạn.

II. GIẢ THẾ CỦA DAO ĐỘNG TỬ PHI ĐIỀU HÒA

Chúng ta xét hệ dao động tử phi điều hòa một chiều với phương trình dao động:

$$\hat{H}\Psi_n(x) = E_n\Psi_n(x)$$

Với $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, $\hat{H}_0$ là toán tử Hamilton của dao động tử điều hòa một chiều, V là thế năng nhiễu loạn có dạng : $V = \beta x^3 + \gamma x^4$, ở đây β, γ là các hệ số. Để tiện cho tính toán sau này chúng ta ký hiệu : $V = \lambda v$, λ là tham số không thứ nguyên bé, $\Psi_n(x)$, E_n là hàm sóng và năng lượng của hệ.

Hàm phân bố của dao động tử phi điều hòa được xác định bằng biểu thức:

$$\rho(x, \lambda, T) = C \sum_n e^{-\frac{En(\lambda, n)}{KT}} \psi_n^*(x, \lambda)\, \psi_n(x, \lambda) \qquad (1)$$

Với $$C^{-1} = \sum_n e^{-\frac{En(\lambda, n)}{KT}}$$

K là hằng số Boltzmann, T là nhiệt độ tuyệt đối.
Chúng ta sẽ tính $\rho(x, \lambda, T)$ và biểu diễn nó dưới dạng:

$$\rho(x, \lambda, T) = A(T)\, e^{-\frac{\phi(x, T)}{KT}} \qquad (2)$$

Trong đó A(T) là hệ số phụ thuộc nhiệt T và $\phi(x, T)$ là giả thế của dao động phi điều hòa. Khai triển $\ln\rho$ trong gần đúng bậc nhất của λ, ta có :

$$\ell n\rho(x,\lambda, T) = \ell n\rho(x, \lambda = 0, T) + \left(\frac{\partial \ell n\rho}{\partial\lambda}\right)_{\lambda = 0} \lambda + \ldots$$

kí hiệu $\rho(x, \lambda = 0, T) = \rho_0$, ta có

$$\rho = \rho_0 e^{\frac{1}{\rho_0}\left(\frac{\partial\rho}{\partial\lambda}\right)_0 \lambda} \tag{3}$$

ở đây $\rho_0 = D_0 / z_0$, $D_0 = D(\lambda = 0)$, $z_0 = z(\lambda = 0)$,

$$\rho_0 = \sqrt{\frac{q}{\pi}}\, e^{-qx^2}, \quad q = \frac{m\omega}{\hbar} \text{ thy}, \quad y = \frac{\hbar\omega}{2KT} \tag{4}$$

m là khối lượng của dao động tử, ω là tần số dao động.

Nếu trong biểu thức (1) chúng ta ký hiệu :

$$c^{-1} = z \tag{5}$$

$$D = \sum_n e^{-\frac{En(n,\lambda)}{KT}} \psi_n^*(x,\lambda)\psi_n(x,\lambda) \tag{6}$$

thì $\rho(x, T, \lambda) = D / z$ (7)

Với sự giúp dỡ của (7) chúng ta có thể viết số mũ của hàm lũy thừa trong biểu thức (3) dưới dạng:

$$\frac{1}{\rho_0}\left(\frac{\partial\rho}{\partial\lambda}\right)_0 \lambda = \frac{1}{D_0}\left(\frac{\partial D}{\partial\lambda}\right)_0 \lambda - \frac{1}{z_0}\left(\frac{\partial z}{\partial\lambda}\right)_0 \lambda \tag{8}$$

Như đã nói ở trên chúng tôi chỉ giới hạn xét biểu thức của giả thế trong gần đúng bậc nhất của hàm sóng và năng lượng nên $E_n = E_n^o + E_n^{(1)}$,

$\psi_n(x) = \psi_n^o(x) + \psi_n^{(1)}(x)$, $E_n^o = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$, $E_n^{(1)}$ và $\Psi_n^{(1)}$ là hiệu chính bậc nhất của năng lượng và hàm sóng.

$$E_n^{(1)} = a\left\{(n+\frac{1}{2})^2 + \frac{1}{4}\right\}, \quad a = \sigma\gamma x_0^4 \tag{9}$$

$$\psi_n^{(1)} = A\left\{a_n \psi_{n-1}^o + b_n \psi_{n+1}^o + C_n \psi_{n-3}^o + d_n \psi_{n+3}^o\right\} + B\left\{e_n \psi_{n-2}^o + f_n \psi_{n+2}^o + g_n \psi_{n-4}^o + h_n \psi_{n+4}^o\right\} \tag{10}$$

Với

$a_n = q\sqrt{n^3}$, $\qquad b_n = -q\sqrt{(n+1)^3}$,

$C_n = \sqrt{n(n-1)(n-2)}$, $d_n = -\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}$,

$e_n = 4(2n-1)\sqrt{n(n-2)}$, $f_n = -4(2n+3)\sqrt{(n+1)(n+2)}$,

$g_n = \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}$, $h_n = -\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}$,

$$A = \frac{\beta x_o^3}{3\hbar\omega}, \quad B = \frac{\gamma x_o^4}{4\hbar\omega}, \quad x_o^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

Từ biểu thức (5) ta tính được số hạng thứ 2 trong (8):

$$\frac{1}{z_o}\left(\frac{\partial z}{\partial \lambda}\right)_o \lambda = -\frac{1}{KT}\left\langle E_n^{(1)} \right\rangle_o$$

ở đây $\left\langle E_n^{(1)} \right\rangle_o$ là trung bình với phân bố xác suất khi không có nhiễu loạn, chú ý tới (9), ta có :

$$\frac{1}{z_o}\left(\frac{\partial z}{\partial \lambda}\right)_o \lambda = -\frac{a}{2KT}\mathrm{cth}^2 y \tag{11}$$

Từ biểu thức (6) ta tính số hạng thứ nhất trong (8) :

$$\frac{1}{D_o}\left(\frac{\partial D}{\partial \lambda}\right)_o \lambda = -\frac{a}{4KT} - \frac{a}{KT}\frac{1}{D_o}\sum_n\left(n+\frac{1}{2}\right)^2 e^{-\frac{E_n^0}{KT}}\psi_n^o\psi_n^o + \frac{2}{D_o}\sum_n e^{-\frac{E_n^o}{KT}}\psi_n^o\psi_n^{(1)} \tag{12}$$

Để thể hiện rõ sự phụ thuộc vào nhiệt độ T ta viết biểu thức (12) dưới dạng sau:

$$\frac{1}{D_o}\left(\frac{\partial D}{\partial \lambda}\right)_o \lambda = -\frac{a}{4KT} - \frac{a}{4KT}\frac{1}{D_o}\frac{d^2 D_o}{dy^2} + \frac{2M}{D_o} \tag{13}$$

Với $$D_o = \sum_n e^{-\frac{E_n^o}{KT}}\psi_n^o\psi_n^o = \sum_n e^{-2y\left(n+\frac{1}{2}\right)}\psi_n^o\psi_n^o \tag{14}$$

$$M = \sum_n e^{-\frac{E_n^o}{KT}}\psi_n^o\psi_n^{(1)} \tag{15}$$

Với sự giúp đỡ của biểu thức (4) và (10) chúng ta viết lại biểu thức (13) dưới dạng sau:

$$\begin{aligned}\frac{1}{D_o}\left(\frac{\partial D}{\partial \lambda}\right)_o \lambda = &-\frac{a}{4KT} - \frac{a}{4KT}\left\{\frac{1}{4}\left(3\mathrm{cth}^2 y + 3\mathrm{th}^2 y - 2\right) + \right.\\ &\left. + \frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_o}\right)^2\left(1-\mathrm{th}^2 y\right)\left(3\mathrm{th}y + \mathrm{cth}y\right) + \frac{1}{4}\left(\frac{x}{x_o}\right)^4\left(1-\mathrm{th}^2 y\right)^2\right\} + \\ &+ \frac{2\beta x_o^3}{3\hbar\omega}\left\{-6\left(\frac{x}{x_o}\right)\mathrm{th}^2 y + \left(\frac{x}{x_o}\right)^3\left(2\mathrm{th}^2 y - 3\mathrm{th}y\right)\right\} + \\ &+ \frac{\gamma x_o^4}{2\hbar\omega}\left\{\frac{9}{2}\left(\mathrm{cth}y + \mathrm{th}y\right) + 3\left(\frac{x}{x_o}\right)^2\left(1-3\mathrm{th}^2 y\right) + \frac{1}{2}\left(3\mathrm{th}^3 y - 5\mathrm{th}y\right)\left(\frac{x}{x_o}\right)^4\right\}\end{aligned} \tag{16}$$

Thay các biểu (11), (16) vào (3) và chú ý tới (4) ta có:

$$\rho(x,T) = \sqrt{\frac{q}{\pi}}\, e^{-\frac{w}{KT}}\, e^{-\frac{\phi}{KT}} \tag{17}$$

trong đó

$$w = \frac{3}{8}\gamma x_o^4\left\{2 + 3\,th^2y - 5cth^2y - \frac{3}{y}\left(cthy + thy\right)\right\}$$

và ϕ là biểu thức giả thế của dao động tử phi điều hòa:

$$\phi = xu(T) + x^2v(T) + x^3g(T) + x^4h(T) \tag{18}$$

Với : $u(T) = 2\beta x_o^2\,\frac{1}{y}\,th^2y$

$$v(T) = \frac{m\omega^2}{2}\,\frac{1}{y}\,thy + \frac{3}{4}\gamma x_o^2\left\{cthy + 2thy - 3th^3y - \frac{1}{y}\left(1 - 3th^2y\right)\right\}$$

$$g(T) = -\frac{\beta}{3y}\left(2th^3y - 3thy\right)$$

$$h(T) = \frac{\gamma}{8}\left\{3\left(1 - th^2y\right)^2 - \frac{1}{y}\left(3th^3y - 5thy\right)\right\} \tag{19}$$

III. THẢO LUẬN KẾT QUẢ:

1) Bằng một phương pháp gần đúng của cơ học lượng tử chúng tôi đã thu được biểu thức tổng quát của giả thế của dao động tử phi điều hòa một chiều. Biểu thức của giả thế phụ thuộc tường minh vào độ dời x và nhiệt độ T cho phép chúng ta nghiên cứu được nhiều tính chất nhiệt động của kim loại và hợp kim trong gần đúng phi điều hòa.

2) Biểu thức của giả thế thu được là đúng với nhiệt độ T bất kỳ. Trong trường hợp ở vùng nhiệt độ cao chúng ta nhận thấy rằng, ở biểu thức (19):

$$u(T) \to 0\,,\ v \to \frac{m\omega^2}{2}\,,\ g \to \beta\,,\ h \to \gamma,$$

biểu thức giả thế (18) sẽ có dạng trùng với dạng của thế trong dao động phi điều hòa :

$\phi = \frac{m\omega^2}{2}x^2 + \beta x^3 + \gamma x^4$, khi đó hàm phân bố (17) sẽ có dạng trùng với phân bố Boltzmann trong thống kê cổ điển [8].

3) Với biểu thức giả thế thu được chúng ta có thể tính các trị trung bình $\overline{x}$, $\overline{x^2}$, $\overline{x^3}$, $\overline{x^4}$. Điều đó cho phép xác định được hệ số nở nhiệt, thế tương tác cặp giữa các nguyên tử ứng với nhiệt độ bất kỳ.

Tôi xin cảm ơn giáo sư Nguyễn Hữu Minh về những nhận xét quý báu

Bài báo này được hoàn thành với sự giúp đỡ của đề tài : 3.1.10

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. W. Harrison : Pseudopotentials in the theory of Metals (Benjamin, NewYork, 1996).
2. P.E Norman : Pxêvdôpôtenxian v xtatixtichêxcôi termôdinamake dôcladư acadêmi nauk SSSR, T.242, N^0 3 (1978), 519 (tiếng Nga).
3. J.A.Moriarty : Phys. Rev. B8 (1973) 1338.
4. R.P.Bajpai, M.Ono, Yohno and T.Toya : phys. Rev. B12(1975) 2194.

5. D. Stroud and N.W. Asheroft : phys. Rev. B5 (1972) 371.
6. B.L.Holian, G.K.Straub, R.E.Swanson and D.C.Wallace: phys. Rev. B27 (1983) 2873.
7. Akira Sugiyama : pseudopotential theory for interionic interaction potential in metals at non-Zerotemperature. I.Elementary Derivation of. Asymptotic Expressions on Basis of Hilbert Transforms. Journal of the physical society of Janpan Vol. 71. No11, November, 1992, p. 4061 - 4084.
8. TS. Kitêl Vêdêniê v phyziku tviôrdôvô têla Maxcơva, il, 1963, 179 (tiếng Nga).

VNU. Journal of science. Nat. sci, t.XI, n^{0}3 - 1995

PSEUDO-POTENTIAL THEORY FOR THE ANHARMONIC LINEAR OSCILLATORS IN THE FIRST APPROXIMATION OF THE PERTURBATION THEORY.

Nguyen Thi Thanh Huong
Teacher's training College, VNU

The general expression of pseudopotential of the anharmonic linear oscillators has been calculated by the perturbation theory with the first approximation. Owing to this expression of pseudopotential we can calculate the distribution function of the anharmonic linear oscillators. It gives possibilities to study properties of this system with arbitrary temperatures.

In special case, at the hight temperature our result is in concordance with precedent theory [8].