

**PHƯƠNG PHÁP TOÁN TỬ FK
GIẢI PHƯƠNG TRÌNH SCHRÖDINGER
CHO ION H_2^+ HAI CHIỀU**

NGUYỄN THỊ HỒNG LANH*, HOÀNG ĐỖ NGỌC TRÂM**

TÓM TẮT

Phương pháp toán tử FK được sử dụng để xác định nghiệm của phương trình Schrödinger cho ion H_2^+ hai chiều. Đã thu được năng lượng của trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích thấp ứng với các khoảng cách liên hạt nhân khác nhau với độ chính xác là hai chữ số thập phân. Kết quả này cần thiết cho các phân tích để phát triển phương pháp.

Từ khóa: phương pháp toán tử FK, phương trình Schrödinger, năng lượng, ion phân tử hydro, hai chiều.

ABSTRACT

***The FK operator method for solving the Schrödinger equation
of two-dimensional molecular ion H_2^+***

The FK operator method is applied to the Schrödinger equation of the two-dimensional hydrogen molecule ion H_2^+ . We obtained the energies with the precision of two decimal places for the ground state and low excited states corresponding to various intermolecular distances. The result is essential for analysis to develop the method.

Keywords: operator method, Schrödinger equation, energy, hydrogen molecule ion, two-dimension.

1. Mở đầu

Với cấu trúc chỉ gồm hai hạt nhân và một electron, ion phân tử hydro H_2^+ là phân tử đơn giản nhất, do đó đây là đối tượng được quan tâm khi khởi đầu các nghiên cứu về phân tử [3]. Tuy được nghiên cứu từ nhiều thập kỉ trước, nhưng ion phân tử H_2^+ vẫn tiếp tục được quan tâm khi cần phát triển các phương pháp tính cho phân tử. Mặt khác, các nghiên cứu về phát xạ sóng điều hòa bậc cao, chụp ảnh nguyên tử, phân tử bằng xung laser là một hướng nghiên cứu thú vị trong thời gian gần đây. Để có thể áp dụng hiệu quả phương pháp thì dữ liệu đưa vào là hàm sóng ban đầu của nguyên tử, phân tử phải có độ chính xác cao. Trong hướng nghiên cứu này, hệ nhiều tâm là đối tượng mới để áp dụng phương pháp, trong đó H_2^+ là khởi đầu cho các phân tử phức tạp hơn sau

* ThS, Trường Đại học Sư phạm TPHCM; Email: honglanhsp@yahoo.com.vn

** TS, Trường Đại học Sư phạm TPHCM; Email: tramhdn@hcmup.edu.vn

này [7, 9]. Do đó, việc phát triển phương pháp để tìm được phổ năng lượng và hàm sóng có độ chính xác cao là cần thiết.

Việc giải quyết bài toán ion phân tử H_2^+ ba chiều không đơn giản do số bậc tự do lớn; vì vậy, trong các nghiên cứu về ion phân tử này, ngoài các nghiên cứu trực tiếp với hệ ba chiều, nhiều mô hình đơn giản hóa được sử dụng, trong đó phổ biến là mô hình ion phân tử H_2^+ phẳng trong không gian hai chiều [8]. Mặt khác, hệ lượng tử hai chiều cũng là một trong những chủ đề được quan tâm trong vật lý chất rắn do các hiệu ứng đặc biệt khi giảm số chiều. Đặc biệt, sự thành công trong việc tạo ra các hệ bán dẫn hai chiều trong thực tế như hệ bán dẫn đơn lớp TMDs (Transition Metal Dichalcogenides) đã thu hút sự chú ý của các nhà khoa học đối với các hệ hai chiều [6, 11]. Ngoài ra, trong bán dẫn hai chiều tồn tại sự liên kết giữa electron và lỗ trống và có thể hình thành giả hạt exciton dương (một electron liên kết với hai lỗ trống) có cấu trúc tương tự ion H_2^+ [10].

Phương pháp toán tử FK [2] là một trong những phương pháp tìm nghiệm số chính xác, bao gồm cả hàm sóng lẫn năng lượng, cho phương trình Schrödinger. Phương pháp đã được phát triển và thu được những kết quả khả quan cho hệ nguyên tử hai chiều [4, 5]. Đối với bài toán ion phân tử H_2^+ ba chiều, phương pháp cũng đã được sử dụng để tìm nghiệm số [1]. Trong công trình này, chúng tôi áp dụng phương pháp toán tử FK để tìm nghiệm số cho bài toán ion phân tử H_2^+ hai chiều. Mặc dù, bài toán với số chiều nhiều hơn đã được giải, nhưng qua phân tích cho thấy đối với bài toán ba chiều đã xét trong công trình [1], do tính đối xứng trụ, toán tử hình chiếu moment động lượng quỹ đạo lên trục đối xứng được bảo toàn, làm giảm số bậc tự do của hệ. Đối với bài toán hai chiều phẳng, tính chất này không được đảm bảo nên bài toán hai chiều đang xét không phải là trường hợp đơn giản hóa của hệ ba chiều đã giải. Đồng thời với các ứng dụng vật lý của hệ hai chiều đã nêu ở trên, việc khảo sát bài toán ion phân tử H_2^+ hai chiều là có ý nghĩa.

Tương tự như trong công trình [1], phương pháp toán tử FK được kết hợp với phép biến đổi Laplace để đưa toán tử tọa độ trong thành phần tương tác Coulomb ra khỏi mẫu số, đưa Hamiltonian về dạng thuận lợi cho biến đổi đại số. Việc phát triển phương pháp cho bài toán H_2^+ hai chiều là bước đệm cần thiết cho các nghiên cứu tiếp theo đối với các hệ phức tạp hơn cũng như trong trường hợp có trường ngoài.

Ngoài phần mở đầu, cấu trúc bài báo gồm ba phần chính: Phần đầu giới thiệu phương pháp toán tử FK và áp dụng cho bài toán ion H_2^+ hai chiều; phần thứ hai trình bày kết quả thu được và thảo luận; cuối cùng là phần kết luận và dự kiến phát triển của đề tài.

2. Phương pháp toán tử FK cho bài toán ion H_2^+ hai chiều

Phương trình Schrödinger của ion H_2^+ phẳng hai chiều khi xét đến gần đúng Born-Oppenheimer trong hệ đơn vị nguyên tử:

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle,$$

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) - \frac{Z_1}{\sqrt{y^2 + (x+R/2)^2}} - \frac{Z_2}{\sqrt{y^2 + (x-R/2)^2}} + \frac{Z_1 Z_2}{R}, \quad (1)$$

trong đó, Z_1, Z_2 là điện tích hạt nhân 1 và hạt nhân 2; hai hạt nhân nằm trên trục Ox với tọa độ lần lượt là $(-R/2, 0)$ và $(R/2, 0)$, R là khoảng cách giữa hai hạt nhân; tọa độ của electron là (x, y) . Ở đây, ta sử dụng hệ đơn vị nguyên tử: đơn vị năng lượng sẽ là năng lượng Hartree $E_H = me^4 / 4\hbar^2 \epsilon_0^2 = 2Ry = 27.2 \text{ eV}$, đơn vị độ dài là bán kính Bohr $a = \epsilon \hbar^2 / e^2 m = 0.53 \text{ \AA}$. Trong tính toán cụ thể cho ion H_2^+ , ta chọn $Z_1 = Z_2 = 1$.

Thành phần thế năng tương tác Coulomb trong Hamiltonian (1) chứa biến số tọa độ ở mẫu. Để thuận tiện cho việc đưa toán tử này về dạng chuẩn, ta dùng phép biến đổi Laplace:

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{t}} e^{-rt} dt. \quad (2)$$

Trong phần này, ta sử dụng phương pháp toán tử FK với bốn bước tương tự như trong công trình [1] để tìm nghiệm cho phương trình (1), được trình bày cụ thể dưới đây.

Bước 1. Đưa phương trình Schrödinger về biểu diễn đại số của các toán tử sinh hủy hai chiều

$$\hat{a}_1 = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(x + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad \hat{a}_1^+ = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(x - \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial x} \right),$$

$$\hat{a}_2 = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(y + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \hat{a}_2^+ = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(y - \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad (3)$$

trong đó, ω là tham số thực dương được đưa vào để điều chỉnh tốc độ hội tụ của bài toán. Các toán tử (3) thỏa hệ thức giao hoán:

$$[\hat{a}_j, \hat{a}_k^+] = \delta_{jk}, \quad [\hat{a}_j^+, \hat{a}_k^+] = 0, \quad [\hat{a}_j, \hat{a}_k] = 0. \quad (4)$$

Để tiện lợi trong tính toán và biểu diễn Hamiltonian của hệ dưới dạng chuẩn (toán tử sinh đứng trước toán tử hủy), ta sử dụng các toán tử $\hat{N}, \hat{M}^+, \hat{M}$:

$$\hat{N} = 2\hat{a}_1^+ \hat{a}_1 + 2\hat{a}_2^+ \hat{a}_2 + 2, \quad \hat{M}^+ = (\hat{a}_1^+)^2 + (\hat{a}_2^+)^2, \quad \hat{M} = \hat{a}_1^2 + \hat{a}_2^2. \quad (5)$$

Các toán tử (5) và \hat{a}_1, \hat{a}_1^+ tạo thành bộ đại số kín (giao hoán tử của hai toán tử bất kì đều được biểu diễn theo các toán tử trong bộ hoặc bằng không) với các biểu thức giao hoán:

$$\begin{aligned} [\hat{N}, \hat{M}^+] &= 4\hat{M}^+, & [\hat{N}, \hat{a}_1^+] &= 2\hat{a}_1^+, & [\hat{M}, \hat{N}] &= 4\hat{M}, \\ [\hat{M}, \hat{M}^+] &= 2\hat{N}, & [\hat{M}, \hat{a}_1^+] &= 2\hat{a}_1, & [\hat{a}_1, \hat{N}] &= 2\hat{a}_1, \\ [\hat{a}_1, \hat{M}^+] &= 2\hat{a}_1^+, & [\hat{a}_1, \hat{a}_1^+] &= 1, & [\hat{a}_1^+, \hat{M}^+] &= 0, & [\hat{a}_1, \hat{M}] &= 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Khi đó Hamiltonian được biểu diễn dưới dạng toán tử sinh hủy như sau:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\omega}{4}(\hat{M}^+ - \hat{N} + \hat{M}) \\ &\quad - \sum_{i=1,2} \frac{Z_i \sqrt{2\omega}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{e^{-t\alpha_i^2/4}}{\sqrt{t}} \exp\left[\frac{\alpha_i^2 t^2}{2(2t+1)}\right] \exp\left(\frac{-t}{2t+1} \hat{M}^+\right) \exp\left(\frac{\alpha_i t}{2t+1} \hat{a}_1^+\right) \\ &\quad \times (\sqrt{2t+1})^{-\hat{N}} \exp\left(\frac{\alpha_i t}{2t+1} \hat{a}_1\right) \exp\left(\frac{-t}{2t+1} \hat{M}\right) dt + \frac{Z_1 Z_2}{R}, \end{aligned} \quad (7)$$

với $\alpha_i = (-1)^i 2R_i \sqrt{2\omega}$ ($i=1,2$).

Bước 2. Tách Hamiltonian thành hai thành phần

Phần chính chỉ chứa các toán tử trung hòa, có nghiệm là dao động tử điều hòa:

$$\begin{aligned} \hat{H}^0 &= \frac{\omega}{4} \hat{N} + \frac{Z_1 Z_2}{R} - \sum_{i=1,2} \frac{Z_i \sqrt{2\omega}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{e^{-t\alpha_i^2/4}}{\sqrt{t}} \exp\left[\frac{\alpha_i^2 t^2}{2(2t+1)}\right] \\ &\quad \times \sum_{i_1=0}^{\infty} \sum_{i_2=0}^{\infty} \sum_{i_3=0}^{\infty} \sum_{i_4=0}^{\infty} \frac{(-1)^{2i_1+i_2+i_4} (\alpha_i)^{2i_2+2i_3-2i_4}}{i_1! i_2! i_3! (2i_2+i_3-2i_4)! i_4!} \left(\frac{t}{2t+1}\right)^{2i_1+3i_2+2i_3-i_4} \\ &\quad \times (\hat{a}_2^+)^{2i_1} (\hat{a}_1^+)^{2i_2+i_3} (\sqrt{2t+1})^{-\hat{N}} \hat{a}_1^{2i_2+i_3} \hat{a}_2^{2i_1} dt \\ &\quad (2i_2+i_3-2i_4 \geq 0), \end{aligned} \quad (8)$$

phần còn lại \hat{V} được xem là phần nhiễu loạn.

Việc tách Hamiltonian của hệ chỉ dựa vào hình thức của các toán tử, mà không dựa vào tính chất vật lý của bài toán như phương pháp lý thuyết nhiễu loạn. Vì vậy, phương pháp toán tử FK có thể áp dụng được cho các bài toán phi nhiễu loạn. Việc điều chỉnh tham số tự do trong các toán tử sinh hủy làm thay đổi giá trị của phần chính và phần nhiễu loạn, nhưng không làm thay đổi Hamiltonian toàn phần của hệ. Từ đó, việc lựa chọn giá trị của ω giúp điều chỉnh tốc độ hội tụ của bài toán.

Bước 3. Tìm nghiệm gần đúng bậc không

Nghiệm gần đúng bậc không là nghiệm của phần chính \hat{H}^0 :

$$\hat{H}_0 |\psi^{(0)}\rangle = E^{(0)} |\psi^{(0)}\rangle, \quad (9)$$

chính là nghiệm của dao động tử điều hòa hai chiều:

$$|n_1, n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2!}} (\hat{a}_1^+)^{n_1} (\hat{a}_2^+)^{n_2} |0\rangle, \quad (10)$$

trong đó, hàm chân không $|0\rangle$ được định nghĩa:

$$\hat{a}_1 |0\rangle = \hat{a}_2 |0\rangle = 0, \quad \langle 0|0\rangle = 1; \quad (11)$$

n_1, n_2 là các số lượng tử và $n_1, n_2 \in \mathbb{N}$.

Ta tính được năng lượng gần đúng bậc không:

$$\begin{aligned} E^{(0)} &= \frac{\omega}{2} (n_1 + n_2 + 1) + \frac{Z_1 Z_2}{R} - \sum_{i=1,2} \frac{Z_i \sqrt{2\omega}}{\sqrt{\pi}} \sum_{i_1=0}^{n_2/2} \sum_{i_2=0}^{n_1/2} \sum_{i_3=0}^{n_1/2} \sum_{i_4=\text{Max}(0, 2i_3-2i_2)}^{n_1-2i_2} \\ &\times \frac{(-1)^{2i_1+i_2+i_3} (\alpha_i)^{2i_2+2i_4-2i_3}}{i_1! i_2! i_3! i_4! (2i_2+i_4-2i_3)! (n_2-2i_1)! (n_1-2i_2-i_4)!} \frac{n_1! n_2!}{(2t+1)^{n_1+n_2+i_2+i_4-i_3+1}} \\ &\times \int_0^{+\infty} \exp\left[\frac{\alpha_i^2 t}{4(2t+1)}\right] \frac{t^{2i_1+3i_2+2i_4-i_3-1/2}}{(2t+1)^{n_1+n_2+i_2+i_4-i_3+1}} dt. \end{aligned} \quad (12)$$

Bước 4. Tính các bổ chính cho hàm sóng và năng lượng để xác định nghiệm số

Ta viết lại hàm sóng dưới dạng khai triển theo các hàm sóng cơ sở (10):

$$|\Psi_{n_1, n_2}\rangle = |\psi_{n_1, n_2}\rangle + \sum_{k_2=0}^{\infty} \sum_{k_1=0}^{\infty} C_{k_1, k_2} |\psi_{k_1, k_2}\rangle, \quad |k_1, k_2\rangle \neq |n_1, n_2\rangle. \quad (13)$$

Ta định nghĩa hàm sóng hội tụ đến giá trị chính xác ứng với bậc bổ chính (s) như sau:

$$|\Psi_{n_1, n_2}^{(s)}\rangle = |\psi_{n_1, n_2}\rangle + \sum_{k_2=0}^{n_2+s} \sum_{k_1=0}^{n_1+s} C_{k_1, k_2}^{(s)} |\psi_{k_1, k_2}\rangle, \quad |k_1, k_2\rangle \neq |n_1, n_2\rangle. \quad (14)$$

Sơ đồ vòng lặp xác định năng lượng và hàm sóng ở bậc bổ chính (s) được xây dựng:

$$\begin{cases} C_{j_1, j_2}^{(s+1)} = \frac{H_{j_1, j_2, n_1, n_2} + \sum_{k_2=0}^{n_2+s} \sum_{k_1=0}^{n_1+s} C_{k_1, k_2}^{(s)} V_{j_1, j_2, k_1, k_2}}{\left(E_{n_1, n_2}^{(s)} - H_{j_1, j_2, j_1, j_2}\right)}, \\ E_{n_1, n_2}^{(s)} = E_{n_1, n_2}^{(0)} + \sum_{k_2=0}^{n_2+s} \sum_{k_1=0}^{n_1+s} C_{k_1, k_2}^{(s)} V_{n_1, n_2, k_1, k_2}. \end{cases} \quad (15)$$

trong đó, $C_{j_1, j_2}^{(0)} = \delta_{j_1, n_1} \delta_{j_2, n_2}$ và $C_{n_1, n_2}^{(s)} = 1$. Các phần tử ma trận được xác định bằng các biến đổi đại số như sau:

$$\begin{aligned} H_{n_1, n_2} &= \langle n_1, n_2 | \hat{H}^0 | n_1, n_2 \rangle, \\ H_{n_1, n_2} &= \langle n_1', n_2' | \hat{V} | n_1, n_2 \rangle. \end{aligned} \quad (16)$$

Sau khi tính toán, ta thu được các phần tử ma trận:

$$\begin{aligned} H_{n_1, n_2} &= \frac{\omega}{2}(n_1 + n_2 + 1) + \frac{Z_1 Z_2}{R} \\ &- \sum_{i=1,2} \frac{Z_i \sqrt{2\omega}}{\sqrt{\pi}} \sum_{i_1=0}^{n_2/2} \sum_{i_2=0}^{n_1/2} \sum_{i_3=0}^{n_1/2} \sum_{i_4=\text{Max}(0, 2i_3-2i_2)}^{n_1-2i_2} \frac{(-1)^{2i_1+i_2+i_3} (\alpha_i)^{2i_2+2i_4-2i_3}}{i_1! i_2! i_3! i_4! (2i_2+i_4-2i_3)} \\ &\times \frac{n_1! n_2!}{(n_2-2i_1)!(n_1-2i_2-i_4)!} \int_0^{+\infty} \exp\left[-\frac{\alpha_i^2 t}{4(2t+1)}\right] \frac{t^{2i_1+3i_2+2i_4-i_3-1/2}}{(2t+1)^{n_1+n_2+i_2+i_4-i_3+1}} dt, \\ H_{n_1, n_2} &= \left(\frac{(-1)^{sn_2} + 1}{2} \right) \times \\ &\left\{ \begin{aligned} &-\frac{\omega}{4} \left[\sqrt{(n_1+1)(n_1+2)} \delta_{n_1', n_1+2} + \sqrt{(n_2+1)(n_2+2)} \delta_{n_2', n_2+2} \right. \\ &\left. + \sqrt{n_1(n_1-1)} \delta_{n_1', n_1-2} + \sqrt{n_2(n_2-1)} \delta_{n_2', n_2-2} \right] \\ &- \sum_{i=1,2} \frac{Z_i \sqrt{2\omega}}{\sqrt{\pi}} \sum_{i_1=0}^{(n_1+sn_1)/2} \sum_{i_2=0}^{n_1/2} \sum_{i_3=\text{Max}(0, -sn_1+2i_1-2i_2)}^{n_1-2i_2} \sum_{i_4=\text{Max}(0, -sn_2/2)}^{n_2/2} \\ &\frac{(-1)^{sn_2/2+2i_4+i_2} (\alpha_i)^{sn_1-2i_1+2i_2+2i_3}}{\sqrt{(n_2+sn_2)!(n_1+sn_1)! n_1! n_2!}} \\ &\frac{i_1! i_3! i_2! i_4! (sn_2/2+i_4)!(sn_1-2i_1+2i_2+i_3)!}{(n_1-2i_2-i_3)!(n_2-2i_4)!} \\ &\times \int_0^{+\infty} \exp\left[-\frac{\alpha_i^2 t}{4(2t+1)}\right] \frac{t^{sn_2/2+sn_1-i_1+2i_3+3i_2+2i_4-1/2}}{(2t+1)^{n_1+n_2+sn_2/2+sn_1-i_1+i_3+i_2+1}} dt \end{aligned} \right\}. \quad (17) \end{aligned}$$

Các phần tử ma trận thỏa tính chất đối xứng: $V_{n_1, n_2} = V_{n_1', n_2'} = V_{n_1, n_2'} = V_{n_1', n_2}$.

3. Kết quả và phân tích

Chúng tôi đã xây dựng được chương trình tính toán dựa trên ngôn ngữ FORTRAN 90, kết quả thu được năng lượng gần đúng của ion phân tử H_2^+ hai chiều ở trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích thấp. Bảng 1 thể hiện kết quả năng lượng liên kết của electron trong ion phân tử H_2^+ , không kể số hạng $Z_1 Z_2 / R$ để tiện so sánh với kết quả trong công trình [7]. Kết quả cho thấy, có sự trùng khớp với kết quả thu được

trong công trình [7], chúng tôi phương pháp toán tử FK có thể sử dụng cho bài toán này. Tuy nhiên, ta thấy rằng độ chính xác của nghiệm thu được là từ một đến hai chữ số thập phân là không cao. Qua kết quả này, ta có thể chỉ ra một số nguyên nhân để từ đó có thể phát triển phương pháp. Thứ nhất, kết quả thu được tương ứng với số vòng lặp là $s = 60$, dựa vào bảng ta thấy nghiệm đang hội tụ dần về kết quả chính xác hơn theo công trình [7], có thể dự đoán nếu tăng số vòng lặp hơn nữa thì kết quả sẽ có độ chính xác cao hơn. Tuy nhiên, để có thể tăng số vòng lặp, cần có sự nhiều cải tiến trong chương trình tính toán để tiết kiệm tài nguyên. Thứ hai, về mặt phương pháp, ta thấy bài toán đang xét là bài toán nguyên tử trong khi bộ hàm sóng được khai triển theo hàm sóng của dao động tử điều hòa. Để khắc phục điều này, có hai hướng cải tiến có thể sử dụng là nhân thêm thành phần e mũ của hàm sóng nguyên tử vào hàm sóng đang xét, hoặc sử dụng phép biến đổi Levi-Civita để đưa bài toán về dạng dao động tử phi điều hòa – khi đó bộ hàm sóng cơ sở về hình thức là hàm riêng của dao động tử điều hòa nhưng bản chất là bộ hàm Coulomb. Mặt khác, phương pháp toán tử FK cũng cho phép thu hàm sóng của hệ thông qua các hệ số khai triển $C_{ij}^{(s)}$ từ hệ thức (15). Việc áp dụng phương pháp toán tử FK cho bài toán ion phân tử H_2^+ không phụ thuộc vào giá trị Z_1, Z_2 cũng như khoảng cách liên hạt nhân R nên có thể sử dụng cho các bài toán một điện tử liên kết với hai hạt nhân không đối xứng $Z_1 \neq Z_2$, ví dụ bài toán ion HeH^{2+} .

Bảng 1. Năng lượng liên kết của electron trong ion phân tử H_2^+ hai chiều ứng với trạng thái cơ bản $n_1 = n_2 = 0$ và trạng thái kích thích $n_1 = 1, n_2 = 0$ với khoảng cách liên hạt nhân khác nhau

Vòng lặp	$n_1 = n_2 = 0$ $R = 0.1 \text{ a.u.}$	$n_1 = n_2 = 0$ $R = 1.0 \text{ a.u.}$	$n_1 = 1, n_2 = 0$ $R = 0.1 \text{ a.u.}$
0	-5.452496152182728	-0.133643042677192	-0.786171718401323
5	-6.869079842360637	-3.183731241571831	-0.849820569086812
10	-7.134582035025815	-3.446164782158334	-0.875794523843851
15	-7.189032289991462	-3.483209486651852	-0.883323233366193
20	-7.219042792430178	-3.505930141330892	-0.888999572608477
25	-7.226687893779113	-3.512076507084016	-0.891117809601075
30	-7.233582871263082	-3.515815245345216	-0.893156489904430
35	-7.237053372924140	-3.519490795890641	-0.894075097064164
40	-7.241234581744969	-3.522933314005299	-0.895063480529541
45	-7.243592634526935	-3.523733802423030	-0.895550120251380
50	-7.246763509163307	-3.525308987475544	-0.896110790324210
55	-7.248707469103446	-3.526747481681508	-0.896403574758659
60	-7.251413298210454	-3.528270990171724	-0.896748417640714
Công trình [7]	- 7.292183886382096	- 3.543666987253950	- 0.899094129617362

4. Kết luận

Trong bài báo này, phương pháp toán tử FK kết hợp với phép biến đổi Laplace đã được sử dụng để tìm nghiệm số cho bài toán ion phân tử H_2^+ hai chiều. Chúng tôi thu được năng lượng cho trạng thái cơ bản và kích thích thấp với độ chính xác là hai chữ số thập phân. Kết quả này cho thấy phương pháp toán tử FK có thể áp dụng được cho các bài toán hệ nhiều tâm; tuy nhiên, để nghiệm thu được có độ chính xác cao hơn, cần có sự cải tiến. Các kết quả này cũng chính là cơ sở phân tích để có thể phát triển phương pháp toán tử FK. Chúng tôi nhận thấy rằng, việc sử dụng bộ hàm sóng cơ sở là hàm sóng của dao động điều hòa trong khi phương trình Schrödinger đang giải là phương trình cho nguyên tử chính là hạn chế. Do đó, chúng tôi cũng đề xuất hướng cải tiến bằng cách xét thành phần tiệm cận e mũ của hàm sóng nguyên tử hydro hoặc có thể sử dụng phép biến đổi Levi-Civita để đưa bài toán về bài toán dao động tử phi điều hòa.

Ghi chú: Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ phát triển Khoa học và Công nghệ Quốc gia (NAFOSTED) trong đề tài mã số 103.01-2014.44 và bởi Trường Đại học Sư phạm TP HCM trong đề tài cấp cơ sở năm 2015, mã số CS2015.19.69.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Nguyễn Thị Hồng Lanh, Cao Hồ Thanh Xuân, Hoàng Văn Hưng, Hoàng Đỗ Ngọc Trâm (2015), “Phương pháp toán tử FK giải phương trình Schrödinger cho ion H_2^+ ”, *Tạp chí khoa học Trường ĐHSP TP HCM*, Số **12**, tr. 67-74.
2. Feranchuk, I. D., Ivanov, A., Le, Van-Hoang & Ulyanhenkov, A. (2015), *Non-Perturbative Description of Quantum Systems*, Springer – Switzerland.
3. Hai-Xiang He, Rui-Feng Lu, Pei-Yu Zhang, Ke-Li Han & Guo-Zhong He (2012), “Dissociation and ionization competing processes for H_2^+ in intense laser field: Which one is larger?”, *J. Chem. Phys.* **136**, pp. 024311-6.
4. Hoang-Do Ngoc-Tram, Hoang Van-Hung and Le Van-Hoang (2013), “Analytical solutions of the Schrödinger equation for a two-dimensional exciton in magnetic field of arbitrary strength”, *J. Math. Phys.* **54**, pp. 052105-10.
5. Hoang-Do Ngoc-Tram, Pham Dang-Lan and Le Van-Hoang (2013), “Exact numerical solutions of the Schrödinger equation for a two-dimensional exciton in a constant magnetic field of arbitrary strength”, *Physica B* **423**, pp. 31-37.
6. Mak, K. F. & Shan, J. (2016), “Photonics and optoelectrics of 2D semiconductor transition metal dichalcogenides”, *Nature Photonics* **10**, pp. 216-226.
7. Ning Qi-Cheng, Peng Liang-You, Hou Xue-Feng, Xu Zhen & Gong Qihuang (2012), Application of discrete variable representation to planar H_2^+ in strong xuv laser fields, *J. Chem. Phys.* **137**, pp. 094101-11.

8. Patil, S. H. (2003), "Hydrogen molecular ion and molecule in two dimensions", *J. Chem. Phys.* **118**, pp. 2197-2205.
9. Picón, A., Bahabad, A., Kapteyn, H. C., Murnane, M. M., & Becker A. (2011), "Two-center interferences in photoionization of a dissociating H_2^+ molecule", *Phys. Rev. A* **83**, pp. 013414-9.
10. Singh, A. *et al.* (2016), "Trion formation dynamics in monolayer transition metal dichalcogenides", *Phys. Rev. B* **93**, pp. 041401-5.
11. Xia F., Wang H., Xiao D., Dubey M., and Ramasubramaniam A. (2014), "Two-dimensional material nanophotonics", *Nature Photonics* **8**, pp. 899-907.

(Ngày Tòa soạn nhận được bài: 11-10-2016; ngày phản biện đánh giá: 27-10-2016;
ngày chấp nhận đăng: 16-12-2016)