

## ✓ PHƯƠNG PHÁP TOÁN TỬ FK GIẢI PHƯƠNG TRÌNH SCHRÖDINGER CHO ION $H_2^+$

NGUYỄN THỊ HỒNG LANH\*, CAO HỒ THANH XUÂN\*\*,  
HOÀNG VĂN HƯNG\*\*\*, HOÀNG ĐỖ NGỌC TRÂM\*\*\*\*

### TÓM TẮT

*Phương pháp toán tử FK được sử dụng để giải phương trình Schrödinger cho ion phân tử hydro  $H_2^+$ . Kết quả thu được là các mức năng lượng ở trạng thái cơ bản 1s và trạng thái kích thích đầu tiên 2s với sai số dưới 0,03%. Mặc dù các tính toán cụ thể được thực hiện cho  $H_2^+$ , nhưng nguyên tắc và quy trình tính toán có thể áp dụng cho các ion phân tử tương tự nhưng không đối xứng.*

**Từ khóa:** phương pháp toán tử FK, phương trình Schrödinger, năng lượng, ion phân tử hydro  $H_2^+$ .

### ABSTRACT

*The FK operator method for solving the Schrödinger equation of ion  $H_2^+$*

*The FK operator method is used for solving the Schrödinger equation of the hydrogen molecule ion  $H_2^+$ . We obtained energy for the ground state 1s and the first excited states 2s with error less than 0.03%. Although in the paper, calculations are carried out for  $H_2^+$ , the method can be applied similarly to other molecules without symmetry.*

**Keywords:** operator method, Schrödinger equation, energy, hydrogen molecule ion  $H_2^+$ .

### 1. Mở đầu

Ion phân tử hydro  $H_2^+$  là phân tử đơn giản, được tạo thành từ hai hạt nhân hydro và một electron. Nó đã được nghiên cứu vào những ngày đầu của cơ học lượng tử [9, 10] và vẫn nhận được nhiều sự quan tâm đến hiện nay [3, 4, 7]. Việc xác định hàm sóng của ion phân tử  $H_2^+$  với độ chính xác cao cung cấp dữ kiện đầu vào chính xác cho các nghiên cứu về phát xạ sóng điều hòa bậc cao, chụp ảnh nguyên tử, phân tử bằng

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

\*\* ThS, Trường Cao đẳng Nông nghiệp Nam Bộ

\*\*\* ThS, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

\*\*\*\* TS, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

xung laser [4]. Ngoài ra việc mô tả chính xác ion cung cấp những thông tin cần thiết đối với các nghiên cứu quang phổ của sao neutron trong thiên văn học [8]. Mặt khác, đây cũng là bài toán cơ bản dùng để kiểm tra tính hiệu quả của các phương pháp giải phương trình Schrödinger cho các bài toán hệ nguyên tử nhiều tâm do sự đơn giản của nó và đã được áp dụng bởi nhiều phương pháp khác nhau: phương pháp GPS (generalized pseudospectral method) với độ chính xác 11 chữ số thập phân, phương pháp FC (free-complement method) với độ chính xác 18 chữ số thập phân. [3, 4]

Trong công trình này, chúng tôi áp dụng phương pháp toán tử FK [5] để giải phương trình Schrödinger cho ion phân tử hydro  $H_2^+$ . Phương pháp này đã được áp dụng thành công cho các bài toán nguyên tử, phân tử, đặc biệt là bài toán hệ nguyên tử hai chiều, cho phép thu được năng lượng và hàm sóng chính xác [6]. Đối với bài toán ba chiều, phương pháp cũng đã áp dụng bước đầu để xác định nghiệm số cho bài toán nguyên tử hydro, trong đó có sử dụng 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, và xây dựng hàm sóng cơ sở cho bài toán hệ nguyên tử ba chiều [1, 2]. Việc áp dụng phương pháp toán tử FK cho bài toán ion  $H_2^+$  là một bước phát triển phương pháp và cũng là bước đầu để nghiên cứu bài toán phức tạp hơn và chưa có nghiệm với chính xác cao là ion  $H_2^+$  trong trường ngoài với cường độ bất kì.

Cấu trúc bài báo gồm có ba phần chính: phần thứ nhất giới thiệu phương pháp toán tử FK và áp dụng cho bài toán ion  $H_2^+$ ; 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 $H_2^+$

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

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

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{Z_1}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z - R_1)^2}} - \frac{Z_2}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z + R_2)^2}} + \frac{Z_1 Z_2}{R}, \quad (1)$$

trong đó  $Z_1, Z_2$  là điện tích hạt nhân 1 và hạt nhân 2;  $R_1, R_2$  lần lượt là khoảng cách giữa electron với hai hạt nhân;  $R$  là khoảng cách giữa hai hạt nhân. 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  $a = \epsilon \hbar^2 / e^2 m = 0.53 \text{ \AA}$ .

Tiếp theo, chúng tôi áp dụng phương pháp toán tử FK kết hợp với phép biến đổi Laplace đã được đưa ra trong [1, 2]. Quy trình này gồm bốn bước cơ bản: (1) Sử dụng các toán tử sinh hủy ba chiều và phép biến đổi Laplace để viết lại phương trình

Schrödinger trong biểu diễn đại số; (2) Tách Hamiltonian thành hai phần như lý thuyết nhiễu loạn, trong đó phần chính chỉ chứa các toán tử trung hòa (các toán tử chứa số toán tử sinh bằng số toán tử hủy), có nghiệm là dao động tử điều hòa, phần còn lại được xem là nhiễu loạn; (3) Xây dựng bộ hàm sóng cơ sở là nghiệm riêng chung của dao động tử điều hòa và toán tử hình chiếu moment quỹ đạo lên trục z do hệ vật lý có tính đối xứng trụ. Từ đó, xác định nghiệm chính xác bậc không (nghiệm riêng của phần chính). Chú ý rằng trong các toán tử sinh-hủy, ta có đưa thêm tham số tự do  $\omega$  vào. Hamiltonian của bài toán không phụ thuộc vào giá trị tham số này, chỉ có các thành phần tách ra phụ thuộc vào  $\omega$ . Do đó việc chọn giá trị  $\omega$  phù hợp sẽ giúp thu được nghiệm chính xác bậc không với độ chính xác cao; (4) Sử dụng các sơ đồ của lý thuyết nhiễu loạn để tìm nghiệm số chính xác cho bài toán. Các kết quả cụ thể trong quá trình tính toán được mô tả như dưới đây:

Hamiltonian trong biểu diễn đại số có dạng như sau:

$$\hat{H} = -\frac{\omega}{4}(\hat{M}^+ - \hat{N} + \hat{M}) + \frac{Z_1 Z_2}{R} - \frac{\sqrt{2\omega}}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1,2} Z_j \int_0^{+\infty} dt \frac{e^{-t\alpha_j^2/4}}{\sqrt{t}} \exp\left[\frac{\alpha_j^2 t^2}{2(2t+1)}\right] \quad (2)$$

$$\times \sum_{i_1=0}^{\infty} \sum_{i_2=0}^{\infty} \sum_{i_3=0}^{\infty} \sum_{i_4=0}^{\infty} \frac{\alpha_j^{i_2+i_4}}{i_1! i_2! i_3! i_4!} \left(\frac{-t}{2t+1}\right)^{i_1+i_4} (\hat{M}^+)^{i_1} (\hat{a}_3^+)^{i_2} (\sqrt{2t+1})^{-i_3} (\hat{a}_3)^{i_4} (\hat{M})^{i_4},$$

trong đó  $\alpha_j = (-1)^j 2R_j \sqrt{2\omega}$  ( $j = 1, 2$ ) và  $\hat{N} = 2\hat{a}_1^+ \hat{a}_1 + 3$ ,  $\hat{M}^+ = (\hat{a}_1^+)^2$ ,  $\hat{M} = \hat{a}_1^2$  là tổ hợp của các toán tử sinh hủy ba chiều:

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

với  $j = 1, 2, 3$  tương ứng với ba trục  $Ox$ ,  $Oy$ ,  $Oz$ ;  $\omega$  là tham số thực dương được đưa vào nhằm hiệu chỉnh tốc độ hội tụ của bài toán. Các toán tử này thỏa các hệ thức giao hoán:

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

Do đó,  $\hat{N}$ ,  $\hat{M}^+$ ,  $\hat{M}$  cũng tạo thành một đại số kín với các hệ thức giao hoán:

$$\begin{aligned} [\hat{N}, \hat{M}^+] &= 4\hat{M}^+, & [\hat{M}, \hat{M}^+] &= 2\hat{N}, & [\hat{M}, \hat{N}] &= 4\hat{M}, \\ [\hat{M}, \hat{a}_3^+] &= 2\hat{a}_3, & [\hat{a}_3, \hat{M}^+] &= 2\hat{a}_3^+, & [\hat{a}_3, \hat{N}] &= 2\hat{a}_3, & [\hat{N}, \hat{a}_3^+] &= 2\hat{a}_3^+. \end{aligned} \quad (6)$$

Các biểu thức giao hoán (4) và (6) chính là cơ sở cho các tính toán đại số.

Phần chính và phần nhiễu loạn của Hamiltonian có biểu thức như sau:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \frac{\omega}{4} \hat{N} + \frac{Z_1 Z_2}{R} \\ &\quad - \frac{\sqrt{2\omega}}{\sqrt{\pi}} Z_1 \sum_{i=1,2} \int_0^{+\infty} dt \frac{e^{-i\alpha_i^2/4}}{\sqrt{t}} \exp\left[\frac{\alpha_i^2 t^2}{2(2t+1)}\right] \sum_{i_1=0}^{\infty} \sum_{i_2=0}^{\infty} \sum_{i_3=0}^{\infty} \frac{\alpha_i^{i_2+i_3}}{i_1! i_2! i_3! (i_1+i_2-i_3)!} \\ &\quad \times \left(\frac{-t}{2t+1}\right)^{2i_1+i_2-i_3} (\hat{M}^+)^{i_1} (\hat{a}_3^+)^{i_2} (\sqrt{2t+1})^{-\hat{N}_{i_2}} (\hat{a}_3)^{i_3} (\hat{M})^{i_1+i_2-i_3}, \\ \hat{V} &= -\frac{\omega}{4} (\hat{M}^+ + \hat{M}) \\ &\quad - \frac{\sqrt{2\omega}}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=1,2} Z_i \int_0^{+\infty} dt \frac{e^{-i\alpha_i^2/4}}{\sqrt{t}} \exp\left[\frac{\alpha_i^2 t^2}{2(2t+1)}\right] \sum_{i_1=0}^{\infty} \sum_{i_2=0}^{\infty} \sum_{i_3=0}^{\infty} \sum_{i_4=0}^{\infty} \frac{\alpha_i^{i_2+i_3}}{i_1! i_2! i_3! i_4!} \\ &\quad \times \left(\frac{-t}{2t+1}\right)^{i_1+i_2} (\hat{M}^+)^{i_1} (\hat{a}_3^+)^{i_2} (\sqrt{2t+1})^{-\hat{N}_{i_2}} (\hat{a}_3)^{i_3} (\hat{M})^{i_4}. \end{aligned} \tag{7}$$

Bộ hàm sóng cơ sở được xây dựng có dạng:

$$|n, j, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n-2j-|m|)! j!(j+|m|)!}} (\hat{u}_1^+)^{|m|} (\hat{u}_2^+)^j (\hat{u}_3^+)^{n-2j-|m|} |0\rangle, \tag{8}$$

với  $n$  là số lượng tử chính ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ),  $m$  là số lượng tử từ ( $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm n$ ),  $j$  là số tự nhiên ( $j = 0, 1, 2, \dots, \left[\frac{n-|m|}{2}\right]$ ), các toán tử  $\hat{u}_1, \hat{u}_2, \hat{u}_3$  là tổ hợp của các toán tử sinh

hủy (3), được đưa ra để chéo hóa hình chiếu moment động lượng lên trục Oz:

$$\begin{aligned} \hat{L}_z &= -i \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = i (\hat{a}_2^+ \hat{a}_1 - \hat{a}_1^+ \hat{a}_2): \\ \hat{u}_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_1 - i\hat{a}_2), \quad \hat{u}_1^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_1^+ + i\hat{a}_2^+), \\ \hat{u}_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_1 + i\hat{a}_2), \quad \hat{u}_2^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_1^+ - i\hat{a}_2^+), \\ \hat{u}_3 &= \hat{a}_3, \quad \hat{u}_3^+ = \hat{a}_3^+. \end{aligned} \tag{9}$$

Khi đó, ta thu được năng lượng gần đúng bậc không là nghiệm của phương trình:

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

như sau:

$$\begin{aligned}
 E_{n,j,m}^{(0)} &= \frac{\omega}{4}(2n+3) + \frac{Z_1 Z_2}{R} - \frac{\sqrt{2\omega}}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=1,2} Z_i \sum_{h=0}^j \frac{2^{2j-2h}}{(j-h)!(j-h)!(h+m)!h!} \\
 &\times \sum_{r=0}^{M(n-2j-m-2q)} \sum_{p=0}^{(n-2j-m)2(n-2j-m)/2} \sum_{q=0}^{(n-2j-m)2(n-2j-m)/2} \frac{(-1)^{p+q} (\alpha_i)^{2n-4j-2q-2p-2m-2r} (n-2j-m)!}{p!q!r!(n-2j-m-2p-r)!(n-2j-m-2q-r)!} \\
 &\times \int_0^{+\infty} \exp\left[\frac{-\alpha_i^2 t^2}{4(2t+1)}\right] \frac{t^{2n-2j-q-p-2m-2h-2r-1/2}}{(2t+1)^{2n-2j-p-q-m-r+3/2}} dt. \tag{10}
 \end{aligned}$$

và các yếu tố ma trận của Hamiltonian:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{n,n'}^{j,j'} &= -\frac{\omega}{4} \left[ 2\sqrt{(j+m+1)(j+1)}\delta_{n,n'-2}\delta_{j+1,j'} + \sqrt{(n-2j-m+1)(n-2j-m+2)}\delta_{n+2,n'}\delta_{j,j'} \right] \\
 &+ \left[ \frac{\omega}{4}(2n+3) + \frac{Z_1 Z_2}{R} \right] \delta_{n,n'}\delta_{j,j'} \\
 &- \frac{\sqrt{2\omega}}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=1,2} Z_i \sum_{h=0}^{M(n,j,j')} \frac{(-1)^{j+j'-2h} 2^{j+j'-2h} \sqrt{(j+m)!j!(j+m)!j!}}{(j'-h)!(j-h)!(h+m)!h!} \\
 &\times \sum_{r=0}^{M(n-2j-m-2q)} \sum_{p=0}^{(n'-2j'-m)2(n'-2j'-m)/2} \sum_{q=0}^{(n'-2j'-m)2(n'-2j'-m)/2} \frac{(-1)^{p+q} (\alpha_i)^{n-2j-2q+n'-2j'-2p-2m-2r} \sqrt{(n'-2j'-m)!(n-2j-m)!}}{p!q!r!(n'-2j'-m-2p-r)!(n-2j-m-2q-r)!} \\
 &\times \int_0^{+\infty} \exp\left[\frac{-\alpha_i^2 t^2}{4(2t+1)}\right] \frac{t^{n-j-q+n'-j'-p-2m-2h-2r-1/2}}{(2t+1)^{n-j-p+n'-j'-q-m-r+3/2}} dt. \tag{11}
 \end{aligned}$$

Để xác định nghiệm số chính xác, ta sử dụng sơ đồ tính bổ chính bậc cao của phương pháp lý thuyết nhiễu loạn. Hàm sóng gần đúng ở vòng lặp thứ (s) được xác định như sau:

$$|\Psi_{n_j}^{(s)}\rangle = |n_j\rangle + \sum_{\substack{n'=0 \\ n' \neq n}}^{n+s} \sum_{\substack{j'=0 \\ j' \neq j}}^{j+s} C_{n'j'}^{(s)} |n'j'\rangle, \quad (|n_j\rangle \neq |n'j'\rangle) \tag{12}$$

và sơ đồ vòng lặp được sử dụng để tìm nghiệm chính xác có biểu thức là:

$$\begin{cases} E_{n_j}^{(s)} = H_{n_j} + \sum_{n'=0}^{n+s} \sum_{j'=0}^{j+s} C_{n'j'}^{(s)} \\ C_{n'j'}^{(s+1)} = \frac{V_{nn'} + \sum_{n''=0}^{n+s} \sum_{j''=0}^{j+s} C_{n''j''}^{(s)} V_{n''m'}}{E_{n_j}^{(s)} - H_{n'j'}} \end{cases} \quad (|n_j\rangle \neq |n'j'\rangle, |n''j''\rangle \neq |n'j'\rangle ; C_{n_j} = 1). \tag{13}$$

### 3. Kết quả và phân tích

Sơ đồ vòng lặp và ngôn ngữ lập trình FORTRAN 90 được sử dụng, ta thu được các mức năng lượng và hàm sóng của ion  $H_2^+$ . Tham số tự do  $\omega$  được xác định theo

điều kiện  $\partial E^{(0)}/\partial\omega = 0$  đã được thảo luận trong [6]. Tuy nhiên, khi sử dụng  $\omega_0$  từ điều kiện này tốc độ hội tụ của bài toán chưa cao, do đó giá trị  $\omega$  được thay đổi quanh  $\omega_0$  sao cho tốc độ hội tụ của bài toán là tối ưu. Trong bài báo này, để tiện lợi trong quá trình so sánh kết quả với các công trình trước đây, khoảng cách liên hạt nhân được chọn có giá trị  $R = 2a.u.$ . Quy trình tìm nghiệm cho bài toán ion  $H_2^+$  bằng phương pháp toán tử FK không phụ thuộc vào giá trị cụ thể của  $Z_1, Z_2$  và khoảng cách liên hạt nhân  $R$ . Do đó, các tính toán trong bài báo này có thể được sử dụng để giải bài toán một điện tử liên kết với hai hạt nhân không đối xứng  $Z_1 \neq Z_2$ .

Năng lượng của ion  $H_2^+$  ở các trạng thái khác nhau được trình bày trong bảng 1. Ngoài ra, phương pháp toán tử FK còn cho phép thu được cả hàm sóng của hệ thông qua các hệ số khai triển  $C_{kj}^{(s)}$ .

**Bảng 1.** Năng lượng của ion  $H_2^+$  ở trạng thái cơ bản  $1s$  với  $\omega = 3.0$  và trạng thái kích thích thứ nhất  $2s$  với  $\omega = 1.5$  ứng với các vòng lặp khác nhau

Trạng thái Vòng lặp (s)	Cơ bản	Kích thích thứ nhất
30	-1.102109360407	-0.666536876883
40	-1.102377865935	-0.667017728455
50	-1.102462856339	-0.667131242217
60	-1.102514363103	-0.667238892288
70	-1.102535250406	-0.667308997383
80	-1.102554817426	-0.667331211756
90	-1.102568081645	-0.667368812417
Công trình [4]	-1.102634214495	-0.667534392202
Sai số	0.000059977	0.000248047

Kết quả năng lượng ở trạng thái cơ bản và kích thích thứ nhất trùng ba chữ số thập phân và có sai số nhỏ hơn 0,03% so với kết quả được đưa ra trong công trình [4]. Kết quả cho các trạng thái kích thích cao hơn có sai số lớn hơn và tốc độ hội tụ chậm hơn. Ví dụ, năng lượng thu được cho trạng thái kích thích thứ hai ( $n = j = 0, m = 1$ ) ở vòng lặp thứ 60 là -0.428349675112, sai số so với kết quả công trình [4] là 0,1%. Độ chính xác này chưa cao so với các phương pháp khác. Có thể xác định nguyên nhân là do bộ hàm sóng cơ sở đang sử dụng là nghiệm của dao động tử điều hòa trong khi đây là bài toán cho nguyên tử. Do đó, trong các bước phát triển tiếp theo, cần có những cải tiến để thu được nghiệm chính xác hơn.

#### 4. Kết luận

Trong bài báo này, phương pháp toán tử FK kết hợp với phép biến đổi Laplace đã được áp dụng để tìm nghiệm của phương trình Schrödinger cho bài toán ion  $H_2^+$ . Kết quả thu được cả năng lượng và hàm sóng cho ion  $H_2^+$  với sai số dưới 0,03%. Điều đó chứng tỏ rằng phương pháp toán tử FK với phép biến đổi Laplace có thể áp dụng được cho các bài toán hệ nhiều tâm. Tuy nhiên, để khai thác hết tiềm năng của phương pháp và thu được kết quả có ý nghĩa về độ chính xác như trường hợp bài toán exciton trung hòa cần có sự cải tiến. 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 đưa thành phần tiệm cận  $e^{-\mu r}$  của hàm sóng nguyên tử hydro vào hàm sóng của ion  $H_2^+$ .

---

*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 103.01-2013.38 và bởi Trường Đại học Sư phạm TPHCM trong đề tài cấp cơ sở năm 2015, mã số CS2015.19.69.*

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Bùi Nguyễn Ngọc Thúy, Nguyễn Đình Luật, Nguyễn Văn Hoa, Cao Hồ Thanh Xuân, Lê Văn Hoàng (2012), "Phương pháp toán tử FK giải phương trình Schrodinger cho nguyên tử hydro", *Tạp chí Khoa học Trường Đại học Sư phạm TPHCM*, (36), tr.103-111.
2. Lý Duy Nhất, Huỳnh Nguyễn Thanh Trúc, Nguyễn Văn Hoa, Nguyễn Phương Duy Anh, Lê Văn Hoàng (2012), "Phương pháp toán tử FK cho bài toán nguyên tử hydro trong từ trường", *Tạp chí Khoa học Trường Đại học Sư phạm TPHCM*, (40), tr. 56-62.
3. Atsushi I., Hiroyuki N., Hiroshi N. (2012), "Accurate solutions of the Schrödinger and Dirac equations of  $H_2^+$ ,  $HD^+$  and  $HT^+$ : With and without Born-Oppenheimer approximation and under magnetic field", *Chem. Phys.* **401**, p. 62-72.
4. Dmitry A. T., Shih-I Ch. (2007), "Ab initio study of the orientation effects in multiphoton ionization and high-order harmonic generation from the ground and excited electronic states of  $H_2^+$ ", *Phys. Rev. A* **76**, p. 043412.
5. Feranchuk I. D., Komarov L. I. (1982), "The operator method of approximate solution of the Schrödinger equation", *Phys. Lett. A* **88**, p. 212-214.
6. Hoang-Do Ngoc-Tram, Dang-Lan Pham, Van-Hoang Le (2013), "Exact numerical solutions of the Schrödinger equation for a two-dimensional exciton in a constant magnetic field of arbitrary strength", *Physica B* **423**, p. 31-37.

7. Hua L., Jun W., Bing-Lu Z., Jiong-Ming Z. and Zong-Chao Y. (2007), "Calculations of energies of the hydrogen molecular ion", *Phys. Rev. A* **75**, p. 012504.
8. Khersonskii V. K. (1984), "Hydrogen molecular ion in the magnetic field of a neutron star", *Astrophys. Space Sci.* **98**, p. 255-268.
9. Pauling L., Wilson E. B. (1935), "*Introduction to quantum mechanics*", McGraw-Hill book company, New York, p. 326-340.
10. Zhang Y. P., Cheng C. H., Kim J. T., Stanojevic J., Eyler E. E. (2004), "Dissociation energies of molecular hydrogen and the hydrogen molecular ion", *Phys. Rev. Lett.* **92**, 203003.

(Ngày Tòa soạn nhận được bài: 28-9-2015; ngày phản biện đánh giá: 29-10-2015;  
ngày chấp nhận đăng: 22-12-2015)