- Có nghiệm phức phân biệt: $k_{1,2} = \alpha \pm \beta i \rightarrow$ Nghiệm tổng quát: $y = e^{\alpha x}\left(C_1 \cos \beta x + C_2 \sin \beta x\right)$.

3.2. Chú ý

- Đối với phương trình Schrödinger thì $p = 0$ nên phương trình sẽ có hai nghiệm $k_{1,2} = \pm \beta i$ do đó nghiệm tổng quát của phương trình Schrödinger là: $\psi(x) = C_1 e^{i\beta x} + C_2 e^{-i\beta x}$.

- Điều kiện liên tục của hàm sóng và đạo hàm cấp 1 của hàm sóng tại một điểm x_0: $\begin{cases} \psi_I(x_0) = \psi_{II}(x_0) \\ \dfrac{d\psi_I(x_0)}{dx} = \dfrac{d\psi_{II}(x_0)}{dx} \end{cases}$.

4. Hạt vi mô trong giếng thế năng chiều bề cao vô hạn

- Hạt chuyển động theo phương x trong giếng thế năng định nghĩa bởi: $U(x) = \begin{vmatrix} 0 \text{ khi } 0 < x < a \\ \infty \text{ khi } \begin{cases} x \le 0 \\ x \ge a \end{cases} \end{vmatrix}$.

- Hàm sóng có dạng: $\psi_n(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin\left(\dfrac{n\pi}{a} x\right)$ tương ứng với năng lượng $E_n = \dfrac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$, $(n = 1, 2, 3, ...)$

CHƯƠNG VI. NGUYÊN TỬ - PHÂN TỬ

1. Nguyên tử Hydro

1.1. Phương trình Schrödinger và nghiệm

- Hàm sóng ψ và năng lượng của electron trong nguyên tử hydro là nghiệm của phương trình Schrödinger.

- Thế năng tương tác giữa hạt nhân và electron: $U = -\dfrac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$.

- Phương trình Schrödinger có dạng: $\Delta\psi(x, y, z) + \dfrac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + \dfrac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi(x, y, z) = 0$. $Z = 1$ (hydro)

- Do U phụ thuộc r nên bài toán có tính đối xứng cầu → chuyển hệ tọa độ Descartes sang tọa độ cầu:

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ z = r\cos\theta \end{cases}.$$

1.2. Phương trình Schrödinger trong hệ tọa độ cầu:

- $\dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \dfrac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \dfrac{1}{r^2 \sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \dfrac{1}{r^2\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2}\left(E + \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi = 0$

- Sử dụng phương pháp phân ly biến số: $\psi(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r).Y_{lm}(\theta, \varphi)$

Trong đó:

$R_{nl}(r)$ là ***hàm xuyên tâm, chỉ phụ thuộc vào độ lớn của r***

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$ là ***hàm cầu, phụ thuộc vào các góc θ và φ***

$n = 1, 2, 3, 4...$ là ***số lượng tử chính***

$l = 0, 1, 2, 3, ..., n-1$ là ***số lượng tử quỹ đạo (orbital)***

$m = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm l$ là ***số lượng tử từ***

1.3. Năng lượng của electron

$E_n = -\dfrac{1}{n^2}\dfrac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2 \hbar^2} = -\dfrac{Rh}{n^2}$. với R là hằng số Rydberg: $R = \dfrac{m_e e^4}{4\pi(4\pi\varepsilon_0)^2 \hbar^3} = 3,29.10^{15}\, s^{-1}$.

1.4. Một số dạng cụ thể của hàm R_{nl} và Y_{lm}.

(Tra giáo trình)

2. Nguyên tử kim loại kiềm