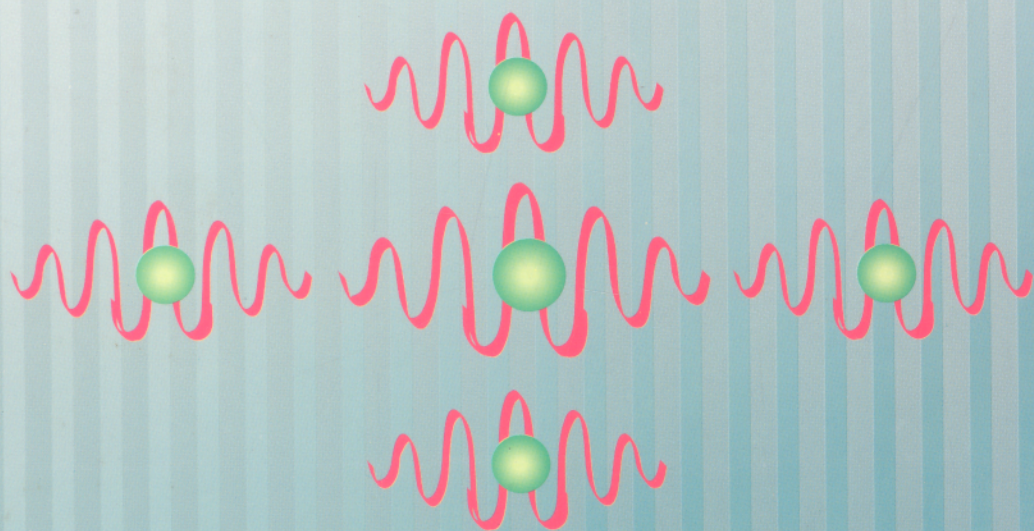


PHAN ĐÌNH KIẾN

Giáo trình CƠ HỌC LƯỢNG TỬ



NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

PHAN ĐÌNH KIẾN

GIÁO TRÌNH

CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

MỤC LỤC

Lời nói đầu	7
Chương 1. SỰ RA ĐỜI CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ	8
§1. Những tiền đề của cơ học lượng tử	8
§2. Tính chất sóng – hạt của các vi hạt	10
§3. Hàm sóng	14
§4. Bó sóng – Vận tốc pha, vận tốc nhóm	18
§5. Nguyên lý chồng chất trạng thái	21
§6. Các tập hợp thống kê lượng tử	24
Chương 2. TOÁN TỬ	27
§1. Toán tử tuyến tính	27
§2. Trị riêng và hàm riêng của toán tử	30
§3. Toán tử tự liên hợp tuyến tính (Toán tử Hermite)	31
§4. Những tính chất cơ bản của hàm riêng	33
§5. Điều kiện khả dĩ để hai toán tử có chung hàm riêng	37
Chương 3. CÁC ĐẠI LƯỢNG CƠ HỌC LƯỢNG TỬ VÀ TOÁN TỬ	39
§1. Nguyên lý tương ứng. Các tiên đề của cơ học lượng tử	39
§2. Giá trị trung bình và độ lệch toàn phương trung bình	40
§3. Phương pháp xác định giá trị đo các đại lượng vật lý	42
§4. Dạng tường minh của một số toán tử	44
§5. Điều kiện khả dĩ để hai đại lượng vật lý có giá trị đồng thời xác định	47
§6. Hệ thức bất định Heisenberg	49
Chương 4. SỰ BIẾN ĐỔI TRẠNG THÁI VÀ CÁC ĐẠI LƯỢNG VẬT LÝ THEO THỜI GIAN	57
§1. Phương trình Schrodinger	57
§2. Mật độ xác suất và mật độ dòng xác suất	60
§3. Trạng thái dừng	63
§4. Đạo hàm của toán tử theo thời gian	65
§5. Phương trình chuyển động trong cơ học lượng tử	68
§6. Tích phân chuyển động	70

Chương 5. PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER	
VỚI MỘT SỐ BÀI TOÁN ĐƠN GIẢN	73
§1. Hàng rào thế năng có bề dày vô hạn	73
§2. Hàng rào thế năng có bề dày hữu hạn	78
§3. Hố thế năng có thành cao vô hạn	81
§4. Hố thế năng có thành cao hữu hạn	84
§5. Hố thế ba chiều	86
§6. Electron trong kim loại	88
§7. Dao động tử điều hoà	90
Chương 6. CHUYỂN ĐỘNG TRONG TRƯỜNG XUYỀN TÂM	95
§1. Toán tử momen động lượng và các tính chất của nó	95
§2. Hàm riêng và trị riêng của các toán tử $\hat{M}^2$ và $\hat{M}_z$	98
§3. Chuyển động trong trường đối xứng tâm	102
§4. Chuyển động trong trường Coulomb	104
§5. Nguyên tử Hydro	107
§6. Rotato	110
§7. Định luật bảo toàn chắn lẻ	113
Chương 7. NGUYÊN TỬ TRONG TỪ TRƯỜNG NGOÀI	117
§1. Momen cơ và momen từ của electron	117
§2. Dòng điện trong nguyên tử Hydro	120
§3. Phương trình Schrodinger của electron trong từ trường	122
§4. Hiệu ứng Zeeman đơn giản	124
Chương 8. CƠ SỞ CỦA LÍ THUYẾT BIỂU DIỄN	129
§1. Các phép biểu diễn trạng thái các hệ lượng tử	129
§2. Các phép biểu diễn các toán tử	131
§3. Toán tử và ma trận	132
§4. Phép chuyển biểu diễn	136
§5. Trị trung bình dưới dạng ma trận	140
§6. Hàm riêng và trị riêng dưới dạng ma trận	141
§7. Phương trình Schrodinger và phương trình Heisenberg dưới dạng ma trận	143
§8. Kí hiệu Dirac	145

Chương 9. SPIN – HỆ HẠT ĐỒNG NHẤT	149
§1. Spin của các hạt cơ bản. Hàm sóng spin và toán tử spin	149
§2. Hàm riêng của các toán tử hình chiếu spin	153
§3. Nguyên lý đồng nhất của các hạt cơ bản	154
§4. Trạng thái đối xứng và phản đối xứng	155
§5. Hàm sóng của hệ các hạt Fermion và hệ các hạt Boson. Nguyên lý Pauli	157
§6. Hàm sóng của hệ hai hạt đồng nhất có spin $\frac{1}{2}$	160
§7. Phương pháp lượng tử hóa thứ cấp đối với hệ các hạt Boson	162
§8. Phương pháp lượng tử hóa thứ cấp đối với các hạt Fermion	167
Chương 10. LÝ THUYẾT NHIỄU LOẠN	169
§1. Đặt vấn đề bài toán nhiễu loạn	169
§2. Lý thuyết nhiễu loạn dừng không suy biến	170
§3. Lý thuyết nhiễu loạn dừng có suy biến	173
§4. Trạng thái cơ bản của nguyên tử Heli và các ion tương tự	176
§5. Trạng thái bất kỳ của nguyên tử Heli và các ion tương tự. Năng lượng trao đổi	179
§6. Hiệu ứng Stark	182
§7. Nhiễu loạn không dừng	189
§8. Sự chuyển dịch của hệ đến trạng thái mới dưới ảnh hưởng của nhiễu loạn	192
Chương 11. LÝ THUYẾT TÁN XẠ	195
§1. Đặt vấn đề bài toán tán xạ	195
§2. Tính biên độ tán xạ đàn hồi bằng phương pháp gần đúng Born	199
§3. Pha của sóng tán xạ và tiết diện hiệu dụng riêng phần	204
§4. Tán xạ đàn hồi bởi nguyên tử đối với các hạt mang điện chuyển động nhanh	207
§5. Tán xạ cộng hưởng	210
Phụ lục	212
Tài liệu tham khảo	229

Lời nói đầu

Giáo trình Cơ học lượng tử này được biên soạn theo chương trình đào tạo mới xây dựng của trường Đại học Sư phạm – Đại học Thái Nguyên.

Nội dung cuốn sách này chủ yếu dựa trên cơ sở cuốn “Giáo trình Cơ học lượng tử” của tác giả, đã được trường Đại học Sư phạm – Đại học Thái Nguyên lưu hành trong những năm gần đây, đồng thời được chỉnh lí và bổ sung thêm để phù hợp với chương trình mới.

Cuốn sách được dùng cho sinh viên các trường Đại học Sư phạm và cũng có thể dùng làm tài liệu tham khảo cho những ai cần đến Cơ học lượng tử.

Việc soạn một giáo trình Cơ học lượng tử vừa đảm bảo các yêu cầu cơ bản theo chương trình chung của Bộ, vừa mang tính sư phạm, phù hợp với đối tượng đào tạo là việc làm khó khăn, đòi hỏi nhiều công sức. Do vậy cuốn sách chắc chắn còn nhiều thiếu sót, chúng tôi rất mong và cảm ơn sự góp ý của bạn đọc.

Tác giả xin chân thành cảm ơn Giáo sư Đỗ Đình Thanh, Giáo sư Nguyễn Văn Thoả đã đóng góp nhiều ý kiến quý báu cho cuốn sách này.

Tác giả

Chương 1

SỰ RA ĐỜI CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

§1. NHỮNG TIỀN ĐỀ CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

Đến cuối thế kỉ thứ XIX Vật lí học đã tích lũy được rất nhiều các tư liệu thực nghiệm và khám phá ra hàng loạt các sự kiện mới. Lí thuyết cổ điển không thể giải thích thỏa mãn những sự kiện đó. Vào đầu thế kỉ XX đã nổ ra cuộc khủng hoảng vật lí học rất trầm trọng và ảnh hưởng sâu rộng đến các ngành khoa học khác. Khó khăn gay gắt nhất là việc giải thích sự phân bố phổ bức xạ của vật đen tuyệt đối. Từ lí thuyết cổ điển Rayleigh và Jeans đã chứng minh một cách chặt chẽ và rút ra công thức:

$$\rho_{\lambda,T} = f\lambda^{-5}T \quad (1.1)$$

Ở đây: f là hệ số tỉ lệ; λ là bước sóng; T là nhiệt độ tuyệt đối.

Công thức (1.1) cho thấy năng suất bức xạ toàn phần tỉ lệ thuận với nhiệt độ tuyệt đối và tỉ lệ nghịch với lũy thừa bậc 4 của bước sóng. Công thức này chỉ đúng với vùng có bước sóng dài $\lambda > \lambda_{\max}$, còn không đúng với vùng có bước sóng ngắn – vùng tử ngoại. Ngược lại, công thức của Wien chỉ đúng với vùng có bước sóng ngắn.

$$\rho_{\lambda,T} = c_1 \lambda^{-5} e^{-\frac{c_2}{\lambda T}} \quad (1.2)$$

Ở đây c_1, c_2 là các hệ số tỉ lệ.

Ngoài ra, lí thuyết cổ điển cũng bất lực trong việc giải thích nhiệt lượng riêng của vật rắn ở nhiệt độ thấp, sự tồn tại 5 bậc tự do của phân tử hai nguyên tử ở nhiệt độ thường,...

Vào năm 1900, Planck đã thoát ra khỏi những bế tắc trên bằng cách đưa ra thuyết lượng tử. Ông cho rằng sở dĩ Rayleigh - Jeans và Wien thất bại trong việc giải thích năng suất bức xạ của vật đen tuyệt đối là vì các nhà bác học đó quan niệm năng lượng của các dao động tử có tính liên tục. Trái lại, Planck đưa ra giả thuyết rất cách mạng: năng lượng của các dao

động tử có tính gián đoạn như điện lượng, nghĩa là năng lượng của một dao động tử không thể có giá trị bất kì mà bao giờ cũng gấp một số nguyên lần năng lượng nguyên tố ε (gọi là lượng tử năng lượng). Với dao động có tần số ν thì:

$$\varepsilon = h\nu \quad (1.3)$$

$h = 6.6256 \cdot 10^{-34} \text{Js}$ là hằng số Planck.

Công thức Planck phù hợp với thực nghiệm ở mức độ chính xác cao. Dựa vào công thức này, Planck đã suy ra công thức năng suất bức xạ toàn phần của vật đen tuyệt đối

$$\rho_{\lambda T} = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{k\lambda T}} - 1} \quad (1.4)$$

Ở đây: c là vận tốc ánh sáng; k là hằng số Boltzmann

Các công thức Rayleigh - Jeans và Wien là những trường hợp đặc biệt của công thức Planck.

Đến năm 1905, trên cơ sở phát triển thuyết lượng tử của Planck, Einstein đã đưa ra thuyết photon. Thuyết này giải thích được đầy đủ các hiện tượng quang điện.

Các thí nghiệm của Frank và Hertz đã chứng tỏ năng lượng của các nguyên tử có tính gián đoạn.

Nghiên cứu tính chất gián đoạn của năng lượng đối với hệ nguyên tử và sự bức xạ của nó, năm 1913 Bohr đề nghị sửa đổi các định luật cổ điển, lựa chọn và vận dụng thích hợp đối với hệ nguyên tử bằng cách đưa vào hằng số Planck. Bohr đưa ra hai tiên đề nổi tiếng sau đây:

Tiên đề 1: Hệ nguyên tử chỉ bền khi ở trong các trạng thái dừng xác định, ứng với một chuỗi các giá trị năng lượng gián đoạn hoặc liên tục. Mọi sự thay đổi bất kì về năng lượng đều gắn liền với sự dịch chuyển nhảy vọt của hệ từ trạng thái dừng này sang trạng thái dừng khác.

– **Tiên đề 2:** Bức xạ điện từ chỉ xảy ra khi hệ nguyên tử chuyển từ trạng thái dừng này sang trạng thái dừng khác. Bức xạ ứng với sự dịch chuyển từ trạng thái có mức năng lượng E_i sang trạng thái có mức năng lượng E_f là bức xạ đơn sắc và tần số được xác định theo công thức:

$$h\nu = E_i - E_f \quad (1.5)$$

$E_i > E_f$: Phát xạ

$E_i < E_f$: Hấp thụ

Bức xạ có thể tự phát khi hệ ở các mức năng lượng cao hơn mức cơ bản.

§2. TÍNH CHẤT SÓNG – HẠT CỦA CÁC VI HẠT

1. Tính chất sóng hạt của ánh sáng

Lưỡng tính sóng – hạt của các vi hạt đầu tiên được xác định đối với ánh sáng.

Tính chất sóng của ánh sáng được thể hiện qua các hiện tượng giao thoa, nhiễu xạ, phân cực... Bản chất sóng ánh sáng là sóng điện từ. Các đại lượng đặc trưng cho sóng là:

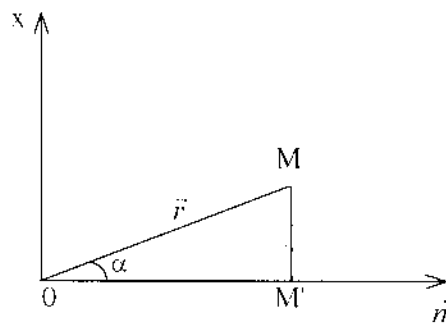
$$\text{Tần số: } \nu = \frac{1}{T} = \frac{\omega}{2\pi} \quad (1.6)$$

$$\text{Bước sóng: } \lambda = \frac{2\pi}{k} \quad (1.7)$$

$$\text{Số sóng: } k = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n}$$

($\vec{n}$ là vectơ đơn vị chỉ phương truyền sóng).

Phương trình sóng: Giả sử tại điểm 0 sóng có dạng $x_0 = A \cos \omega t$, sau thời gian $\Delta t = \frac{d}{c}$ ($d = r \cos \alpha = \vec{r} \cdot \vec{n}$) sóng lan đến điểm M, li độ dao động tại điểm M' giống li độ tại điểm 0.



Hình 1

Vì sóng phẳng nên mặt sóng đi qua M và M' đồng thời. Sóng tại điểm M' có dạng:

$$x_{M'} = A \cos \omega(t - \Delta t) = A \cos \omega(t - \frac{d}{v}) = A \cos(\omega t - \frac{2\pi}{T} \frac{d}{v}) = A \cos(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n} \cdot \vec{r})$$

Vậy có thể viết biểu thức sóng phẳng của ánh sáng đơn sắc dưới dạng:

$$x = A \cos(\omega t - k\vec{r})$$

Trong biểu diễn phức hàm này có dạng:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{-i(\omega t - k\vec{r})} \quad (1.8)$$

– Tính chất hạt của ánh sáng được thể hiện qua các hiện tượng bức xạ nhiệt, quang điện, phát quang..... hạt ánh sáng gọi là photon. Các đại lượng đặc trưng cho hạt là:

$$\text{Năng lượng: } E = h\nu = \hbar\omega \quad (1.9)$$

$$\text{Xung lượng: } \vec{P} = \hbar \vec{k} \quad (1.10)$$

$$\text{Ở đây } \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

Ta thấy: một photon với năng lượng E và xung lượng $\vec{P}$ xác định tương ứng với một sóng ánh sáng đơn sắc có tần số ν và số sóng $\vec{k}$ xác định. Vậy không những ánh sáng có tính chất sóng – hạt mà photon cũng có tính chất sóng – hạt.

2. Giả thuyết De Broglie

Trên cơ sở lưỡng tính sóng – hạt của ánh sáng, De Broglie đưa ra giả thuyết cho rằng: *Các vi hạt cũng có lưỡng tính sóng – hạt.*

Nội dung giả thuyết như sau: *Mỗi vi hạt chuyển động tự do có năng lượng E và xung lượng $\vec{P}$ xác định đều gắn liền với một sóng phẳng đơn sắc lan truyền theo phương chuyển động của hạt, giống như một photon gắn liền với một sóng ánh sáng. Giữa các đại lượng đặc trưng cho sóng và các đại lượng đặc trưng cho hạt cũng có các hệ thức liên hệ giống như giữa photon và ánh sáng, nghĩa là:*

$$E = \hbar\omega \quad (1.9)$$

$$\vec{P} = \hbar \vec{k} \quad (1.10)$$

Các hệ thức này gọi là các hệ thức De Broglie. Sóng tương ứng với sự chuyển động của vi hạt gọi là sóng De Broglie, nó được biểu diễn bằng hàm số giống như đối với sóng ánh sáng:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(E_0 - p_0 \vec{r})} \quad (1.8)$$

Trong một số trường hợp có thể tách $\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})f(t)$. Trong đó $\psi(\vec{r}) = A e^{\frac{i}{\hbar} p_0 \vec{r}}$; $f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t}$.

Chú thích: ở đây các kí hiệu Ψ, ψ có chung ý nghĩa.

Đánh giá bước sóng De Broglie: giả sử vi hạt có khối lượng m chuyển động với vận tốc v . Khi chuyển động tự do năng lượng của nó là:

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}. \text{ Ta có } \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

Giả sử vi hạt là electron (điện tử) được gia tốc trong điện trường, năng lượng của nó do công của điện trường sinh ra. Nếu hạt dịch chuyển giữa hai điểm có hiệu điện thế là U thì công $A = E = eU$

$$\text{Ta được } \lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e e U}} = \frac{h}{\sqrt{2m_e e}} \frac{1}{\sqrt{U}} = \frac{6,625 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} \frac{1}{\sqrt{U}}$$

$$\text{Khi } U = 1V \rightarrow \lambda \approx 12,2\text{\AA}; \quad U = 10^4 V \rightarrow \lambda \approx 0,122\text{\AA}$$

ở đây $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{kg}$ là khối lượng của electron

$e = -1,6 \cdot 10^{-19} \text{C}$ là điện tích của electron)

Giá trị này vào cỡ bước sóng của tia Rontgen cứng. Dĩ nhiên m và E càng lớn thì λ càng nhỏ. Thực tế không thể đo được trực tiếp bước sóng của ánh sáng nhìn thấy. Ví dụ đối với electron khi $E = 1 \text{eV}$ thực nghiệm đã trở nên rất khó khăn, khi $\lambda = 10^{-6} \text{cm}$ thì electron chỉ có năng lượng tương ứng là $1,2 \cdot 10^{-6} \text{eV}$. Máy gia tốc hiện đại tăng tốc cho các hạt có năng lượng rất lớn, có thể coi là nguồn phát sóng cực ngắn. Khi năng lượng chuyển động lớn hơn năng lượng tĩnh rất nhiều $E \gg m_0 c^2$ thì $E \approx pc$.

$$\text{Do đó } v = \frac{E}{h} \cdot \frac{c}{\lambda} = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{T}$$

3. Xác nhận tính chất sóng của các vi hạt

Để chứng tỏ giả thuyết của mình là đúng, De Broglie đã dùng giả thuyết của mình để chứng minh tiên đề lượng tử hoá momen động lượng (momen xung lượng) của Bohr (tiên đề này có trước và đã được thực nghiệm xác nhận tính chất đúng đắn của nó trong việc giải thích quang

phổ nguyên tử hidro). Vậy nếu giả thuyết De Broglie chứng minh được tiên đề của Bohr thì giả thuyết đó là đúng đắn. Nội dung tiên đề Bohr như sau: Trong nguyên tử hidro electron chỉ chuyển động trên những quỹ đạo tròn dừng sao cho momen động lượng của nó bằng một số nguyên lần hằng số h

$$Pr = nh; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1)$$

De Broglie lập luận như sau: Thay cho electron ta hình dung có một làn sóng lan truyền trên quỹ đạo tròn, giả sử bán kính quỹ đạo đủ lớn để có thể áp dụng được công thức đối với sóng phẳng:

$$k = \frac{P}{h} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2)$$

Để bảo đảm mối quan hệ đơn trị giữa bước sóng và tọa độ trên quỹ đạo tròn thì độ dài đường tròn quỹ đạo phải bằng một số nguyên lần bước sóng:

$$2\pi r = n\lambda$$

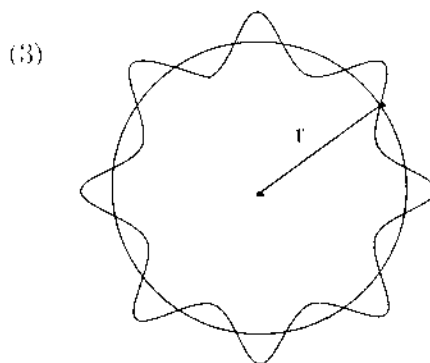
Từ (2) và (3) ta được:

$$2\pi r = n\lambda = n \frac{2\pi h}{P} \rightarrow Pr = nh$$

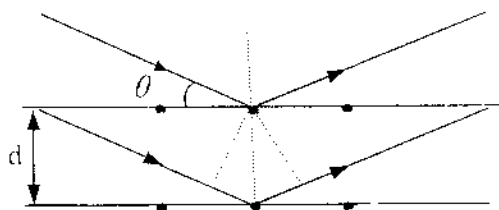
Nghĩa là giả thuyết De Broglie đã chứng minh được tiên đề của Bohr. Thật vậy, nếu tồn tại biểu thức (1) thì dao động của sóng tại điểm xuất phát sẽ giống dao động của sóng cũng tại điểm đó sau khi đã lan hết một vòng.

– Thí nghiệm về sự nhiễu xạ của electron

Giả thuyết De Broglie nêu lên tính chất sóng của electron, nếu quan sát được hiện tượng nhiễu xạ do electron sinh ra thì chứng tỏ electron



Hình 2



Hình 3

có tính chất sóng, vì nhiễu xạ là hiện tượng đặc thù của các quá trình sóng. Đã biết hiện tượng nhiễu xạ chỉ xảy ra khi kích thước của các khe cách tử nhiễu xạ có giá trị vào cỡ bước sóng của tia sáng qua khe. Năm 1927 Davisson và Germer đã làm thí nghiệm nghiên cứu sự nhiễu xạ của electron. Đã biết bước sóng De Broglie vào cỡ bước sóng của tia X cứng, vì thế muốn thấy electron nhiễu xạ ta phải dùng tinh thể, chiếu chùm electron lên tinh thể Ni và ghi nhận các electron bật ra theo các góc θ khác nhau. Số electron bật ra phụ thuộc vào góc θ và là cực đại khi thoả mãn hệ thức:

$$2d \sin\theta = k\lambda \quad (d - \text{hằng số tinh thể})$$

$k - \text{số nguyên}$

Công thức này đúng như công thức nhiễu xạ của ánh sáng, vậy electron có tính chất sóng.

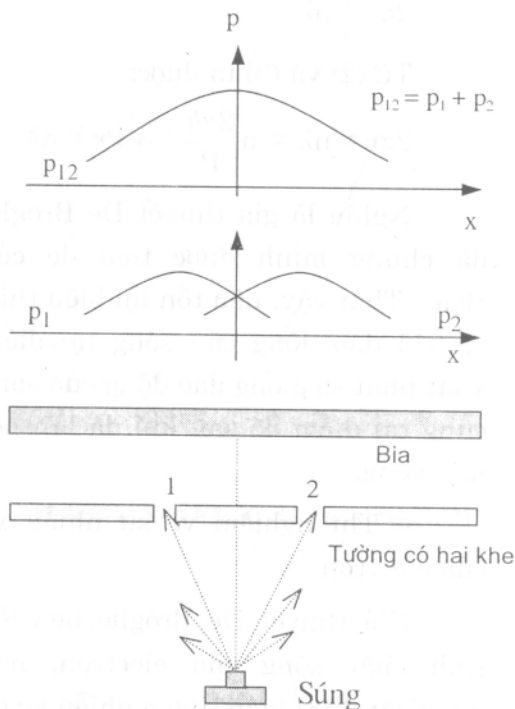
Về sau người ta tiếp tục làm thí nghiệm quan sát hiện tượng nhiễu xạ đối với các hạt khác như nơtron, proton, các phân tử, nguyên tử... Tất cả các kết quả thu được đều xác nhận tính chất đúng đắn của giả thuyết De Broglie. Vậy các vi hạt có lưỡng tính sóng – hạt.

§3. HÀM SÓNG

Để hiểu rõ hơn bản chất sóng – hạt của các vi hạt, trước hết ta xét một số thí nghiệm sau:

1. Thí nghiệm

– Dùng một khẩu súng máy bắn đạn thật vào một tấm bia, số lượng đạn được bắn ra phân bố đều theo mọi phương. Khi bắn qua khe 1 (bịt khe 2) ta được đường cong p_1 , biểu diễn số đạn trúng vào bia. Khi bắn qua khe 2 (bịt khe 1) ta được đường cong p_2 . Khi đồng thời bắn qua cả 2 khe ta được đường cong p_{12} , thí nghiệm chứng tỏ $p_{12} = p_1 + p_2$



Hình 4

Vậy số điện đi qua 2 khe độc lập với nhau, chúng tổ xác suất có tính chất tổng.

– Thay súng bằng nguồn sáng đơn sắc và thay bia bằng màn chắn sáng. ψ_1 và ψ_2 biểu diễn hàm sóng của ánh sáng đi qua từng khe.

$|\psi_1|^2$ biểu thị cường độ ánh sáng trên màn quan sát khi cho ánh sáng đi qua khe 1.

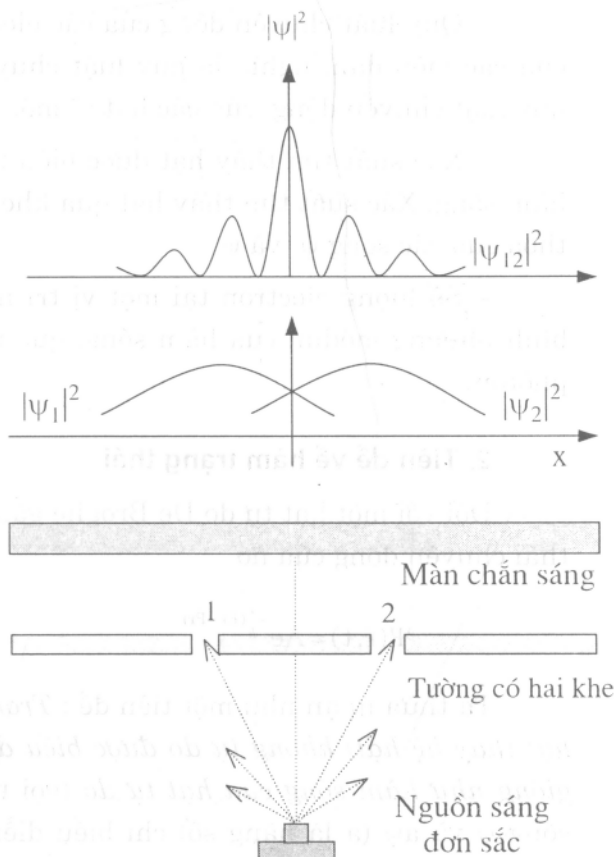
$|\psi_2|^2$ biểu thị cường độ ánh sáng trên màn quan sát khi cho ánh sáng đi qua khe 2.

$|\psi_{12}|^2$ biểu thị cường độ ánh sáng trên màn quan sát khi cho ánh sáng đi qua hai khe.

Thí nghiệm chứng tỏ $|\psi_{12}|^2 \neq |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$, điều này gây nên bởi sự giao thoa của hai chùm ánh sáng ở phía sau khe. Ánh sáng tổng hợp là $\psi_{12} = \psi_1 + \psi_2$ nhưng do sự lệch pha về dao động giữa hai chùm tia nên $|\psi_{12}|^2 \neq |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$.

– Thay nguồn sáng bằng nguồn electron, thay màn chắn sáng bằng màn phát quang. Mỗi electron đập lên màn phát quang sẽ cho một chấm sáng. Cường độ sáng tại một đơn vị diện tích trên màn phát quang tỉ lệ với số electron đập vào đơn vị đó trong một đơn vị thời gian. Thí nghiệm chứng tỏ số electron được phân bố trên màn phát quang giống như sự phân bố cường độ sáng trên màn chắn sáng và $|\psi_{12}|^2 = |\psi_1 + \psi_2|^2$.

Tìm cách giảm số lượng electron đi qua từng khe đến mức chỉ còn từng electron lần lượt đi qua khe, ta thấy : khi số electron đi qua khe còn



Hình 5

ít thì các chấm sáng tán mạn trên màn giống như trên bia lỗ chỗ các vết đạn, chỉ khi số lượng electron đập lên màn đủ lớn thì mới quan sát được đầy đủ hình ảnh nhiễu xạ.

Kết quả các thí nghiệm trên cho phép kết luận:

-- Quy luật chuyển động của các electron khác quy luật chuyển động của các viên đạn, nghĩa là quy luật chuyển động của các hạt vi mô khác quy luật chuyển động của các hạt vĩ mô.

-- Xác suất tìm thấy hạt được biểu thị bằng bình phương môđun của hàm sóng. Xác suất tìm thấy hạt qua khe 1 hoặc qua khe 2 là kết quả giao thoa của các sóng ψ_1 và ψ_2 .

-- Số lượng electron tại một vị trí nào đó trong không gian tỉ lệ với bình phương môđun của hàm sóng, quan niệm này cũng phù hợp với các photon.

2. Tiên đề về hàm trạng thái

Đối với một hạt tự do De Broglie gán cho một hàm sóng diễn tả trạng thái chuyển động của nó

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - P\vec{r})}$$

Ta thừa nhận như một tiên đề : *Trong cơ học lượng tử trạng thái của hạt (hay hệ hạt) không tự do được biểu diễn bằng một hàm sóng nào đó, giống như hàm sóng của hạt tự do* (gọi tắt là hàm trạng thái). Hai hàm sóng ψ và $a\psi$ (a là hằng số) chỉ biểu diễn cùng một trạng thái, nói cách khác, các trạng thái khác nhau phải được biểu diễn bằng các hàm sóng độc lập tuyến tính với nhau.

3. Giải thích và ý nghĩa

Trên cơ sở kết quả của các thí nghiệm trên và nhiều thí nghiệm khác cho phép ta đi đến quan niệm thống nhất về sóng De Broglie như sau:

Toàn bộ diễn biến của một sự kiện vật lý đối với các vi hạt được xác định bởi các quy luật có tính chất thống kê. Cách giải thích thống kê sóng De Broglie do Born đưa ra đầu tiên: *Cường độ sóng De Broglie ở một vị trí nào đó trong không gian tỉ lệ với xác suất tìm thấy hạt ở vị trí đó.*

Cách giải thích này hoàn toàn khác với quan niệm cổ điển. Theo lí thuyết cổ điển: Giá trị của hàm sóng hoàn toàn xác định trạng thái của hạt. Ví dụ, nếu biên độ sóng tại một điểm nào đó có giá trị lớn gấp đôi biên độ sóng tại điểm khác thì năng lượng sẽ gấp 4 lần, và như vậy trạng thái của hạt ở hai điểm sẽ khác nhau. Nhưng theo cơ học lượng tử cường độ sóng De Broglie tỉ lệ với xác suất định vị $|\psi|^2$. Do đó vấn đề quan trọng là tỉ số giữa cường độ sóng tại các điểm khác nhau, nếu tỉ số đó không thay đổi tại các điểm đó thì trạng thái của hạt ở các điểm đó là như nhau.

– Sóng De Broglie cho phép mô tả tính chất thống kê của chuyển động của các hạt, nó xác định xác suất tìm thấy hạt ở lân cận một điểm nào đó trong không gian tại thời điểm cho trước. Nói cách khác, sóng De Broglie là sóng xác suất, biết hàm sóng ta tìm được xác suất. Do đó trong cơ học lượng tử khái niệm quỹ đạo mất hết ý nghĩa, không thể nói tại thời điểm t hạt ở vị trí $\vec{r}$ xác định. Trong thế giới vi mô chỉ có thể nói tại thời điểm t toạ độ của hạt được xác định với một xác suất nào đó thôi.

– Chỉ trong những trường hợp đặc biệt trạng thái của hạt mới được diễn tả bằng sóng phẳng đơn sắc. Trong trường hợp tổng quát ta tưởng tượng sóng De Broglie là sóng rất phức tạp (nó là hàm số của toạ độ và thời gian). Hàm sóng nói chung là hàm phức, song xác suất tìm hạt $|\psi|^2$ luôn luôn là đại lượng vật lí thực.

Xác suất để thấy hạt ở lân cận một điểm nào đó trong không gian phụ thuộc vào kích thước của vùng được chọn. Xét một vùng rất nhỏ bé có kích thước nằm trong khoảng: $x, x + dx; y, y + dy; z, z + dz$, trong vùng này có thể coi hàm sóng không thay đổi, nên xác suất tìm thấy hạt trong vùng này có thể coi như tỉ lệ với kích thước của vùng đó. Vậy xác suất tìm thấy hạt ở lân cận điểm nằm trong vùng $x, x + dx; y, y + dy; z, z + dz$ là:

$$dw(x, y, z) = |\psi(x, y, z)|^2 dv; \quad dv = dx dy dz \quad (1.11)$$

$$\text{Đại lượng } \omega = \frac{dw(x, y, z)}{dv} = \psi^*(x)\psi(x) = |\psi(x)|^2 \quad (1.12)$$

gọi là mật độ xác suất.

Theo định lí cộng xác suất, xác suất tìm thấy hạt trong toàn không gian V là:

$$W(x, y, z) = \int_V dw(x, y, z) = \int_V \rho dV = \int_V |\psi(x)|^2 dV \quad (1.13)$$

Bản thân hàm sóng không có ý nghĩa vật lí, mà chỉ $|\psi(\vec{r})|^2$ mới có ý nghĩa là xác suất tìm thấy hạt trong một đơn vị thể tích nào đó.

4. Đòi hỏi của hàm sóng

– Chuẩn hoá: Nếu tìm hạt trong toàn không gian chứa hạt thì chắc chắn tìm thấy nó. Theo lí thuyết xác suất đó là sự kiện chắc chắn và xác suất có giá trị bằng 1, chuẩn hoá không phụ thuộc vào thời gian.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dV = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dV = 1 \quad (1.14)$$

– Giới nội: Theo điều kiện (1.14) hàm sóng phải giới nội, nếu không điều kiện chuẩn hoá không được thoả mãn.

– Đơn trị: Hàm sóng phải đơn trị, nếu không thì ứng với mỗi trạng thái sẽ có nhiều xác suất tìm thấy hạt, điều đó trái với lí thuyết xác suất. Hàm sóng phải tuân theo những điều kiện biên cho trước.

– Liên tục: Hàm sóng phải liên tục, vì $|\psi|^2$ không thể thay đổi nhảy vọt. Đạo hàm bậc nhất của hàm sóng cũng phải liên tục.

§4. BÓ SÓNG – VẬN TỐC PHA, VẬN TỐC NHÓM

Trong biểu thức hàm sóng $\Psi(x, t) = Ae^{i(\omega t - kx)}$ thì đại lượng

$$\alpha = kx - \omega t \quad (1.15)$$

gọi là pha của sóng. Để đơn giản ta xét hạt chuyển động theo phương Ox, hàm sóng theo phương này sẽ là:

$$\Psi(x, t) = Ae^{-i(\omega t - kx)}$$

và $\alpha = kx - \omega t \quad (\alpha = \alpha_x; k = k_x)$

Ta xét một pha xác định $kx - \omega t = \text{hằng số}$. Tại thời điểm t pha này ở vị trí x , tại thời điểm $t + \Delta t$ nó ở vị trí $x + \Delta x$. Từ đó:

$kx - \omega t = (x + \Delta x)k - \omega(t + \Delta t) = \text{hằng số}$, suy ra $\omega \Delta t - k \Delta x = 0$

Vậy pha này sẽ lan truyền với vận tốc:

$$u = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{P} = v\lambda \quad (1.16)$$

Ta thấy, trái với sóng điện từ, trong chân không sóng De Broglie bị tán sắc, nghĩa là vận tốc pha của sóng De Broglie phụ thuộc vào tần số.

Nếu vận tốc của hạt $v \ll c$ thì năng lượng E và xung lượng P liên hệ với nhau theo hệ thức:

$$E = \frac{P^2}{2m}$$

$$\text{Do đó } \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (1.17)$$

Hệ thức này biểu thị định luật tán sắc sóng De Broglie.

Thay (1.17) vào (1.16) ta được:

$$u = \frac{\hbar k}{2m} \quad (1.18)$$

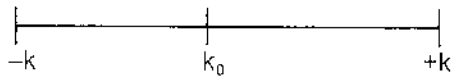
Vậy, số sóng càng lớn thì vận tốc pha càng lớn.

Mặt khác nếu thay $E = mc^2$ và $P = mv$ vào (1.16)

$$\text{ta có: } u = \frac{c^2}{v} > c \quad \text{vì } v \ll c$$

Theo thuyết tương đối của Einstein mọi vận tốc vật lí của hạt đều nhỏ hơn vận tốc ánh sáng. Vậy vận tốc pha không phải là đại lượng vật lí thực, vì sóng đơn sắc là sóng lí tưởng – sóng toán học, không tồn tại trong thực tế. Sóng đơn sắc là một quá trình tuần hoàn không có giới hạn trong không gian và thời gian. Song hạt vật chất bao giờ cũng định xứ trong một khoảng không gian nào đấy.

Để diễn tả trạng thái của vi hạt được sát thực hơn người ta không dùng sóng đơn sắc mà dùng nhóm sóng có số sóng biến thiên trong khoảng Δk đủ nhỏ, tức là k dao động quanh k_0

$$k_0 - \Delta k \leq k \leq k_0 + \Delta k$$


Sự chồng chất các sóng này gọi là bó sóng và được diễn tả bằng hàm sóng:

$$\Psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (1.19)$$

vì ω là hàm số của k (theo (1.17)) và Δk đủ nhỏ nên có thể khai triển ω theo lũy thừa của $z = k - k_0$, ta có:

$$\omega = \omega_0 + \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\omega}{dk^2} \right)_{k=k_0} (k - k_0)^2 + \dots \quad (1.20)$$

vì z nhỏ nên ta chỉ giữ lại hai số hạng đầu trong (1.20) và thay vào (1.19), ta được:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= A \int_{-\Delta k}^{+\Delta k} e^{i \left[x(k_0 + z) - t \left\{ \omega_0 + \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_0 z \right\} \right]} dz \\ &= A e^{i(xk_0 - \omega_0 t)} \int_{-\Delta k}^{+\Delta k} e^{i \left[x - t \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_0 \right] z} dz \end{aligned}$$

Lấy tích phân này ta được:

$$\Psi(x, t) = 2A \frac{\sin \left\{ \left[x - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_0 t \right] \Delta k \right\} e^{i(xk_0 - \omega_0 t)}}{\left[x - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_0 t \right]} = B e^{i(xk_0 - \omega_0 t)} \quad (1.21)$$

ở đây đặt: $B = 2A \frac{\sin \gamma}{\gamma} \Delta k$; $\gamma = \left[x - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_0 t \right] \Delta k$

B biến đổi chậm theo thời gian (vì Δk nhỏ) nên có thể coi là biên độ, nhưng biên độ này có biến đổi. Tại thời điểm t hàm sóng có dạng như hình 6. B có cực đại chính ở điểm $\gamma = 0$

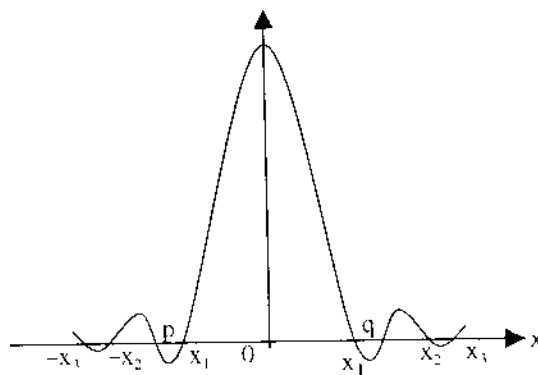
$$X_{\max} = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_0 t$$

vì
$$\frac{\sin \gamma}{\gamma} = 1$$

Sát với cực đại chính, B triệt tiêu ở hai điểm $\gamma = -\pi$ và $\gamma = +\pi$

$$X_{p,q} = \frac{\pm \pi}{\Delta k} + \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_0 t$$

Các cực đại khác rất nhỏ so với cực đại chính nên có thể nói là bó sóng hầu như tập trung trong một khoảng không gian giới hạn :



Hình 6

$$\Delta x = x_q - x_p = \frac{2\pi}{\Delta k}$$

Vận tốc của bó sóng này gọi là vận tốc nhóm, nó bằng vận tốc của cực đại chính:

$$V = \frac{dx_{max}}{dt} = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_0 \quad (1.22)$$

Đối với sóng điện từ $\omega = 2\pi\nu = ck$, do đó $v = c = u$ nghĩa là vận tốc nhóm bằng vận tốc pha. Đối với sóng De Broglie trong trường hợp $v \ll c$, ta có:

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}, \text{ vậy } V = \frac{\hbar k}{m} = \frac{mv}{m} = v \quad (1.23)$$

tức là vận tốc nhóm bằng vận tốc hạt.

§5. NGUYÊN LÝ CHỐNG CHẤT TRẠNG THÁI

Trong tiết trước ta đã biết bó sóng là sự chồng chất các sóng đơn sắc. Đó là một thí dụ về trạng thái chồng chất – một trong những cơ sở của cơ học lượng tử.

Trong những điều kiện vật lí cho trước hạt có thể nằm ở các trạng thái khác nhau tùy thuộc vào việc mà hạt rơi vào các điều kiện ấy bằng cách nào. Ví dụ đơn giản nhất là trường hợp hạt chuyển động tự do không

chịu tác dụng của ngoại lực và cũng không tương tác với các hạt khác. Khi ấy hạt có thể nằm trong các trạng thái khác nhau, được xác định bởi một đại lượng đặc trưng nào đó (ví dụ như phương của xung lượng). Tuy nhiên có thể tồn tại những trạng thái phức tạp hơn, thí dụ trong thí nghiệm nhiễu xạ của Davisson và Germer: chùm hạt tới đập vào tinh thể bị tách thành hệ các chùm nhiễu xạ, các chùm này lại tiếp tục truyền đi trong không gian - đó là tập hợp gồm tất cả các sóng có phương truyền khác nhau.

Vậy, khi cho một chùm hạt có bước sóng và phương truyền xác định đập vào tinh thể ta không thể thu được một sóng nhiễu xạ riêng biệt nào đó, mà lập tức thu được tất cả tập hợp các sóng đó (thay cho sóng tới) có cùng tỉ số pha xác định đối với nhau và do đó chúng giao thoa với nhau. Tất cả tập hợp đó là một trường sóng duy nhất và được biểu diễn bằng một hàm sóng Ψ .

Tuy nhiên trường sóng như vậy là tập hợp các sóng De Broglie đơn giản, một trong các sóng này có thể biểu diễn một trạng thái khả dĩ của hạt chuyển động trong không gian.

Dưới dạng đơn giản nhất, nguyên lí chồng chất trạng thái rút về hai luận điểm sau:

– Nếu hạt (hay hệ hạt) ở một trạng thái nào đó được biểu diễn bằng hàm sóng Ψ_1 và ở trạng thái khác được biểu diễn bằng hàm sóng Ψ_2 thì nó cũng có thể ở trạng thái Ψ là tổ hợp tuyến tính của Ψ_1 và Ψ_2

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$$

Tổng quát, khi hạt ở nhiều trạng thái khác nhau ta có:

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n \quad (1.24)$$

ở đây: c_n – các hệ số, nói chung là phức, chúng xác định biên độ và pha của sóng Ψ_n tương ứng.

Nếu các hàm sóng Ψ_n khác nhau rất ít thì thay cho tổng (1.24) ta có tích phân:

$$\Psi = \int c(n)\Psi_n dv \quad (1.25)$$

– Hai hàm sóng Ψ và $a\Psi$ (a là số phức bất kì) chỉ biểu diễn cùng một trạng thái của hạt, nghĩa là nếu nhân hàm sóng với một số phức khác không bất kì thì hàm sóng mới sẽ cùng tương ứng với trạng thái đó của hệ.

Từ nguyên lý chồng chất trạng thái suy ra: Nếu coi các hàm sóng mô tả trạng thái của hạt như các vectơ trong không gian trừu tượng vô hạn chiều (trong toán học người ta gọi là không gian Hilbert), và nếu vectơ trạng thái được xác định như hàm số tọa độ của hạt thì sự biểu diễn như thế về các trạng thái được gọi là sự biểu diễn tọa độ. Vì Ψ và $a\Psi$ là hai vectơ biểu diễn cùng một trạng thái, vậy trạng thái của hạt chỉ được xác định bởi phương của vectơ trong không gian Hilbert chứ không phải bởi độ dài của vectơ.

Theo nguyên lý chồng chất trạng thái thì các phương trình mà hàm sóng thoả mãn phải là các phương trình tuyến tính (nguyên lý có thể bị vi phạm trong không gian có kích thước dài nhỏ hơn 10^{-14}cm). Nguyên lý chồng chất trạng thái phản ánh một tính chất rất quan trọng của cơ học lượng tử mà không có sự tương tự với cơ học cổ điển: Ví dụ theo cơ học cổ điển có các dao động chồng chất với chính chúng sẽ dẫn đến một dao động mới có biên độ lớn hơn hay nhỏ hơn. Mặt khác theo cơ học cổ điển có tồn tại trạng thái nghỉ, trong đó tại mọi điểm biên độ dao động đều bằng không. Trái lại, theo cơ học lượng tử không tồn tại trạng thái nghỉ và hàm sóng chỉ bằng không tại các điểm trong không gian tương ứng với sự không có mặt của trạng thái.

Hai hàm sóng Ψ_1 và Ψ_2 biểu diễn hai trạng thái có xung lượng P_1 và P_2 xác định, còn hàm sóng $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ biểu diễn trạng thái không có xung lượng xác định. Vậy theo một ý nghĩa nào đó Ψ là hàm sóng trung gian giữa Ψ_1 và Ψ_2 . Như vậy cơ học lượng tử thừa nhận những trạng thái, trong đó một số đại lượng vật lý không có giá trị xác định.

§6. CÁC TẬP HỢP THỐNG KÊ LƯỢNG TỬ

Trong thực tế có hai loại bài toán đặt ra:

– Bài toán thuận: Theo hàm sóng đoán trước kết quả khả dĩ các phép đo đối với vi hạt.

– Bài toán ngược: Theo kết quả thực nghiệm xác định hàm sóng.

Việc đoán trước kết quả đo lường bằng cách dựa vào hàm sóng, nói chung mang đặc trưng thống kê, do đó nếu chỉ tiến hành một phép đo duy nhất nào đó thì kết quả đo lường đặt ra vấn đề: sự cố xảy ra đáng tin cậy nhiều hay ít, sự phân bố kết quả đo lường chỉ mang tính chất khách quan khi lặp lại phép đo rất nhiều lần.

Điều quan trọng là trong lĩnh vực lượng tử ta không thể lặp lại thí nghiệm đối với cùng một hạt vì phép đo, nói chung, sẽ làm thay đổi trạng thái của hạt. Do đó để lặp lại một số lớn ($N \gg 1$) các thí nghiệm đồng nhất, ta tưởng tượng có một số lớn các hạt không phụ thuộc vào nhau và đều nằm trong cùng một trạng thái được biểu diễn bằng hàm sóng ψ . Một tập hợp gồm các hạt (hay hệ hạt) như thế gọi là tập hợp thuần khiết.

Tất cả xác suất và các giá trị trung bình đều được tính từ các hàm sóng ứng với các phép đo trong tập hợp đó. Ví dụ: xác suất tìm thấy tọa độ x ở gần x' bằng $|\Psi(x')|^2 dx'$, có nghĩa là khi tiến hành đo x N lần thì có N' lần tìm thấy x ở gần x' .

$$\frac{N'}{N} = |\psi(x')|^2 dx' \quad (1.26)$$

Tương tự khi đo P_x gần P'_x M lần thì có M' lần tìm thấy P_x gần P'_x .

$$\frac{M'}{M} = |c(p'_x)|^2 dp'_x \quad (1.27)$$

Khi biết sự phân bố các kết quả đo lường đối với x và P_x thì có thể tính được giá trị trung bình của bất kì hàm số $\overline{F(x)}$ và $\overline{\phi(P)}$. Thành ra, khi biết hàm sóng không những chỉ tính được xác suất đối với x và P_x mà còn có thể tính được xác suất của bất kì đại lượng vật lí nào của hạt (hay hệ hạt).

Rõ ràng, chỉ một phép đo duy nhất đối với một hạt không thể lập được hàm sóng. Phải biết sự phân bố kết quả đo lường trong tập hợp mới có thể xác định được hàm sóng. Bởi vậy, không những chỉ sự đoán trước kết quả đo lường trong tập hợp lượng tử, mà ngược lại, đặc trưng của tập hợp lượng tử đều có thể được xác định từ các phép đo. Do đó trạng thái của hạt được biểu diễn bởi hàm sóng cần hiểu như là thuộc tính của hạt đối với một tập hợp thuần khiết nhất định. Chính theo ý nghĩa này ta dùng từ "trạng thái" của hạt, của hệ hạt...

Ta hãy xét sự tán xạ của electron trên nguyên tử. Giả sử electron có xung lượng $\vec{P}$, hàm sóng $\psi_p(x)$

$$\psi_p(x) = \varphi_p(x) + u(x)$$

Ở đây: $\varphi_p(x)$ – hàm sóng diễn tả trạng thái ban đầu với xung lượng $\vec{P}$

$u(x)$ – sóng tán xạ.

Trong thực tế tồn tại những tập hợp ngay từ ban đầu các hạt đã nằm ở các trạng thái khác nhau, người ta gọi đó là tập hợp hỗn hợp.

Hàm sóng hay tập hợp các hàm sóng cần xem như các đặc tính khách quan không phụ thuộc vào người quan sát. Tương tự với quang học: Tập hợp thuần khiết ứng với sóng kết hợp, còn tập hợp hỗn hợp ứng với các sóng không kết hợp. Theo quan điểm thống kê giữa tập hợp thuần khiết và tập hợp hỗn hợp có sự khác nhau quan trọng: Tưởng tượng có một tập hợp chứa rất nhiều hạt, tất cả nằm trong cùng một trạng thái. Nếu tách ra một tập hợp con và giả sử tiến hành đo xung lượng của hạt ta được giá trị P , lại tách ra một tập hợp con khác và cũng đo được giá trị P ,... Tập hợp như thế là thuần khiết. Ngược lại, nếu mỗi lần tách ra một tập hợp con để đo được P ta thu được kết quả khác nhau – đây là tập hợp hỗn hợp.

Chương 2

TOÁN TỬ

§1. TOÁN TỬ TUYẾN TÍNH

1. Khái niệm về toán tử

Cho hàm số $\psi(x_1, x_2, \dots)$. Nếu từ hàm số $\psi(x_1, x_2, \dots)$ ta thu được hàm số $\varphi(x_1, x_2, \dots)$ có cùng các biến số độc lập bằng cách dùng một quy luật toán học nào đó tác dụng lên hàm số $\psi(x_1, x_2, \dots)$. Điều này có thể biểu diễn một cách tượng trưng: tích của hàm số $\psi(x_1, x_2, \dots)$ với toán tử tương ứng cho hàm số $\varphi(x_1, x_2, \dots)$

$$\hat{L}\psi(x_1, x_2, \dots) = \varphi(x_1, x_2, \dots) \quad (2.1)$$

ở đây $\hat{L}$ là toán tử, nó có thể là phép nhân với x ($\hat{L} = x$), phép lấy vi phân theo x ($\hat{L} = \frac{d}{dx}$), phép khai căn ($\hat{L} = \sqrt{}$), ...

$$\text{Ví dụ: } \varphi(x) = \frac{d\psi}{dx} \rightarrow \frac{d}{dx} \text{ là toán tử}$$

$$\varphi(x) = x \cdot \psi(x) \rightarrow x \text{ là toán tử}$$

2. Định nghĩa toán tử tuyến tính

Toán tử $\hat{L}$ gọi là tuyến tính nếu nó thỏa mãn tính chất sau:

$$\hat{L}c_1(\psi_1(x) + c_2\psi_2(x) + \dots) = c_1\hat{L}\psi_1(x) + c_2\hat{L}\psi_2(x) + \dots$$

$$\text{Hay } \hat{L} \sum_n c_n \psi_n(x) = \sum_n c_n \hat{L} \psi_n(x) \quad (2.2)$$

ở đây: $\psi_1(x), \psi_2(x), \dots$ là các hàm số tùy ý

$c_1, c_2, \dots$ là các hệ số tùy ý

Như vậy: $\frac{d}{dx}$ là toán tử tuyến tính, $\sqrt[n]{}$ không phải là toán tử tuyến tính.

Cơ học lượng tử chỉ dùng các toán tử tuyến tính, vì thế trong cơ học lượng tử người ta chỉ nghiên cứu các toán tử tuyến tính. Tính chất của công thức (2.2) có nghĩa là tác dụng của toán tử $\hat{L}$ lên tổng các hàm số $\psi_1(x), \psi_2(x), \dots$ thì bằng tổng các kết quả thu được khi toán tử $\hat{L}$ tác dụng lên từng hàm số $\psi_1(x), \psi_2(x), \dots$. Nghĩa là đòi hỏi việc áp dụng các toán tử tuyến tính không vi phạm đến nguyên tắc tổng.

3. Các phép tính về toán tử

Các phương pháp thiết lập các toán tử phức tạp hơn từ các toán tử đơn giản được rút ra chính từ định nghĩa toán tử và có thể xây dựng dưới dạng quy tắc đại số.

a. *Phép cộng*: $\hat{C}\psi(x) = \hat{A}\psi(x) + \hat{B}\psi(x)$

Có thể biểu diễn $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$ (2.3)

Ví dụ: $\hat{A} = x; \hat{B} = \frac{d}{dx}$ thì

$$\hat{C}\psi(x) = (\hat{A} + \hat{B})\psi(x) = \left(x + \frac{d}{dx}\right)\psi(x) = x\psi(x) + \frac{d\psi(x)}{dx}$$

b. *Phép nhân*: $\hat{C}\psi(x) = \hat{A}\hat{B}\psi(x)$

Có thể biểu diễn $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ (2.4)

Tức là trước hết tác dụng $\hat{B}$ lên $\psi(x)$ sau đó tác dụng $\hat{A}$ lên kết quả vừa thu được.

Ví dụ: $\hat{A} = x; \hat{B} = \frac{d}{dx}$ thì $\hat{C}\psi(x) = x \frac{d}{dx} \psi(x) = x\psi'(x)$

c. *Luỹ thừa*: Nếu dùng một toán tử tác dụng liên tiếp n lần lên một hàm số thì có thể biểu diễn dưới dạng luỹ thừa

$$\hat{A}\hat{A}\hat{A}\dots\hat{A}\psi(x) = \hat{A}^n\psi(x) \quad (2.5)$$

d. *Chú ý*:

+ Nói chung tích của các toán tử không thoả mãn quy tắc hoán vị, nghĩa là:

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$$

$$\text{Ví dụ: } \hat{A} = x; \hat{B} = \frac{d}{dx} \text{ thì } x \frac{d}{dx} \psi(x) = x\psi'(x)$$

$$\frac{d}{dx} x\psi(x) = \psi(x) + x\psi'(x)$$

$$\text{nghĩa là } \left(\frac{d}{dx} x - x \frac{d}{dx} \right) \psi(x) = \psi(x) \neq 0$$

Gọi kí hiệu $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ là giao hoán tử

$$+ \text{ Nếu } \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \rightarrow \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$$

ta nói $\hat{A}$ và $\hat{B}$ giao hoán với nhau.

$$\text{Ví dụ: } \hat{A} = \frac{\partial}{\partial x_1}; \hat{B} = \frac{\partial}{\partial x_2}$$

$$\text{ta có } \frac{\partial}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial}{\partial x_2} \psi(x) = \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x_1 \partial x_2}, \quad \frac{\partial}{\partial x_2} \cdot \frac{\partial}{\partial x_1} \psi(x) = \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x_2 \partial x_1}$$

$$\text{Tức là: } \frac{\partial}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial}{\partial x_2} \cdot \frac{\partial}{\partial x_1}$$

+ Nếu $\hat{A}\hat{B} = -\hat{B}\hat{A}$ ta nói $\hat{A}$ và $\hat{B}$ phản giao hoán với nhau.

+ $(c\hat{L})\psi(x) = c\hat{L}\psi(x)$, ở đây c - hằng số.

+ Toán tử đơn vị là toán tử khi dùng nó tác dụng lên một hàm số nào đó thì không làm thay đổi hàm số đó.

$$\text{Ví dụ: } \left(\frac{d}{dx} x - x \frac{d}{dx} \right) \psi(x) = \psi(x), \text{ nghĩa là } \left(\frac{d}{dx} x - x \frac{d}{dx} \right) = 1$$

+ Toán tử nghịch đảo: $\hat{L}^{-1}$ là nghịch đảo của $\hat{L}$, nếu

$$\hat{L}\psi(x) = \phi(x) \text{ thì } \hat{L}^{-1}\phi(x) = \psi(x)$$

+ Toán tử liên hợp phức: $\hat{L}^*$ là liên hợp phức của $\hat{L}$, nếu

$$\hat{L}\psi(x) = \phi(x) \text{ thì } \hat{L}^*\psi^*(x) = \phi^*(x)$$

§2. TRỊ RIÊNG VÀ HÀM RIÊNG CỦA TOÁN TỬ

Cho toán tử $\hat{L}$ và hàm số $\psi(x)$ liên tục, hữu hạn và đơn trị với mọi giá trị của x . Nếu tác dụng toán tử $\hat{L}$ lên hàm số $\psi(x)$ ta thu được hàm số mới chính bằng hàm số $\psi(x)$ nhân với một hằng số nào đó.

$$\hat{L}\psi(x) = L\psi(x) \quad (2.6)$$

thì ta gọi L là trị riêng của toán tử $\hat{L}$ và $\psi(x)$ là hàm riêng của toán tử $\hat{L}$

Ví dụ: $\hat{L} = \frac{d^2}{dx^2}$; $\psi(x) = \cos(4x)$. Ta có $\hat{L}\psi(x) = -\frac{d^2}{dx^2}\cos 4x = 16\cos 4x$, ở đây trị riêng $L = 16$ và hàm riêng $\psi(x) = \cos 4x$.

Tập hợp các trị riêng của một toán tử gọi là phổ trị riêng của toán tử đó. Bài toán tìm phổ trị riêng được quy về việc tìm hàm riêng thoả mãn các điều kiện cho trước. Nếu các trị riêng L_i gián đoạn, ta nói toán tử $\hat{L}$ có phổ trị riêng gián đoạn. Nếu các trị riêng L_i liên tục ta nói toán tử $\hat{L}$ có phổ trị riêng liên tục. Khi toán tử $\hat{L}$ có các trị riêng $L_1, L_2, \dots, L_n, \dots$ tương ứng với các hàm riêng $\psi_1(x), \psi_2(x), \dots, \psi_n(x), \dots$ ta nói các trị riêng L_i không bị suy biến. Nếu một trị riêng L_i tương ứng với nhiều hàm riêng, ta nói trị riêng L_i bị suy biến; giả sử L_i tương ứng với f hàm riêng, ta nói trị riêng L_i suy biến bậc f .

Ví dụ: cho toán tử $\hat{L} = -\frac{d^2}{dx^2}$, hãy tìm hàm riêng và trị riêng của nó với điều kiện biên $0 \leq x \leq d$ và $\psi(0) = \psi(d) = 0$

(Giải: Theo (2.6) ta có: $-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = L\psi(x)$

$$\text{hay } -\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + L\psi(x) = 0$$

$$\text{Đặt } L = k^2, \text{ ta có } -\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0$$

Giải phương trình đặc trưng $t^2 + k^2 = 0 \rightarrow t = \pm ik$ suy ra nghiệm của phương trình có dạng:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} = A_1 (\cos kx + i \sin kx) + B_1 (\cos kx - i \sin kx) \\ &= (A_1 + B_1) \cos kx + i(A_1 - B_1) \sin kx = A \cos kx + B \sin kx \end{aligned}$$

Thay điều kiện biên vào kết quả trên ta có:

$$\psi(0) = 0 \rightarrow A = 0$$

$$\psi(d) = 0 \rightarrow B \sin kd = 0 \rightarrow kd = n\pi \rightarrow k = \frac{n\pi}{d}$$

Vậy hàm riêng của toán tử $-\frac{d^2}{dx^2}$ là $\psi(x) = B \sin(\frac{n\pi}{d}x)$

và trị riêng của $-\frac{d^2}{dx^2}$ là $L_n = k^2 = \frac{n^2\pi^2}{d^2}$

Chú ý: Nếu $\psi(x)$ là hàm riêng của toán tử $\hat{L}$ ứng với trị riêng L_n thì $a\psi_n(x)$ (a – hằng số) cũng là hàm riêng của $\hat{L}$ ứng với cùng trị riêng L_n .

Chứng minh: $\hat{L}\psi_n(x) = L_n\psi_n(x)$

$$\hat{L}(a\psi_n(x)) = a\hat{L}\psi_n(x) = aL_n\psi_n(x)$$

Vậy các hàm riêng chỉ được xác định với độ chính xác tới một hệ số nào đó thôi. Hai hàm số $\psi_n(x)$ và $a\psi_n(x)$ chỉ có giá trị như cùng một hàm riêng – nghĩa là chúng biểu diễn cùng một trạng thái của hạt.

§3. TOÁN TỬ TỰ LIÊN HỢP TUYẾN TÍNH (*Toán tử Hermite*)

1. Định nghĩa

Toán tử $\hat{L}$ gọi là tự liên hợp nếu nó thoả mãn điều kiện sau:

$$\int \psi_1'(x) \hat{L} \psi_2(x) dx = \int \psi_2(x) (\hat{L} \psi_1(x))^* dx \quad (2.7)$$

$dx = dx_1 dx_2 dx_3 \dots$ Tích phân lấy trên toàn miền biến thiên của các biến số $x_1, x_2, x_3, \dots$.

(2.7) có nghĩa là khi toán tử $\hat{L}$ thoả mãn điều kiện $\hat{L} = \hat{L}^*$ thì $\hat{L}$ là toán tử tự liên hợp. Ở đây $\hat{L}^*$ là liên hợp của $\hat{L}$. Ứng với mỗi toán tử $\hat{L}$ có thể có một toán tử $\hat{L}^*$ liên hợp với nó, nếu thoả mãn điều kiện:

$$\int \psi_1^*(x) \hat{L} \psi_2(x) dx = \int (\hat{L}^* \psi_1(x))^* \psi_2(x) dx$$

Chú ý: Nếu $\hat{L}$ thỏa mãn điều kiện $\hat{L} \hat{L}^* = \hat{L}^* \hat{L} = 1$ thì $\hat{L}$ gọi là toán tử Unità (thường kí hiệu bằng chữ U).

$\psi_1(x), \psi_2(x)$ là các hàm số bất kì và thỏa mãn điều kiện bình phương khả tích, nghĩa là

$$\left. \begin{aligned} \int |\psi_1(x) \psi_1^*(x)| dx &= \int |\psi_1(x)|^2 dx < \infty \\ \int |\psi_2(x) \psi_2^*(x)| dx &= \int |\psi_2(x)|^2 dx < \infty \end{aligned} \right\} \quad (2.8)$$

Các tích phân này lấy trên toàn miền biến thiên của các biến số, (2.8) có nghĩa là $\psi_1(x), \psi_2(x)$ tiến tới 0 rất nhanh tại miền giới hạn.

2. Định lí

Trị riêng của của các toán tử tự liên hợp là thực.

Chứng minh: chọn một hàm riêng bất kì $\psi_n(x)$ trong số các hàm riêng của toán tử $\hat{L}$, ta có:

Theo phương trình trị riêng $\hat{L} \psi_n(x) = L_n \psi_n(x)$
ta có
$$\int \psi_n^*(x) \hat{L} \psi_n(x) dx = L_n \int \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx \quad (1)$$

Theo định nghĩa của toán tử liên hợp, ta có

$$\int \psi_n^*(x) \hat{L} \psi_n(x) dx = \int \psi_n(x) \hat{L}^* \psi_n^*(x) dx = L_n^* \int \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx \quad (2)$$

So sánh (1) và (2) ta thấy $L_n = L_n^*$, vậy L_n là thực.

3. Ví dụ

* $\hat{L} = x \rightarrow \hat{L}^* = x^*$ nếu x là thực thì $x = x^*$, nghĩa là

$$\int \psi_1^*(x) \hat{L} \psi_2(x) dx = \int x \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx = \int (x \psi_1(x))^* \psi_2(x) dx$$

Ta thấy, ở đây (2.7) được thỏa mãn, vậy toán tử $\hat{x}$ – toán tử của các biến số độc lập, là toán tử tự liên hợp.

$$* \quad \hat{L} = \frac{1}{i} \frac{d}{dx} \rightarrow \hat{L}^* = -\frac{1}{i} \frac{d}{dx}$$

$$\begin{aligned}\int \psi_1^*(x) \hat{L} \psi_2(x) dx &= \frac{1}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \frac{d}{dx} \psi_2(x) dx \\ &= \frac{1}{i} \left[\psi_1^*(x) \psi_2(x) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{i} \frac{d\psi_1^*(x)}{dx} \psi_2(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{L} \psi_1(x))^* \psi_2(x) dx\end{aligned}$$

$$\left[\frac{1}{i} \psi_1^*(x) \psi_2(x) \right]_{-\infty}^{+\infty} = 0 \text{ (vì } \psi_1(x) \text{ và } \psi_2(x) \text{ thoả mãn điều kiện bình phương}$$

khả tích). Vậy toán tử $\frac{1}{i} \frac{d}{dx}$ là tự liên hợp.

$$* \quad \hat{L} = -\frac{d^2}{dx^2} \rightarrow \hat{L}^* = -\frac{d^2}{dx^2}$$

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \hat{L} \psi_2(x) dx &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \frac{d^2 \psi_2(x)}{dx^2} dx \\ &= - \left[\psi_1^* \frac{d\psi_2}{dx} \right]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^2 \psi_1^*(x)}{dx^2} \frac{d\psi_2(x)}{dx} dx \\ &= \left[\frac{d\psi_1^*}{dx} \psi_2(x) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^2 \psi_1^*(x)}{dx^2} \psi_2(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{L} \psi_1(x))^* \psi_2(x) dx\end{aligned}$$

Vậy toán tử $-\frac{d^2}{dx^2}$ là tự liên hợp.

§4. NHỮNG TÍNH CHẤT CƠ BẢN CỦA HÀM RIÊNG

1. Tính chất 1

Hai hàm riêng $\psi_m(x)$ và $\psi_n(x)$ tương ứng với các trị riêng L_m và L_n của toán tử Hermite (tự liên hợp) là hệ trực chuẩn, nghĩa là

$$\int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn} \quad \begin{cases} = 0 \text{ nếu } m \neq n \\ = 1 \text{ nếu } m = n \end{cases} \quad (2.9)$$

δ_{mn} là kí hiệu Kronecker

Chúng minh (2.9):

a. Đối với phổ gián đoạn

$$* \text{ Trường hợp trực giao: } \int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = 0 \quad (2.10)$$

Theo phương trình trị riêng:

$$\hat{L} \psi_m(x) = L_m \psi_m(x)$$

$$\hat{L} \psi_n(x) = L_n \psi_n(x)$$

Giả thiết $L_m \neq L_n$ vì $\hat{L}$ là tự liên hợp nên $L_m = L_m^*$; $L_n = L_n^*$. Kết hợp với tính chất của toán tử tự liên hợp ta có:

$$\int \psi_m^*(x) \hat{L} \psi_n(x) dx = L_n \int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \int \psi_m^*(x) \hat{L} \psi_n(x) dx &= \int (\hat{L} \psi_m^*(x))^* \psi_n(x) dx \\ &= L_m^* \int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = L_m \int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx \end{aligned} \quad (2)$$

$$\text{Từ (1) và (2) rút ra: } (L_n - L_m) \int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = 0$$

$$\text{Vì } L_n \neq L_m \text{ nên } \int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = 0$$

$$* \text{ Trường hợp chuẩn hoá: } \int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = 1 \quad (2.11)$$

Đối với phổ gián đoạn các hàm riêng $\psi_m(x)$ và $\psi_n(x)$ luôn luôn bình phương khả tích, do đó chúng có thể được chuẩn hoá tới đơn vị.

Ví dụ đối với các hàm số $\sin n\varphi$ và $\cos n\varphi$, vì

$\int_{-\pi}^{\pi} \sin^2 n\varphi d\varphi = \int_{-\pi}^{\pi} \cos^2 n\varphi d\varphi = \pi$ do đó nếu nhân các hàm số $\sin n\varphi$ và $\cos n\varphi$ với hệ số $\frac{1}{\sqrt{\pi}}$ thì các hàm số $\frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin n\varphi$, $\frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos n\varphi$ sẽ được chuẩn hoá, nghĩa là:

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin^2 n\varphi d\varphi = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos^2 n\varphi d\varphi = 1$$

Tóm lại, giả sử λ là hằng số chuẩn hoá thì:

$$|\lambda|^2 \int \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = 1 \rightarrow |\lambda| = \frac{1}{\sqrt{\int \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx}} \quad (2.12)$$

Vậy để chuyển hàm chưa chuẩn hoá $\psi_n(x)$ thành hàm chuẩn hoá $\varphi_n(x)$ thì nhân hệ số chuẩn hoá với hàm chưa chuẩn hoá, nghĩa là:

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\int \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx}} \psi_n(x)$$

* Trường hợp trị riêng suy biến: Nếu trị riêng L_n suy biến, giả sử suy biến bậc f , tức L_n tương ứng với f hàm riêng $\psi_{nk}(x)$ ($k = 1, 2, \dots, f$). Ta cần đưa hệ các hàm số $\psi_{nk}(x)$ về hệ trực chuẩn $\varphi_{nk}(x)$ thoả mãn điều kiện:

$$\int \varphi_{nk}^*(x) \varphi_{nk}(x) dx = \delta_{k,k'} \quad (2.13)$$

Tức là các hàm số có cùng chỉ số n thì trực giao với nhau và trực giao với bất kì một hàm số nào khác có chỉ số m . Ở đây coi điều kiện (2.9) luôn luôn được thoả mãn.

Trong trường hợp tổng quát phải coi m và n không phải chỉ là một chỉ số mà là tập hợp các chỉ số đặc trưng cho hàm riêng, ví dụ thay cho m là m và k' , thay cho n là n và k .

b. Đối với phổ liên tục

Khi toán tử $\hat{L}$ có phổ trị riêng liên tục thì các hàm số phụ thuộc vào giá trị L như là phụ thuộc vào tham số, nên có thể viết:

$$\psi_L(x) = \psi(x, L) \quad (2.14)$$

Các tính chất trực chuẩn của hàm riêng thuộc phổ liên tục có thể được biểu diễn nhờ hàm số Dirac, hàm số này có các tính chất sau:

$$\int_a^b f(L') \delta(L' - L) dL' \begin{cases} = 0 \text{ nếu } L \text{ nằm ngoài khoảng } (a, b) \\ = f(L) \text{ nếu } L \text{ nằm trong khoảng } (a, b) \end{cases} \quad (2.15)$$

Ở đây $f(L')$ là hàm bất kì. Có thể chứng minh rằng hàm số có phổ liên tục $\psi(x, L)$ có thể được chuẩn hoá, sao cho

$$\int \psi^*(x, L') \psi(x, L) dx = \delta(L' - L) \quad (2.16)$$

Đẳng thức này tương tự như (2.9), vì từ (2.15) suy ra, khi đặt $f(L') = 1$ thì $\delta(L' - L) = 0$ khắp mọi nơi, trừ điểm $L' = L$, ở đây δ tiến đến vô cùng. Như thế, kí hiệu $\delta(L' - L)$ đóng vai trò như kí hiệu δ_{mn} trong trường hợp phổ gián đoạn.

2. Tính chất 2

Hệ các hàm riêng của các toán tử tự liên hợp không những là hệ trực chuẩn mà còn là hệ đầy đủ (điều này đã được chứng minh trong toán học). Tính chất này cho phép biểu diễn một hàm số bất kì, cũng xác định trong miền biến thiên của các biến số và tuân theo cùng một loại điều kiện biên, dưới dạng chuỗi của các hàm riêng đó

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x) \quad (2.17)$$

Nhờ tính chất trực chuẩn của $\psi_n(x)$ ta có thể xác định được các hệ số c_n trong biểu thức trên. Nhân 2 vế (2.17) với $\psi_m^*(x)$ và lấy tích phân trong toàn không gian:

$$\int \psi_m^*(x) \psi(x) dx = \sum_n c_n \int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \sum_n c_n \delta_{mn} = c_m$$

$$\text{Vậy, nếu thay chỉ số } m = n \text{ thì } c_n = \int \psi_n^*(x) \psi(x) dx \quad (2.18)$$

Do đó, nếu biết $\psi(x)$ và hệ các hàm số trực chuẩn $\psi_n(x)$ có thể tìm được tất cả các hệ số c_n trong (2.17).

Trong trường hợp phổ liên tục, ta có thể khai triển hàm số $\psi(x)$ theo tích phân, tương tự như tích phân Fourier

$$\psi(x) = \int c(L) \psi(x, L) dL \quad (2.19)$$

Để tìm các hệ số $c(L)$ ta nhân (2.19) với $\psi^*(x, L')$ và lấy tích phân theo x

$$\int \psi^*(x, L') \psi(x) dx = \int c(L) dL \int \psi^*(x, L') \psi(x, L) dx = \int \delta(L' - L) c(L) dL = c(L')$$

$$\text{Thay kí hiệu } L' = L, \text{ ta có : } c(L) = \int \psi^*(x, L) \psi(x) dx \quad (2.20)$$

§5. ĐIỀU KIỆN KHẢ DĨ ĐỂ HAI TOÁN TỬ CÓ CHUNG HÀM RIÊNG

Cho hai toán tử $\hat{N}$ và $\hat{M}$ có các trị riêng không suy biến. Giả sử $\hat{N}$ có trị riêng N_n ứng với hàm riêng $\psi_n(x)$ và $\hat{M}$ có trị riêng M_m ứng với hàm riêng $\psi_m(x)$.

Điều kiện cần và đủ để $\hat{N}$ và $\hat{M}$ có chung hàm riêng là các toán tử $\hat{N}$ và $\hat{M}$ phải giao hoán với nhau

$$[\hat{N}, \hat{M}] = 0 \quad (2.21)$$

Chứng minh:

– Điều kiện cần: $\hat{N}$ và $\hat{M}$ có chung hàm riêng thì $\hat{N}$ giao hoán với $\hat{M}$.

Giả sử $\psi_n(x)$ là hàm riêng chung cho cả $\hat{N}$ và $\hat{M}$, ta có:

$$\hat{N}\psi_n(x) = N_n\psi_n(x) \rightarrow \hat{M}(\hat{N}\psi_n(x)) = \hat{M}N_n\psi_n(x) = N_n\hat{M}\psi_n(x)$$

$$\hat{M}\psi_n(x) = M_n\psi_n(x) \rightarrow \hat{N}(\hat{M}\psi_n(x)) = \hat{N}M_n\psi_n(x) = M_n\hat{N}\psi_n(x)$$

$$\text{Vậy} \quad (\hat{N}\hat{M} - \hat{M}\hat{N})\psi_n(x) = 0 \Rightarrow \hat{N}\hat{M} - \hat{M}\hat{N} = 0$$

– Điều kiện đủ: $\hat{N}$ giao hoán với $\hat{M}$ thì chúng có chung hàm riêng.

Giả sử $\psi_n(x)$ là hàm riêng của toán tử $\hat{N}$, tức là $\hat{N}\psi_n(x) = N_n\psi_n(x)$ ta cần chứng minh $\psi_n(x)$ cũng là hàm riêng của toán tử $\hat{M}$, tức là:

$$\hat{M}\psi_n(x) = M_n\psi_n(x)$$

$$\text{vì} \quad \hat{N}\hat{M} = \hat{M}\hat{N}, \text{ nên } \hat{N}\hat{M}\psi_n(x) = \hat{M}\hat{N}\psi_n(x) = N_n(\hat{M}\psi_n(x))$$

Kết quả này chứng tỏ $\hat{M}\psi_n(x)$ cũng là hàm riêng của toán tử $\hat{N}$ ứng với trị riêng N_n . Theo giả thiết N_n không suy biến nên hàm số $\hat{M}\psi_n(x)$ chỉ khác hàm số $\psi_n(x)$ một hệ số nào đó thôi, kí hiệu hệ số đó là M_n thì rõ ràng $\hat{M}\psi_n(x) = M_n\psi_n(x)$. Vậy $\psi_n(x)$ cũng là hàm riêng của toán tử $\hat{M}$.

Chương 3

CÁC ĐẠI LƯỢNG CƠ HỌC LƯỢNG TỬ VÀ TOÁN TỬ

§1. NGUYÊN LÝ TƯƠNG ỨNG. CÁC TIÊN ĐỀ CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

1. Nguyên lý tương ứng

Trong cơ học cổ điển, để đặc trưng cho chuyển động của vật người ta dùng các đại lượng như toạ độ, xung lượng, momen xung lượng, năng lượng, ... Các đại lượng đó được gọi chung là các biến số động lực. Giữa các đại lượng đó có hàng loạt các hệ thức liên hệ với nhau. Ví dụ, năng lượng có thể biểu diễn qua xung lượng và hàm toạ độ

$$E = \frac{1}{2m} (P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) + U(x, y, z)$$

Hay các thành phần của momen xung lượng có thể biểu diễn qua các thành phần của toạ độ và xung lượng

$$M_x = yP_z - zP_y, \dots$$

Chùng nào mà cơ học lượng tử được xây dựng một cách tương tự như cơ học cổ điển thì nó cũng dùng các đại lượng vật lý tương tự như cơ học cổ điển, nghĩa là các đại lượng ấy vẫn giữ khái niệm, tính chất và ý nghĩa như các đại lượng cổ điển. Tuy nhiên có điều khác nhau là trong cơ học cổ điển tại thời điểm cho trước các đại lượng có giá trị hoàn toàn xác định, còn trong cơ học lượng tử chúng chỉ được xác định với một xác suất nào đó thôi. đồng thời các biến số động lực trong cơ học lượng tử được biểu diễn bằng một công cụ toán học mới, đó là toán tử. Các toán tử trong cơ học lượng tử tuân theo nguyên lý tương ứng như sau:

Giữa các toán tử biểu diễn các đại lượng vật lý trong cơ học lượng tử cũng có các hệ thức liên hệ như giữa các đại lượng trong vật lý cổ điển.

2. Các tiên đề của cơ học lượng tử

– Tiên đề 1: *Mỗi đại lượng cơ học lượng tử (sau đây gọi tắt là đại lượng lượng tử) được biểu diễn bởi một toán tử tự liên hợp tuyến tính xác định.*

– Tiên đề 2: *Nếu mỗi lần đo một đại lượng nào đó thu được một giá trị L xác định thì giữa toán tử $\hat{L}$ biểu diễn đại lượng đó, hàm sóng Ψ biểu diễn trạng thái của hệ và giá trị L liên hệ với nhau bằng hệ thức (1.6):*

$$\hat{L}\Psi = L\Psi$$

Nói cách khác, mỗi đại lượng lượng tử không thể nhận bất kì giá trị nào mà nó chỉ có thể nhận những giá trị là trị riêng của toán tử biểu diễn nó. Tính đơn trị ở đây rất quan trọng vì hạt có thể nằm ở các trạng thái, trong đó khi đo một đại lượng nào đó có thể không chỉ thu được một giá trị mà lại thu được nhiều giá trị khác nhau, mỗi giá trị đó có một xác suất riêng.

– Tiên đề phụ: *Tập hợp các giá trị thu được khi đo một đại lượng nào đó tạo thành phổ trị riêng của toán tử biểu diễn nó.*

– Tiên đề 3: Giả sử một đại lượng được biểu diễn bởi toán tử $\hat{L}$ có các trị riêng $L_1, L_2, \dots, L_n, \dots$ tương ứng với các hàm riêng $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n, \dots$ dựa vào tính chất đầy đủ và trực giao của hệ các hàm riêng Ψ_n có thể khai triển hàm Ψ bất kì thành tổ hợp tuyến tính của các hàm riêng Ψ_n

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n$$

Vậy, khi hệ ở trạng thái bất kì được biểu diễn bằng hàm Ψ thì xác suất để đại lượng L nhận L_n làm trị riêng là $W_n = |c_n|^2 = c_n^* c_n$. Nếu Ψ trùng với Ψ_n , tức $c_n = 1$ do đó $|c_n|^2 = 1$, thì xác suất để L nhận L_n bằng 1 (100%).

§2. GIÁ TRỊ TRUNG BÌNH VÀ ĐỘ LỆCH TOÀN PHƯƠNG TRUNG BÌNH

1. Giá trị trung bình

“Giá trị trung bình” thường dùng với hai ý nghĩa:

– Ví dụ đo độ dài trung bình của một vật nào đó, khi đo nhiều lần thì giá trị trung bình sẽ gần với giá trị thực.

– Giả sử đo chiều cao trung bình của một nhóm người nào đó.

Trong cơ học lượng tử người ta dùng giá trị trung bình với ý nghĩa thứ hai này (trong toán học gọi là sự kì vọng).

Xét một hạt chuyển động trạng thái của nó được biểu diễn bởi hàm sóng $\psi^*(\vec{r}, t)$. Giá trị trung bình của hàm số $F(x, y, z)$ đối với toạ độ của hạt và giá trị trung bình của hàm số $F(P_x, P_y, P_z)$ đối với xung lượng của hạt, theo định nghĩa giá trị trung bình của đại lượng ngẫu nhiên trong lý thuyết xác suất, là:

$$\overline{F(x, y, z)} = \int F(x, y, z) |\Psi(x, y, z)|^2 dx dy dz \quad (3.1)$$

với điều kiện $\int |\Psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = 1$

$$\overline{F(P_x, P_y, P_z)} = \int (P_x, P_y, P_z) |\Psi(P_x, P_y, P_z)|^2 dP_x dP_y dP_z \quad (3.2)$$

với điều kiện $\int |\Psi(P_x, P_y, P_z)|^2 dP_x dP_y dP_z = 1$

Tư tưởng chủ đạo của việc ứng dụng toán tử trong cơ học lượng tử là mỗi đại lượng lượng tử được biểu diễn bằng một toán tử tự liên hợp tuyến tính, điều này có thể kí hiệu một cách tượng trưng $L \rightarrow \hat{L}$.

Nếu trong cơ học cổ điển một đại lượng nào đó là hàm số của toạ độ và xung lượng $L = L(\vec{r}, \vec{p})$ thì toán tử $\hat{L}(\vec{r}, \vec{p})$ sẽ biểu diễn các đại lượng lượng tử với các tính chất tương tự như các đại lượng cổ điển. Dĩ nhiên không phải mọi toán tử tự liên hợp được cấu tạo từ $\vec{r}$ và $\vec{p}$ đều biểu diễn các đại lượng có ý nghĩa đơn giản và tuân theo các quy tắc đơn giản như các đại lượng cổ điển. Mối liên hệ giữa các toán tử và các đại lượng đó sẽ được thiết lập nhờ công thức tính giá trị trung bình $\bar{L}$ của một tập hợp (hạt) ở trạng thái được biểu diễn bởi hàm sóng Ψ

$$\bar{L} = \int \Psi^* \hat{L} \Psi dv \quad (3.3)$$

Ở đây tích phân được lấy trên toàn miền biến thiên của các biến số. Ψ^*, Ψ là các hàm chuẩn hoá. Rõ ràng (3.1) và (3.2) là các trường hợp riêng của (3.3), nếu đặt $\hat{L} = F(x, y, z)$ và $\hat{L} = F(p_x, p_y, p_z)$ với $dv = dx dy dz$.

Trên cơ sở các tính chất của toán tử tự liên hợp, ta có:

$$L^* = \int \Psi \hat{L} \Psi^* dv \quad (3.3')$$

Chúng ta có $L = \bar{L}$, nghĩa là giá trị trung bình của toán tử tự liên hợp là trị thực.

2. Độ lệch toàn phương trung bình

Nói chung, đại lượng $\Delta L = (L - \bar{L}) \neq 0$ nhưng do L dao động về cả hai phía đối với $\bar{L}$, nên có thể dự đoán có trường hợp $\Delta L = 0$, thật vậy:

$$\overline{\Delta L} = \int \Psi^* \hat{L} \Psi dv = \int \Psi^* (\hat{L} - \bar{L}) \Psi dv = \int \Psi^* \hat{L} \Psi dv - \int \Psi^* \bar{L} \Psi dv = 0$$

Do đó không thể lấy đại lượng $\Delta L = L - \bar{L}$ để đặc trưng cho độ lệch đối với L , vì $\overline{\Delta L}$ có thể bằng 0 mà không phụ thuộc vào việc độ lệch đó lớn hay bé. Từ đó người ta lấy $\overline{\Delta L^2} > 0$ làm đại lượng đặc trưng cho độ lệch đối với giá trị trung bình. Vì $\overline{\Delta L^2} \geq 0$ nên nó chỉ có thể tiến tới 0 trong trường hợp chính bản thân nó bằng 0. Nói khác đi độ lệch đó lớn hay bé khi các giá trị $L - \bar{L}$ có xác suất lớn hay bé.

Người ta gọi $\sqrt{\overline{\Delta L^2}} = \sqrt{\overline{(L - \bar{L})^2}}$ là thăng giáng toàn phương trung bình của đại lượng L .

$$\text{Ta thấy } \overline{(\Delta L)^2} = \overline{L^2 - 2L\bar{L} + (\bar{L})^2} = \overline{L^2} - 2(\bar{L})^2 + (\bar{L})^2$$

$$\text{Vậy } \overline{\Delta L^2} = \overline{L^2} - (\bar{L})^2 \quad (3.4)$$

§3. PHƯƠNG PHÁP XÁC ĐỊNH GIÁ TRỊ ĐO CÁC ĐẠI LƯỢNG VẬT LÝ

1. Khi đo một đại lượng L nào đó đối với hạt ở trạng thái, được mô tả bằng hàm sóng là hàm riêng của toán tử $\hat{L}$, thì giá trị đo được là hoàn toàn xác định. Ngược lại, khi đo đại lượng L ở trạng thái được mô tả bằng hàm sóng không phải là hàm riêng của toán tử $\hat{L}$ thì giá trị thu được sẽ không hoàn toàn xác định.

Thật vậy, giả sử toán tử $\hat{L}$ có các hàm riêng là $\Psi_1, \Psi_2, \dots$ tương ứng với các trị riêng $L_1, L_2, \dots$ theo phương trình trị riêng ta có:

$$\hat{L}\Psi_1 = L_1\Psi_1; \hat{L}\Psi_2 = L_2\Psi_2, \dots$$

Tức là khi đo L ở trạng thái Ψ_1 sẽ thu được giá trị xác định L_1 , và khi đo L ở trạng thái Ψ_2 sẽ thu được giá trị xác định L_2 , ... Nhưng theo nguyên lý chồng chất trạng thái thì hạt cũng có thể nằm ở trạng thái được biểu diễn bởi hàm Ψ là tổ hợp tuyến tính của các hàm riêng $\Psi_1, \Psi_2, \dots$

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + \dots$$

Rõ ràng ở đây ψ không phải là hàm riêng của toán tử $\hat{L}$, vì:

$$\hat{L}\Psi = \hat{L}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + \dots) = c_1\hat{L}_1\Psi_1 + c_2\hat{L}_2\Psi_2 + \dots \neq L\Psi$$

2. Khi hạt ở trạng thái được biểu diễn bởi hàm Ψ là tổ hợp tuyến tính của các hàm riêng của toán tử $\hat{L}$ thì đại lượng L trong trường hợp này sẽ không có giá trị xác định. Điều đó có nghĩa là: Nếu tưởng tượng có một tập hợp gồm một số lớn các hạt đồng nhất đều nằm trong cùng một trạng thái được biểu diễn bằng hàm Ψ , thì khi đo đại lượng L , nói chung, sẽ thu được các giá trị khác nhau: trong một số trường hợp sẽ thu được giá trị L_1 , trong một số trường hợp sẽ thu được giá trị $L_2, \dots$. Tuy nhiên nếu phép đo được tiến hành rất nhiều lần thì sẽ thu được một sự thống kê xác định giá trị đó. Vậy, trong trường hợp này tuy đại lượng L không có giá trị xác định, nhưng có thể chỉ ra một xác suất xác định tức là phép đo hoặc cho L_1 , hoặc cho $L_2, \dots$. Dưới đây ta sẽ tính các xác suất đó. Theo công thức tính trị trung bình (3.3):

$$\bar{L} = \int \Psi^* \hat{L} \Psi dv$$

Khai triển các hàm ψ^* và ψ theo các hàm riêng của toán tử $\hat{L}$ (chú ý ở đây hàm ψ đã chuẩn hoá)

$$\left. \begin{aligned} \Psi &= \sum_k c_k \Psi_k = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 + \dots \\ \Psi^* &= \sum_l c_l^* \Psi_l^* = c_1^* \Psi_1^* + c_2^* \Psi_2^* + \dots \end{aligned} \right\} \quad (3.5)$$

Thay (3.5) vào (3.3) ta có:

$$\begin{aligned} \bar{L} &= \int (c_1^* \Psi_1^* + c_2^* \Psi_2^* + \dots + c_n^* \Psi_n^* + \dots) \hat{L} (c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 + \dots + c_n \Psi_n + \dots) dv \\ &= c_1^* c_1 L_1 \int \Psi_1^* \Psi_1 dv + c_1^* c_2 L_2 \int \Psi_1^* \Psi_2 dv + \dots + c_n^* c_n L_n \int \Psi_n^* \Psi_n dv + \dots \end{aligned}$$

Áp dụng điều kiện trực chuẩn ta thấy: các số hạng khai triển có chỉ số $k \neq j$ thì tích phân bằng 0, còn các số hạng có chỉ số $k = j$ thì tích phân bằng 1, do đó:

$$\bar{L} = c_1^* c_1 L_1 + c_2^* c_2 L_2 + \dots + c_n^* c_n L_n + \dots \quad (3.6)$$

Vì hàm ψ chuẩn hoá, nên:

$$\begin{aligned} 1 &= \int \Psi^* \Psi dv = \int (c_1^* \Psi_1^* + c_2^* \Psi_2^* + \dots + c_n^* \Psi_n^* + \dots)(c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 + \dots + c_n \Psi_n + \dots) dv \\ &= |c_1|^2 + |c_2|^2 + \dots + |c_n|^2 + \dots \end{aligned} \quad (3.7)$$

Đặt $|c_j|^2 = W$ và lưu ý đến (3.7), ta được:

$$\bar{L} = W_1 L_1 + W_2 L_2 + \dots + W_n L_n + \dots = \sum_k W_k L_k \quad (3.8)$$

Kết quả cuối cùng chứng tỏ: Bình phương môđun các hệ số khai triển hàm ψ theo các hàm riêng của $\hat{L}$ đóng vai trò xác suất khi đo đại lượng L .

§4. DẠNG TƯỜNG MINH CỦA MỘT SỐ TOÁN TỬ

1. Toán tử tọa độ

Hàm sóng biểu diễn trạng thái của vi hạt là hàm của tọa độ, mà tọa độ là các biến số độc lập, do đó toán tử của các biến số độc lập chính là các biến số đó. Đồng thời một đại lượng nào đó chỉ làm hàm của các biến số độc lập thì toán tử tương ứng cũng chính là hàm số đó. Nghĩa là khi tác dụng toán tử trên vào hàm số đó thì kết quả thu được chính bằng hàm số này nhân với đại lượng đó. Vậy ta có:

$$\left. \begin{aligned} \hat{x}\Psi &= x\Psi \\ \hat{y}\Psi &= y\Psi \\ \hat{z}\Psi &= z\Psi \end{aligned} \right\} \begin{aligned} \hat{x} &= x \\ \hat{y} &= y \\ \hat{z} &= z \end{aligned} \Rightarrow \hat{\vec{r}} = \vec{r} \quad (3.9)$$

$$\hat{U}(x, y, z)\Psi = U(x, y, z)\Psi \rightarrow \hat{U}(x, y, z) = U(x, y, z) \quad (3.10)$$

2. Toán tử xung lượng

Trước hết ta tìm toán tử $\hat{P}_x$, sau đó suy tương tự cho $\hat{P}_y$ và $\hat{P}_z$. Ta biết hàm sóng của hạt chuyển động tự do có dạng:

$$\Psi(x, y, z, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(Et - xP_x - yP_y - zP_z)}$$

Lấy đạo hàm riêng hàm số này theo x

$$\frac{\partial \Psi(x, y, z, t)}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} P_x A e^{\frac{i}{\hbar}(Et - xP_x - yP_y - zP_z)} = \frac{i}{\hbar} P_x \Psi(x, y, z, t)$$

$$\text{hay: } -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, z, t) = P_x \Psi(x, y, z, t) \quad (3.11)$$

Từ (3.11) ta thấy: P_x là xác định nên $\Psi(x, y, z, t)$ là hàm riêng của toán tử $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, vì $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ tác dụng lên $\Psi(x, y, z, t)$ cho kết quả chính bằng P_x nhân với $\Psi(x, y, z, t)$, vậy

$$\begin{aligned} \text{Tương tự} \quad \left. \begin{aligned} \hat{P}_x &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \\ \hat{P}_y &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \\ \hat{P}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \end{aligned} \right\} \quad \hat{\vec{P}} = -i\hbar \nabla \quad (3.12) \end{aligned}$$

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{k} \right)$$

3. Toán tử momen xung lượng

Theo cơ học cổ điển, ta có:

$$\vec{M} = [\vec{r} \times \vec{p}] \quad \left\{ \begin{aligned} M_x &= yP_z - zP_y \\ M_y &= zP_x - xP_z \\ M_z &= xP_y - yP_x \end{aligned} \right.$$

$$M^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2$$

Trên cơ sở nguyên lý tương ứng giữa cơ học lượng tử và cơ học cổ điển, ta viết được dạng toán tử momen xung lượng:

$$\hat{\mathbf{M}} = [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}] \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{M}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \\ \hat{M}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \\ \hat{M}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \end{array} \right\} \quad (3.14)$$

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2 = -\hbar^2 \left\{ (y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})^2 + (z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z})^2 + (x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})^2 \right\} \quad (3.14')$$

4. Toán tử năng lượng

a. Toán tử động năng

Theo cơ học cổ điển $T = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2)$

Vậy, theo nguyên lý tương ứng $\hat{T} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2)$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad (3.15)$$

b. Toán tử thế năng

Thế năng là hàm của tọa độ, do đó:

$$\hat{U}(x, y, z)\Psi = U(x, y, z)\Psi \rightarrow \hat{U}(x, y, z) = U(x, y, z) \quad (3.16)$$

c. Toán tử năng lượng (toán tử Hamilton)

Theo cơ học cổ điển: $E = \frac{P^2}{2m} + U(x, y, z)$

Vậy, theo nguyên lý tương ứng toán tử năng lượng toàn phần có dạng:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(x, y, z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x, y, z) \quad (3.17)$$

Trong hệ tọa độ cầu biểu thức toán tử Hamilton có dạng:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} + U(r) \quad (3.18)$$

(r, θ, φ là các biến số trong hệ tọa độ cầu, các biến số này liên hệ với các biến số x, y, z trong hệ tọa độ vuông góc: $z = r\cos\theta$; $x = r\sin\theta\cos\varphi$; $y = r\sin\theta\sin\varphi$).

Biểu thức (3.17) không áp dụng được trong trường hợp trường ngoài phụ thuộc vào vận tốc.

Toán tử Hamilton $\hat{H}$ là toán tử quan trọng nhất của cơ học lượng tử vì mọi bài toán trong cơ học lượng tử cuối cùng đều quy về việc tìm hàm riêng và trị riêng của toán tử $\hat{H}$.

§5. ĐIỀU KIỆN KHẢ DĨ ĐỂ HAI ĐẠI LƯỢNG VẬT LÍ CÓ GIÁ TRỊ ĐỒNG THỜI XÁC ĐỊNH

Ta xét điều kiện để các đại lượng vật lí có giá trị đồng thời xác định. Đại lượng L sẽ có giá trị hoàn toàn xác định ($\overline{\Delta L^2} = 0$) khi hàm sóng Ψ của hệ là hàm riêng của toán tử $\hat{L}$. Tương tự đại lượng M sẽ có giá trị hoàn toàn xác định khi hàm sóng Ψ của hệ là hàm riêng của toán tử $\hat{M}$. Vậy hai đại lượng L và M sẽ có giá trị đồng thời xác định nếu hàm sóng Ψ của hệ là hàm riêng chung cho cả hai toán tử $\hat{L}$ và $\hat{M}$.

Ta thấy các toán tử thành phần xung lượng $\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z$ sẽ đồng thời thoả mãn các phương trình trị riêng

$$\hat{P}_x \Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = P_x \Psi$$

$$\hat{P}_y \Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial y} = P_y \Psi$$

$$\hat{P}_z \Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial z} = P_z \Psi \quad \text{với} \quad \Psi = e^{\frac{i}{\hbar}(xP_x + yP_y + zP_z)}$$

Ta thấy ở đây Ψ chính là hàm riêng chung của ba toán tử $\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z$, nghĩa là các giá trị hình chiếu của xung lượng trên ba trục tọa độ có giá trị đồng thời xác định.

Ta biết điều kiện cần và đủ để hai toán tử có chung hàm riêng là: Hai toán tử có chung hàm riêng thì chúng giao hoán với nhau, ngược lại

hai toán tử giao hoán với nhau thì chúng có chung hàm riêng (chứng minh xem §5 chương 2)

Một số thí dụ:

$\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z$ có chung hàm riêng do đó chúng giao hoán với nhau

$$\text{Chứng minh: } \hat{P}_y \hat{P}_x \Psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y \partial x}; \quad \hat{P}_x \hat{P}_y \Psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y \partial x}$$

$$\rightarrow \hat{P}_x \hat{P}_y - \hat{P}_y \hat{P}_x = 0$$

$$\text{Tương tự: } \hat{P}_y \hat{P}_z - \hat{P}_z \hat{P}_y = 0; \quad \hat{P}_z \hat{P}_x - \hat{P}_x \hat{P}_z = 0$$

– Toán tử một thành phần tọa độ và toán tử một thành phần xung lượng khác tên thì giao hoán với nhau.

Chứng minh: Ta chọn một cặp bất kì, giả sử $\hat{x}, \hat{P}_y$ sau đó suy tương tự cho các cặp còn lại.

$$\text{Ta có: } \hat{x} \hat{P}_y \Psi = -i\hbar x \frac{\partial \Psi}{\partial y}; \quad \hat{P}_y \hat{x} \Psi = -i\hbar x \frac{\partial \Psi}{\partial y}$$

$$\rightarrow \hat{x} \hat{P}_y - \hat{P}_y \hat{x} = 0$$

Vậy các đại lượng $x, P_y, \dots$ có giá trị đồng thời xác định.

– Toán tử một thành phần tọa độ và toán tử một thành phần xung lượng cùng tên không giao hoán được với nhau:

Chứng minh: ta chọn cặp $\hat{x}, \hat{P}_x$ sau đó suy tương tự cho các cặp còn lại.

$$\text{Ta có: } \hat{x} \hat{P}_x \Psi = -i\hbar x \frac{\partial \Psi}{\partial x};$$

$$\hat{P}_x \hat{x} \Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\Psi) = -i\hbar \Psi - i\hbar x \frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

$$\text{Suy ra: } \hat{x} \hat{P}_x - \hat{P}_x \hat{x} = i\hbar$$

$$\text{tương tự: } \hat{y} \hat{P}_y - \hat{P}_y \hat{y} = i\hbar$$

$$\hat{z} \hat{P}_z - \hat{P}_z \hat{z} = i\hbar$$

Vậy, các thành phần tọa độ và xung lượng cùng tên không có giá trị đồng thời xác định.

Kết luận: Hai đại lượng được biểu diễn bởi các toán tử tương ứng giao hoán được với nhau, sẽ có giá trị đồng thời xác định và do đó, ít nhất về mặt nguyên tắc, chúng có thể đo được đồng thời chính xác. Ngược lại, hai toán tử không giao hoán được với nhau thì các đại lượng tương ứng không có giá trị đồng thời xác định và do đó chúng không thể đo được đồng thời chính xác.

§6. HỆ THỨC BẤT ĐỊNH HEISENBERG

1. Thành lập hệ thức

Trong tiết trước ta đã biết: Đối với một hệ hai đại lượng được biểu diễn bởi các toán tử không giao hoán với nhau thì chúng không có giá trị đồng thời xác định chính xác, nghĩa là, nếu một đại lượng có giá trị hoàn toàn xác định thì đại lượng kia sẽ hoàn toàn bất định. Vậy khi đo đồng thời cả hai đại lượng thì giới hạn độ bất định cho phép là bao nhiêu? Sau đây ta sẽ xét vấn đề đó.

Để đặc trưng cho độ bất định ta dùng đại lượng độ lệch toàn phương trung bình. Xét cặp đại lượng x và P_x sau đó suy kết quả tương tự cho các cặp còn lại. Theo công thức tính độ lệch toàn phương trung bình, ta có:

$$\left. \begin{aligned} \overline{\Delta x^2} &= \overline{x^2} - (\bar{x})^2 \\ \overline{\Delta P_x^2} &= \overline{P_x^2} - (\bar{P}_x)^2 \end{aligned} \right\} \quad (3.19)$$

Các kết luận rút ra sẽ không mất tính tổng quát của nó khi chọn gốc của hệ tọa độ tại điểm $\bar{x}$ (tức là $\bar{x} = 0$) đồng thời giả sử hệ chuyển động với vận tốc $v = \frac{\bar{P}_x}{m}$ thì $\bar{P}_x = 0$.

Từ đó theo (3.19)

$$\left. \begin{aligned} \overline{\Delta x^2} &= \overline{x^2} \\ \overline{\Delta P_x^2} &= \overline{P_x^2} \end{aligned} \right\} \quad (3.20)$$

Mặt khác theo công thức tính giá trị trung bình (3.3), ta có:

$$\overline{\Delta x^2} = \overline{x^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* x^2 \Psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* x^2 \Psi dx \quad (3.21)$$

$$\overline{\Delta P_x^2} = \overline{P_x^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{P}_x^2 \Psi dx = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{d^2 \Psi}{dx^2} dx \quad (3.22)$$

Để thiết lập mối quan hệ giữa $\overline{\Delta x^2}$ và $\overline{\Delta P_x^2}$ người ta dùng tích phân bộ trợ sau:

$$I(\alpha) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \alpha x \Psi + \frac{d\Psi}{dx} \right|^2 dx \geq 0 \quad (3.23)$$

Ở đây α – biến số bộ trợ thực bất kì không phụ thuộc vào x

Khai triển (3.23):

$$\begin{aligned} I(\alpha) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\alpha x \Psi + \frac{d\Psi}{dx} \right) \left(\alpha x^* \Psi^* + \frac{d\Psi^*}{dx} \right) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\alpha^2 x^2 \Psi^* \Psi + \alpha x \left(\Psi^* \frac{d\Psi}{dx} + \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} \right) + \frac{d\Psi^*}{dx} \frac{d\Psi}{dx} \right] dx = \\ &= \alpha^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \Psi^* \Psi dx + \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{d}{dx} (\Psi^* \Psi) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\Psi^*}{dx} \frac{d\Psi}{dx} dx \end{aligned} \quad (3.24)$$

$$\text{Đặt: } A = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \Psi^* \Psi dx = \overline{\Delta x^2} = \overline{x^2}$$

$$B = - \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{d}{dx} (\Psi^* \Psi) dx = - (x \Psi^* \Psi) \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx = 1$$

$$C = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\Psi^*}{dx} \frac{d\Psi}{dx} dx = \left(\Psi^* \frac{d\Psi}{dx} \right) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{d^2 \Psi}{dx^2} dx = \frac{\overline{\Delta P_x^2}}{\hbar^2} = \frac{\overline{P_x^2}}{\hbar^2}$$

(Vì Ψ thoả mãn các điều kiện bình phương khả tích và chuẩn hoá)

Thay các giá trị A, B, C vào (3.23) ta được:

$$I(\alpha) = A\alpha - B\alpha + C \geq 0 \quad (3.25)$$

Đây là tam thức bậc hai đối với α . Muốn cho $I(\alpha) \geq 0$ thì biệt thức của tam thức phải không dương

$$\Delta = B^2 - 4AC \leq 0 \rightarrow B^2 \leq 4AC$$

Ta thấy $A > 0$ được thỏa mãn vì $\Delta = \overline{\Delta x^2} \geq 0$, thay các giá trị A, B, C vào bất đẳng thức

$B^2 \leq 4AC$, ta được:

$$\left. \begin{aligned} 1 < 4\overline{\Delta x^2} \frac{\overline{\Delta P_x^2}}{h^2} \rightarrow \overline{\Delta x^2} \cdot \overline{\Delta P_x^2} &\geq \frac{h^2}{4} \\ \text{tương tự : } \overline{\Delta y^2} \cdot \overline{\Delta P_y^2} &\geq \frac{h^2}{4} \\ \overline{\Delta z^2} \cdot \overline{\Delta P_z^2} &\geq \frac{h^2}{4} \end{aligned} \right\} \quad (3.26)$$

Đây là hệ thức bất định Heisenberg dưới dạng tổng quát và chặt chẽ nhất, nó là một trong những cơ sở quan trọng nhất của cơ học lượng tử.

2. Ý nghĩa của hệ thức

- Từ hệ thức (3.26) ta thấy trong cơ học lượng tử không thể tồn tại những tập hợp lượng tử, trong đó tích giữa các độ lệch toàn phương trung bình của toạ độ và xung lượng tương ứng lại có thể bằng không, nghĩa là hai đại lượng liên hợp chính tắc không thể đồng thời có giá trị hoàn toàn xác định, khi toạ độ x đo được càng chính xác ($\Delta x \rightarrow 0$) thì xung lượng P_x đo được càng kém chính xác ($\Delta P_x \rightarrow \infty$). Vậy trong thế giới vi mô không thể thực hiện được bất kì thí nghiệm nào cho phép đo được đồng thời chính xác hai đại lượng liên hợp chính tắc.

- Mọi sự định vị bất kì của hạt đều dẫn đến sự thay đổi xung lượng (vận tốc thay đổi), tức là toạ độ xác định thì vận tốc sẽ bất định, do đó không thể xác định được quỹ đạo của hạt, vậy khái niệm quỹ đạo chuyển động không còn ý nghĩa trong cơ học lượng tử.

- Hệ thức bất định nêu lên giới hạn chính xác cao nhất đối với phép đo các đại lượng lượng tử, nghĩa là dù cho công cụ đo có tinh xảo hoàn hảo đến đâu thì tích $\Delta x \cdot \Delta P_x$ không thể nhỏ hơn $\frac{h}{2}$. Hệ thức bất định nêu lên giới hạn khi nào có thể giải thích chuyển động của các vi hạt theo lý thuyết cổ điển và ngược lại. Khi nào trong phép đo hoặc phép tính có thể bỏ qua hằng số h (lượng tử tác dụng) thì có thể áp dụng các định luật cổ điển cho

các vi hạt, ngược lại, khi nào không thể bỏ qua lượng tử tác dụng h thì phải giải thích theo các quy luật của cơ học lượng tử.

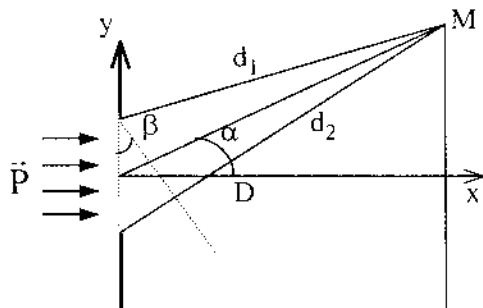
– Từ nguyên lý bất định quan điểm duy tâm cho rằng nguyên lý này đã không phản ánh được tính khách quan của thế giới vi mô. Tính chất đó do các điều kiện đo quy định, từ đó phóng đại vai trò của máy đo và dẫn đến lập luận cho rằng không có máy đo thì cũng không có đối tượng nghiên cứu, nghĩa là thế giới vật chất tồn tại phụ thuộc vào cảm giác của con người.

3. Thí dụ minh hoạ hệ thức bất định

– Giả sử có một chùm hạt chuyển động theo phương Ox đi qua một khe hẹp có bề rộng là Δy .

Trước khi đi qua khe xung lượng của chúng xác định $P = P_x$; $P_y = P_z = 0$.

Lúc qua khe toạ độ của chúng là bất định, ta chỉ biết là các hạt đi qua khe và xác suất toạ độ của chúng tại mọi điểm đều bằng nhau. Do đó độ bất định về toạ độ có thể coi là Δy .



Hình 7

Sau khi qua khe xung lượng của các hạt thay đổi, vì xảy ra nhiễu xạ từ hai phía đối xứng qua khe nên $\bar{P}_y = 0$, do đó có thể chọn $\Delta P_y = P \sin \alpha$.

Ta biết, tại điểm M sẽ có dao động cực đại khi hiệu quang trình

$$d_2 - d_1 = k\lambda = \Delta y \sin \beta \approx \Delta y \tan \beta \approx \Delta y \sin \alpha$$

(Vì khe hẹp nên có thể coi $\beta \approx \alpha$)

$$\left. \begin{array}{l} \text{Vậy} \quad \Delta y = \frac{k\lambda}{\sin \alpha} \\ \Delta P_y = P \sin \alpha \end{array} \right\} \quad \begin{array}{l} \Delta y \Delta P_y = k\lambda P = kh \\ \Delta y \Delta P_y \geq h \\ k = 1, 2, \dots \end{array}$$

– Xác định gián tiếp toạ độ của vi hạt bằng kính hiển vi

Chiếu một chùm ánh sáng có bước sóng λ song song với trục ox vào hạt nằm ở điểm $x = 0$.

Ánh sáng tán xạ sẽ đập vào vật kính. Theo lí thuyết kính hiển vi, vị trí của hạt được xác định với độ chính xác

$$\Delta x \approx \frac{\lambda}{\sin \varepsilon}, \quad 2\varepsilon \text{ là góc nhìn vật.}$$

Ta thấy λ càng nhỏ thì Δx càng nhỏ (toạ độ được xác định càng chính xác).

Tuy nhiên khi tán xạ thì xung lượng của photon thay đổi, hình chiếu của nó trên trục ox thay đổi từ $-P \sin \varepsilon$ đến $+P \sin \varepsilon$. Do đó khi tạo ra một tập hợp hạt có toạ độ nằm trong khoảng Δx nhỏ thì cần phải dùng các photon có năng lượng lớn (P lớn), vì thế Δx càng nhỏ thì ΔP_x càng lớn

$$\Delta x \Delta P_x = \frac{\lambda}{\sin \varepsilon} P \sin \varepsilon = \lambda P = h$$

hay $\Delta x \cdot \Delta P_x \geq h$

– Xác định xung lượng của hạt theo tần số của ánh sáng tán xạ.

Để đơn giản ta xét chuyển động một chiều. Gọi P_x và P'_x là xung lượng của hạt trước và hạt sau va chạm, ω và ω' là tần số của ánh sáng trước và sau va chạm. Theo các định luật bảo toàn năng lượng và bảo toàn xung lượng, ta có:

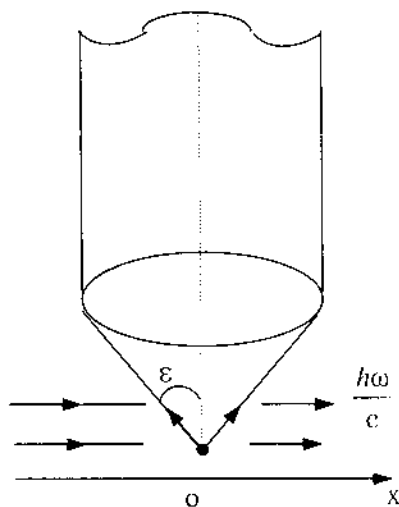
$$h\omega - h\omega' = \frac{1}{2m}(P_x'^2 - P_x^2)$$

$$\frac{h\omega}{c} + \frac{h\omega'}{c} = P'_x - P_x$$

Từ hai phương trình trên rút ra:

$$P_x = mc \frac{\omega - \omega'}{\omega + \omega'} - \frac{h(\omega + \omega')}{2c}$$

$$P'_x = mc \frac{\omega - \omega'}{\omega + \omega'} + \frac{h(\omega + \omega')}{2c}$$



Hình 8

Ta thấy nếu biết ω và ω' thì sẽ xác định được P_x và P_x' nhưng đồng thời ta không biết gì về vị trí của hạt – vị trí tán xạ hoàn toàn không xác định. nó có thể xác định trong khoảng Δx nếu thay cho sóng phẳng đơn sắc ta dùng tín hiệu với bề rộng Δx . Nhưng trong tín hiệu này là bao gồm cả một tập hợp các sóng đơn sắc có số sóng $\Delta k = \frac{\Delta\omega}{c} = \frac{2\pi}{\Delta x}$.

Vì thế xung lượng của hạt chỉ được xác định với độ chính xác

$$\Delta P_x = h\Delta k = h \frac{\Delta\omega}{c} = h \frac{2\pi}{\Delta x}$$

Vậy $\Delta x \cdot \Delta P_x \geq h$

4. Nguyên lí bổ sung

Theo nguyên lí bất định hai đại lượng liên hợp chính tắc không thể đo được đồng thời chính xác vì các toán tử của chúng không giao hoán được với nhau. Ở một trạng thái nào đó một đại lượng có giá trị hoàn toàn xác định thì đại lượng kia sẽ hoàn toàn bất định. Năm 1928 Bohr đưa ra nguyên lí bổ sung như sau:

Coi hai đại lượng liên hợp chính tắc lập thành một cặp bổ sung cho nhau, sự mô tả trạng thái trong cơ học lượng tử tạo thành hai lớp bổ sung cho nhau. Vì trong cơ học lượng tử, để mô tả chuyển động của vi hạt không thể dùng đồng thời tất cả các lượng vật lí như đã dùng trong cơ học cổ điển để mô tả chuyển động của vật. Cụ thể trong cơ học cổ điển để mô tả đầy đủ trạng thái của vật phải biết đồng thời toạ độ và vận tốc của nó tại thời điểm đã cho. Dựa theo các điều kiện ban đầu, phương trình chuyển động cho biết trạng thái của vật tại các thời điểm tiếp theo. Trong cơ học lượng tử sự mô tả như thế về nguyên tắc là không thể được (vì toạ độ và vận tốc tương ứng không có giá trị đồng thời xác định). Thành ra sự mô tả trạng thái trong cơ học lượng tử được thực hiện bằng số đại lượng ít hơn so với sự mô tả cổ điển. Vậy để mô tả đầy đủ hiện tượng vi mô trong cơ học lượng tử cần thiết phải sử dụng tất cả các đại lượng khả dĩ mà chúng có giá trị đồng thời xác định. Các đại lượng đó lập thành một bộ đủ (số đại lượng bằng số bậc tự do). Mặc dù trong cơ học cổ điển để mô tả đầy đủ chuyển động, ngoài các đại lượng đó còn dùng thêm một số đại lượng khác nữa.

Trong bộ đủ các đại lượng nếu có đại lượng này sẽ không có đại lượng kia, chẳng hạn có x sẽ không có P_x , song x cùng với các đại lượng khác sẽ lập thành một bộ đủ khác để mô tả hệ lượng tử. Những thông tin thu được từ đối tượng nghiên cứu trong các điều kiện khác nhau coi như các nguồn thông tin bổ sung cho nhau. Tổ hợp tất cả các thông tin đó thành một bức tranh thống nhất sẽ phản ánh một mặt nào đó về hiện thực khách quan của đối tượng nghiên cứu.

SỰ BIẾN ĐỔI TRẠNG THÁI VÀ CÁC ĐẠI LƯỢNG VẬT LÝ THEO THỜI GIAN

§1. PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

Cho đến nay chúng ta thừa nhận trạng thái của hệ được biểu diễn bởi hàm sóng (2.8):

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})}$$

Khi nghiên cứu chuyển động của hệ trong các trường lực khác nhau người ta vẫn dùng phương trình (2.8) để biểu diễn trạng thái của hệ. Đến đây vấn đề đặt ra là cần tìm hàm sóng đó, đồng thời cần nghiên cứu sự biến đổi của hàm sóng và các đại lượng vật lý theo thời gian. Trước đây ta mới chỉ nghiên cứu sự phụ thuộc của hàm sóng vào tọa độ, và các toán tử đã xét chỉ bao gồm các tọa độ và các hàm theo tọa độ.

1. Phương trình Schrodinger đối với hạt chuyển động tự do

Trong trường hợp chuyển động không tương đối ($v \ll c$) năng lượng của hạt chuyển động tự do liên hệ với xung lượng bằng hệ thức:

$$E = T = \frac{p^2}{2m} \quad (4.1)$$

Lấy đạo hàm bậc nhất của (2.8) theo thời gian, ta được:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi \rightarrow i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E \Psi \quad (4.2)$$

Lấy đạo hàm bậc hai của (2.8) theo tọa độ, ta được:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi = \nabla^2 \Psi = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi \quad (4.3)$$

Kết hợp các phương trình (4.1), (4.2) và (4.3), ta được

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \Delta \Psi \quad \text{hay} \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi \quad (4.4)$$

(4.4) là phương trình tuyến tính đối với Ψ và Ψ chính là nghiệm của nó, tổ hợp tuyến tính các hàm Ψ cũng là nghiệm của phương trình Schrodinger. dĩ nhiên không phải mọi nghiệm của (4.4) đều là hàm sóng, chỉ những nghiệm nào thoả mãn các đòi hỏi của hàm sóng thì mới là hàm sóng. Trong các nghiệm của (4.4) có những nghiệm phụ thuộc vào thời gian bằng thừa số đơn sắc $e^{-iEt/\hbar}$, do đó có thể tách Ψ thành hai phần:

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z) e^{-iEt/\hbar} \quad (4.5)$$

Thay (4.5) vào (4.4), ta được:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z) \quad (4.6)$$

Phương trình (4.6) chỉ phụ thuộc vào tọa độ và nghiệm của nó là hàm tọa độ.

2. Tiên đề về phương trình Schrodinger tổng quát

Trong phương trình (4.4) yếu tố $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ chính là toán tử năng lượng của hạt chuyển động tự do. Đối với hạt chuyển động tự do thì năng lượng E chính bằng động năng T của hạt, do đó $\hat{H} = \hat{T}$ nên phương trình (4.4) có thể viết dưới dạng

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

Ta thừa nhận làm tiên đề *phương trình của hạt chuyển động tự do cũng đúng cho hạt (hay hệ hạt) chuyển động trong trường lực.*

Trường hợp hạt chuyển động trong trường thế năng, ta có:

$$E = T(\vec{p}) + U(\vec{r}) \rightarrow \hat{H} = \hat{T}(\vec{p}) + U(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r})$$

Vậy phương trình Schrodinger tổng quát có dạng :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right\} \Psi \quad (4.7)$$

(4.7) là phương trình cơ bản trong cơ học lượng tử (tương tự như phương trình Newton trong cơ học cổ điển). Cũng như nhiều phương trình vật lý cơ bản khác, phương trình Schrodinger không được chứng minh, song tính chất đúng đắn của nó được xác nhận bằng các kết quả rút ra từ phương trình này phù hợp với thực nghiệm.

Ở các trạng thái năng lượng có giá trị xác định thì hàm sóng diễn tả trạng thái có dạng (4.5). Thay (4.5) vào (4.7) ta được:

$$H\Psi(x, y, z) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right\} \Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z) \quad (4.8)$$

Đó là phương trình trị riêng của năng lượng. Trạng thái, trong đó năng lượng có giá trị xác định gọi là trạng thái dừng và phương trình Schrodinger tương ứng gọi là phương trình dừng. Vậy khi giải các bài toán trong trường lực không phụ thuộc thời gian trước hết ta tìm nghiệm $\Psi(x, y, z)$ theo (4.8), sau đó ghép nghiệm này với thừa số đơn sắc $e^{-iEt/\hbar}$ sẽ được nghiệm tổng quát $\Psi(\mathbf{r}, t)$.

Ta thấy (4.7) là phương trình tổng quát, còn (4.8) là trường hợp riêng của (4.7) vì mọi nghiệm của phương trình (4.8) đều thoả mãn phương trình (4.7), ngược lại không phải nghiệm nào của (4.7) cũng thoả mãn (4.8). Ngoài các trạng thái dừng, phương trình Schrodinger tổng quát còn thừa nhận những hàm sóng biểu diễn sự chồng chất các trạng thái dừng cũng là nghiệm của nó.

3. Chú thích

Nếu Ψ^* là liên hợp phức của Ψ , ta có:

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \hat{H}\Psi^* \quad (4.9)$$

Phương trình Schrodinger là phương trình vi phân đạo hàm riêng, nên các nghiệm của nó sẽ thoả mãn các điều kiện ban đầu và điều kiện

biên của bài toán đã cho. Đó là phương trình vi phân bậc nhất đối với thời gian nên chỉ cần một điều kiện ban đầu là đủ (ví dụ nếu biết $\Psi(\vec{r}, 0)$ thì có thể xác định được $\Psi(\vec{r}, t)$).

Một khác nghiệm Ψ của phương trình Schrodinger tổng quát cũng thoả mãn điều kiện chuẩn hoá $\int \Psi^* \Psi dv = 1$, nghĩa là $\Psi^* \Psi$ phải biểu diễn mật độ xác suất tìm thấy hạt. Do đó, sự giải thích thống kê của hàm sóng vẫn giữ nguyên ý nghĩa đối với các nghiệm của phương trình Schrodinger.

§2. MẬT ĐỘ XÁC SUẤT VÀ MẬT ĐỘ DÒNG XÁC SUẤT

Nói chung hàm sóng thay đổi theo thời gian và không gian, nhưng đó không phải là sự thay đổi bất kỳ mà tuân theo một quy luật nào đó. Cụ thể là tồn tại một định luật bảo toàn nào đó. Trong thuỷ động lực học và điện động lực học cổ điển có tồn tại phương trình liên tục

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0$$

Trong đó: ρ – Mật độ chất lỏng (hay mật độ điện tích)

$\vec{j}$ – Mật độ dòng chất lỏng (hay mật độ dòng điện)

Ta sẽ thấy rằng trong cơ học lượng tử cũng tồn tại một phương trình liên tục (và phương trình này cũng biểu thị một định luật bảo toàn nào đó).

Theo cách giải thích thống kê của hàm sóng, nếu biết hàm sóng tại một thời điểm nào đó thì sẽ biết xác suất tìm thấy hạt ứng với thời điểm đó. Có thể cụ thể hoá cách đoán nhận thống kê hàm sóng như sau: Giả sử có một tập hợp gồm N hạt ($N \gg 1$) tất cả đều nằm trong một trạng thái và không tương tác với nhau.

Vì $\Psi^* \Psi dv$ là xác suất để thấy hạt trong thể tích dv nên $N \Psi^* \Psi dv$ là số trung bình hạt trong thể tích dv và $N \Psi^* \Psi$ là mật độ trung bình hạt trong thể tích dv .

Tính mật độ này cho một số lớn các điểm ta sẽ biết được sự phân bố mật độ trong không gian tại thời điểm t nào đó. Giả sử mỗi hạt mang điện tích là e thì $eN\Psi^*\Psi$ sẽ là mật độ trung bình điện tích và do đó sẽ biết được sự phân bố mật độ điện tích, hơn nữa dựa vào phương trình Schrodinger sẽ biết được sự phụ thuộc mật độ vào thời gian.

Ngoài sự phân bố mật độ ra, có thể biết rõ hơn về chuyển động của hạt nếu biết số trung bình hạt trong một đơn vị thời gian đi qua một đơn vị diện tích đặt tại một điểm bất trước chiều dương pháp tuyến của nó. Để đi tới mục đích này ta nhận xét rằng : chừng nào Ψ còn là hàm liên tục của tọa độ thì $\Psi^*\Psi$ có thể được dùng để diễn tả mật độ của một chất lỏng tương tượng chiếm toàn bộ không gian, có thể gọi là chất lỏng xác suất. Chất lỏng này thoả mãn định luật bảo toàn vì lượng của một chất lỏng tổng quát, nghĩa là $\int \Psi^*\Psi dV$ không phụ thuộc vào thời gian: Ở nơi này mật độ tăng lên bao nhiêu thì ở nơi khác mật độ giảm đi bấy nhiêu. Ta hình dung chất lỏng xác suất này chảy từ nơi này sang nơi khác. Với quan niệm chất lỏng xác suất này ta sẽ xây dựng phương trình mật độ xác suất và mật độ dòng xác suất.

1. Phương trình

Trong cơ học lượng tử cũng tồn tại phương trình liên tục tương tự như phương trình cổ điển

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0 \quad (4.10)$$

Trong đó $\omega = \Psi^*\Psi$ — mật độ xác suất

$\vec{j}$ — mật độ dòng xác suất

Có thể chứng minh phương trình trên bằng cách dựa vào phương trình Schrodinger (vì Ψ , Ψ^* thoả mãn phương trình Schrodinger tổng quát) (4.7') và (4.9):

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right\} \Psi$$

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right\} \Psi^*$$

Lấy đạo hàm đại lượng $\omega = \Psi^* \Psi$ theo thời gian, ta có:

$$\frac{\partial(\Psi^* \Psi)}{\partial t} = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}$$

Thay (4.7') và (4.9') vào phương trình này, ta được:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\Psi^* \Psi)}{\partial t} &= \frac{\Psi^*}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \right\} \Psi - \frac{\Psi}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \right\} \Psi^* = \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi \Delta \Psi^* - \Psi^* \Delta \Psi) = -\text{div} \left\{ \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \right\} = -\text{div} \vec{J} \end{aligned}$$

$$\text{Đặt } \vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \quad (4.11)$$

Tóm lại: $\frac{\partial(\Psi^* \Psi)}{\partial t} + \text{div} \vec{J} = 0$ (Đó là điều phải chứng minh)

2. Ý nghĩa của phương trình

Ta sẽ thấy rõ ý nghĩa của phương trình liên tục nếu nhận xét rằng $\omega = \Psi^* \Psi$ như mật độ trung bình hạt và $\vec{J}$ như mật độ trung bình dòng hạt.

– Tính $\vec{J}$ đối với hạt chuyển động tự do.

Hàm sóng của hạt chuyển động tự do có dạng:

$$\Psi(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(Et - Px)}$$

$$\Psi^*(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(Et - Px)}$$

Ta thấy $\Psi^* \Psi = 1$

$$J = -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) = \frac{P}{m} = v$$

Kết quả trên là hợp lí, vì nếu có N hạt chuyển động theo trục ox với vận tốc v trong một hình trụ có tiết diện đáy là một đơn vị diện tích (1cm²)

thì số hạt đi qua đáy trong một đơn vị thời gian (1 giây) sẽ tạo thành dòng hạt Nv .

- Lấy tích phân 2 vế phương trình (4.10), ta có:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \omega dv = - \int_V \operatorname{div} \vec{J} dv = \oint_S J_n ds$$

Nếu mở rộng thể tích $v \rightarrow \infty$ thì hàm Ψ và do đó mật độ dòng $\vec{J}$ sẽ tiến tới không, nghĩa là:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \omega dv = \frac{\partial}{\partial t} \int_V \Psi^* \Psi dv = 0$$

Ta thấy xác suất để thấy hạt trong toàn không gian không phụ thuộc vào thời gian.

- Nhân ω và $\vec{J}$ với m (khối lượng của hạt), ta được:

$$\left. \begin{aligned} \rho_m &= m\omega = m\Psi^* \Psi \\ J_m &= \frac{i\hbar}{2} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \end{aligned} \right\} \rightarrow \frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_m = 0$$

Tương tự nhân ω và $\vec{J}$ với e (điện tích của hạt), ta được:

$$\left. \begin{aligned} \rho_e &= e\Psi^* \Psi \\ J_e &= \frac{i\hbar}{2m} e(\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \end{aligned} \right\} \rightarrow \frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_e = 0$$

Tóm lại định luật bảo toàn khối lượng và định luật bảo toàn điện tích cũng đúng trong cơ học lượng tử.

§3. TRẠNG THÁI DỪNG

Ta biết trong trạng thái dừng năng lượng của hệ có giá trị xác định, hàm sóng diễn tả trạng thái dừng là hàm riêng của toán tử năng lượng và nó phụ thuộc vào thời gian bằng thừa số đơn sắc, nên có thể viết dưới dạng:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(x, y, z)f(t) \quad (4.5)$$

$$f(t) = e^{-i\omega t} = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

Ta sẽ tìm nghiệm của phương trình Schrodinger dưới dạng (4.5). Trường hợp toán tử Hamilton không phụ thuộc vào thời gian, ta có:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\vec{r}, t)$$

Thay (4.5) vào phương trình này:

$$i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} \cdot \Psi(\vec{r}) = f(t) \hat{H}\Psi(\vec{r}) \quad (4.12)$$

Chia hai vế (4.12) cho tích $f(t)\Psi(\vec{r})$, ta được

$$\frac{i\hbar}{f(t)} \frac{\partial f(t)}{\partial t} = \frac{1}{\Psi(\vec{r})} \hat{H}\Psi(\vec{r}) \quad (4.13)$$

Trong phương trình (4.13) vế trái chỉ phụ thuộc vào thời gian, vế phải chỉ phụ thuộc vào tọa độ, vậy hai vế chỉ có thể bằng nhau khi cả hai vế đều không phụ thuộc các biến số $\vec{r}, t$ và cùng bằng một đại lượng nào đó, giả sử đại lượng đó là E , từ (4.13) rút ra:

$$i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} = Ef(t) \rightarrow f(t) = Be^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (4.14)$$

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

Kết quả này chứng tỏ E và $\Psi(\vec{r})$ là trị riêng và hàm riêng của toán tử $\hat{H}$, $\hat{H}$ có phổ trị riêng liên tục hoặc gián đoạn, cũng có thể có phổ hỗn hợp. Trường hợp toán tử $\hat{H}$ có phổ gián đoạn thì hàm sóng

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \Psi_n(\vec{r}) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \quad (\text{cho } B = 1) \quad (4.15)$$

Các trạng thái được biểu diễn bằng các hàm sóng như (4.15) gọi là các trạng thái dừng.

Nhận xét:

– Các trạng thái dừng phụ thuộc vào thời gian theo quy luật tuần hoàn với tần số $\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$.

– Trong trạng thái dừng mật độ xác suất và mật độ dòng xác suất không phụ thuộc vào thời gian, thật vậy:

$$\omega(\vec{r}, t) = \Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t) = \Psi^*(\vec{r})e^{+iE_n t/\hbar} \Psi(\vec{r})e^{-iE_n t/\hbar} = |\Psi(\vec{r})|^2$$

$$\vec{J}_n = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi) = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi_r\nabla\Psi_r^* - \Psi_r^*\nabla\Psi_r) = \vec{J}_r$$

– Trị trung bình $\overline{L} = \int \Psi^* \hat{L} \Psi dv = \text{const}$ (nếu $\hat{L}$ không phụ thuộc tường minh vào thời gian).

– Xác suất tìm thấy giá trị xác định của bất kì đại lượng nào không phụ thuộc vào thời gian. Ta biết xác suất để đại lượng L nhận giá trị L_n là $|c_n|^2$. Giả sử toán tử biểu diễn đại lượng L có các hàm riêng Ψ_n ứng với các trị riêng L_n khi đó L ở trạng thái bất kì không được biểu diễn bởi các hàm riêng Ψ_n , tuy giá trị thu được không xác định, song có thể tìm được xác suất ứng với phép đo.

$$\text{Ta có } W(L_n, t) = c_n^*(t)c_n(t) = |c_n(t)|^2$$

Khai triển Ψ theo các hàm riêng Ψ_n

$$\Psi(r, t) = \sum_n c_n \Psi_n(r, t) = \sum_n c_n(0) \Psi_n(r) e^{-iE_n t/\hbar} = \sum_n c_n(t) \Psi_n(r)$$

$$\text{Trong đó } c_n(t) = c_n(0) e^{-iE_n t/\hbar}$$

$$\text{Vậy } W(L_n, t) = |c_n(t)|^2 = |c_n(0)|^2$$

§4. ĐẠO HÀM CỦA TOÁN TỬ THEO THỜI GIAN

Trong cơ học cổ điển muốn xét sự biến đổi theo thời gian của một đại lượng L nào đó thì ta lấy đạo hàm của đại lượng đó theo thời gian.

$$\frac{dL}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{L(t + \Delta t) - L(t)}{\Delta t}$$

Nhưng trong cơ học lượng tử định nghĩa này mất hết ý nghĩa, vì giá trị tại thời điểm t , L có giá trị xác định thì nói chung, ở thời điểm $t + \Delta t$, L có thể trở nên bất định.

Trong cơ học lượng tử, người ta khảo sát sự thay đổi của đại lượng L theo thời gian xuất phát từ việc xét sự thay đổi giá trị trung bình của đại lượng L trong trạng thái bất kì. Theo định nghĩa trị trung bình của đại lượng lượng tử, ta có.

$$\bar{L} = \int \Psi^* \hat{L} \Psi dv \quad (3.3)$$

Lấy đạo hàm (3.3) theo thời gian

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \int \Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi dv + \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{L} \Psi dv + \int \Psi^* \hat{L} \frac{\partial \Psi}{\partial t} dv \quad (4.16)$$

Số hạng thứ nhất của (4.16) cho trị trung bình

$$\int \Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi dv = \frac{\partial \bar{L}}{\partial t}$$

Và số hạng này sẽ bằng không khi L không phụ thuộc tường minh vào thời gian.

Để tính hai số hạng còn lại của (4.16) ta dựa vào phương trình Schrodinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad , \quad -i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \hat{H}^* \Psi^*$$

(Vì $\hat{H}$ là tự liên hợp, nên $\hat{H} = \hat{H}^*$).

Thay các đạo hàm này vào (4.16), ta được:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{L}}{dt} &= \frac{\partial \bar{L}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} \int \Psi^* (\hat{L}\hat{H} - \hat{H}\hat{L}) \Psi dv = \frac{\partial \bar{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* (\hat{H}\hat{L} - \hat{L}\hat{H}) \Psi dv \\ \frac{d\bar{L}}{dt} &= \int \Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi dv + \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* [\hat{H}, \hat{L}] \Psi dv = \int \Psi^* \left\{ \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}] \right\} \Psi dv \quad (4.17) \end{aligned}$$

$$\text{Suy ra} \quad \frac{d\bar{L}}{dt} = \frac{\partial \bar{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\bar{H}, \bar{L}] \quad (4.17')$$

Vậy đạo hàm của trị trung bình $\bar{L}$ được biểu diễn bằng phương trình (4.17).

Người ta định nghĩa đạo hàm của toán tử $\hat{L}$

$\frac{d\hat{L}}{dt}$ là toán tử được xác định sao cho

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \frac{dL}{dt} = \int \Psi^* \frac{d\hat{L}}{dt} \Psi dv$$

Nghĩa là đạo hàm của trị trung bình theo thời gian bằng trung bình của đạo hàm theo thời gian. Đối chiếu với (4.17), ta có:

$$\frac{dL}{dt} = \frac{\partial L}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}] \quad (4.18)$$

Người ta gọi toán tử $\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}] = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{L} - \hat{L}\hat{H})$ là dấu ngoặc Poisson lượng tử.

(4.18) gọi là phương trình Heisenberg. Nếu toán tử $\hat{L}$ không phụ thuộc tường minh vào thời gian thì:

$$\frac{\partial \hat{L}}{\partial t} = 0, \quad \text{do đó} \quad \frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}] \quad (4.19)$$

Dựa vào dấu ngoặc Poisson lượng tử có thể tính được tổng và tích của toán tử đạo hàm theo thời gian theo quy tắc thông thường

+ Tổng: $\hat{L} = \hat{A} + \hat{B}$:

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{d(\hat{A} + \hat{B})}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A} + \hat{B}] = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{B}] = \frac{d\hat{A}}{dt} + \frac{d\hat{B}}{dt}$$

+ Tích: $\hat{L} = \hat{A}\hat{B}$

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{d(\hat{A}\hat{B})}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}\hat{B}] = \frac{i}{\hbar} \hat{A} [\hat{H}, \hat{B}] + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] \hat{B} = \frac{d\hat{A}}{dt} \hat{B} + \hat{A} \frac{d\hat{B}}{dt}$$

§5. PHƯƠNG TRÌNH CHUYỂN ĐỘNG TRONG CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

Khi tìm dạng tường minh của các toán tử ta đã dựa vào nguyên lý tương ứng giữa cơ học lượng tử và cơ học cổ điển. Điều đó chứng tỏ giữa cơ học lượng tử và cơ học cổ điển có tồn tại những mối quan hệ nhất định. Ta biết trong cơ học cổ điển các phương trình chuyển động cho biết sự biến thiên của toạ độ và xung lượng theo thời gian.

Vì toạ độ và xung lượng không phụ thuộc tường minh vào thời gian, do đó theo (4.19) các toán tử đạo hàm của chúng được biểu diễn qua dấu ngoặc Poisson lượng tử, tức là:

$$\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{r}}] \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathbf{H}}, \hat{x}] \\ \frac{d\hat{y}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathbf{H}}, \hat{y}] \\ \frac{d\hat{z}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathbf{H}}, \hat{z}] \end{array} \right. \quad (4.20)$$

$$\frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{p}}] \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{d\hat{p}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathbf{H}}, \hat{p}_x] \\ \frac{d\hat{p}_y}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathbf{H}}, \hat{p}_y] \\ \frac{d\hat{p}_z}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathbf{H}}, \hat{p}_z] \end{array} \right. \quad (4.21)$$

Các phương trình trên tương tự như phương trình Hamilton cổ điển và gọi là các phương trình Hamilton lượng tử.

Phương trình (4.20) cho biết mối liên hệ giữa vận tốc và xung lượng, còn (4.21) cho biết sự biến thiên của xung lượng theo thời gian. Ý nghĩa các phương trình lượng tử cũng giống như các phương trình cổ điển. Tuy nhiên các phương trình lượng tử được viết dưới dạng toán tử và được áp dụng đối với giá trị trung bình.

Bây giờ ta sẽ tính các đạo hàm trên. Để đơn giản trước hết ta tính các thành phần $\frac{d\hat{x}}{dt}$ và $\frac{d\hat{P}_x}{dt}$, sau đó suy tương tự cho các thành phần còn lại.

Biết: $\hat{x} = x$, $\hat{y} = y$, $\hat{z} = z$

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + U(\vec{r}) = \frac{1}{2m}(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2) + U(x, y, z)$$

$$\text{Nên: } \frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}x - x\hat{H}) = \frac{i}{2m\hbar}(\hat{P}_y^2 x - x\hat{P}_y^2) = \frac{\hat{P}_x}{m}$$

(Vì x giao hoán được với $\hat{P}_y^2, \hat{P}_z^2$ và $U(x, y, z)$ chỉ trừ $\hat{P}_x^2$)

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{H}) = \frac{i}{\hbar}(U\hat{P}_x - \hat{P}_x U) = -\frac{\partial U}{\partial x} = \hat{F}_x$$

(Vì $\hat{P}_x$ giao hoán được với $\hat{P}_y^2, \hat{P}_z^2, \hat{P}_x^2$ chỉ trừ U)

Tóm lại:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{\hat{P}_x}{m} = \hat{v}_x \\ \frac{dy}{dt} &= \frac{\hat{P}_y}{m} = \hat{v}_y \\ \frac{dz}{dt} &= \frac{\hat{P}_z}{m} = \hat{v}_z \end{aligned} \right\} \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\hat{\vec{P}}}{m} = \hat{\vec{v}} \quad (4.22)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\hat{P}_x}{dt} &= -\frac{\partial U}{\partial x} = \hat{F}_x \\ \frac{d\hat{P}_y}{dt} &= -\frac{\partial U}{\partial y} = \hat{F}_y \\ \frac{d\hat{P}_z}{dt} &= -\frac{\partial U}{\partial z} = \hat{F}_z \end{aligned} \right\} \frac{d\hat{\vec{P}}}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial \vec{r}} = \hat{\vec{F}} \quad (4.23)$$

Ta thấy: toán tử đạo hàm toạ độ theo thời gian bằng toán tử xung lượng chia theo khối lượng của hệ, tức là bằng toán tử vận tốc; toán tử đạo hàm xung lượng theo thời gian bằng toán tử lực. (4.22) và (4.23) là các phương trình chuyển động của hạt trong cơ học lượng tử.

Theo công thức tính trị trung bình, kết hợp với (4.22) và (4.23) ta có:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{d}{dt} \int \Psi^* x \Psi dx = \frac{1}{m} \int \Psi^* \hat{p}_x \Psi dx = \frac{\bar{p}_x}{m} \quad (4.24)$$

$$\frac{d\bar{p}_x}{dt} = \frac{d}{dt} \int \Psi^* \hat{p}_x \Psi dx = - \int \Psi^* \frac{\partial U}{\partial x} \Psi dx = \bar{F}_x \quad (4.25)$$

Từ (4.24) và (4.25) suy ra

$$m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = \frac{d\bar{p}_x}{dt} = - \frac{\partial \bar{U}}{\partial x} = \bar{F}_x \quad (4.26)$$

Các công thức (4.24), (4.25) và (4.26) cho thấy sự tương tự giữa cơ học lượng tử và cơ học cổ điển, chúng diễn tả nội dung định lí Ehrenfest.

Vậy trị trung bình các đại lượng lượng tử trên đây tuân theo các công thức cổ điển Newton.

§6. TÍCH PHÂN CHUYỂN ĐỘNG

1. Định nghĩa

Trong cơ học lượng tử tích phân chuyển động được định nghĩa như sau:

Đại lượng L là tích phân chuyển động, nếu:

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}] \equiv 0 \quad (4.27)$$

Trường hợp L không phụ thuộc tường minh vào thời gian thì:

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}] = 0 \quad (4.28)$$

Vậy, khi L không phụ thuộc tường minh vào thời gian thì L sẽ là tích phân chuyển động nếu toán tử $\hat{L}$ giao hoán với toán tử $\hat{H}$, tương ứng với (4.28) ta có:

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\bar{H}, \bar{L}] = 0$$

Điều này chứng tỏ $\bar{L} = \text{const.}$ Như vậy điều kiện cần và đủ để trị trung bình $\bar{L}$ được bảo toàn là toán tử $\hat{L}$ phải giao với toán tử $\hat{H}$.

Để thấy rõ hơn ý nghĩa của tích phân chuyển động ta xét trường hợp hệ nằm ở trạng thái được biểu diễn bằng hàm riêng của toán tử $\hat{L}$. Giả sử với bất kì mọi giá trị của tọa độ ta có:

$$\hat{L}\Psi = L\Psi$$

Lấy vi phân biểu thức này theo thời gian ta được

$$\Psi \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \hat{L} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial L}{\partial t} \Psi + L \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$\text{vì } \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} = 0 \text{ nên } \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi + \hat{L} \frac{\partial \Psi}{\partial t} - L \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{L} - L) \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Thay $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}\Psi$, ta được $\frac{1}{i\hbar} (\hat{L}\hat{H} - \hat{H}\hat{L})\Psi$; kết quả này cho thấy nếu $\hat{L}$ giao hoán với $\hat{H}$ thì $\hat{L}\hat{H} - \hat{H}\hat{L} = 0$.

$$\text{Do đó } \frac{\partial L}{\partial t} = 0 \rightarrow L = \text{const.}$$

2. Thí dụ

– Đối với hạt chuyển động tự do:

$$\text{Ta có: } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \hat{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \Psi(x) = e^{iPx/\hbar}, \hat{P}\Psi(x) = P\Psi(x)$$

Ta thấy ở đây $\hat{H} = \hat{T}$ mà $\hat{T}$ giao hoán với $\hat{P}$ nghĩa là $\hat{H}\hat{P} - \hat{P}\hat{H} = 0$ do đó $\frac{dP}{dt} = 0 \rightarrow P = \text{const.}$

Trường hợp khi hệ ở trạng thái được biểu diễn bằng hàm riêng của toán tử $\hat{H}$ thì $\hat{H}\Psi = E\Psi$ vì $\hat{H}$ giao hoán với chính nó nên $\frac{dE}{dt} = 0$, từ đó suy ra năng lượng E được bảo toàn.

– Khi hệ nằm ở trạng thái được biểu diễn bởi hàm Ψ không phải hàm riêng của toán tử $\hat{L}$ thì đại lượng L không có giá trị xác định, song xác suất để L nhận giá trị L_n không phụ thuộc vào thời gian. Thật vậy, theo điều kiện giao hoán $\hat{H}\hat{L} = \hat{L}\hat{H}$ thì $\hat{L}$ và $\hat{H}$ có chung hàm riêng.

$$\hat{H}\Psi_n = E_n \Psi_n$$

$$\hat{L}\Psi_n = L_n \Psi_n$$

Các hàm riêng của toán tử $\hat{H}$ biểu diễn các trạng thái dừng, do đó sự phụ thuộc của Ψ vào thời gian có thể biểu diễn bằng thừa số đơn sắc $e^{\frac{-i}{\hbar}E_n t}$.

Khai triển Ψ theo các hàm riêng của $\hat{H}$:

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n(0) \Psi_n(x) e^{\frac{-i}{\hbar}E_n t} = \sum_n c_n(t) \Psi_n(x)$$

$$(\text{Đặt } c_n(t) = c_n(0) e^{\frac{-i}{\hbar}E_n t})$$

– Nếu $t = 0 \rightarrow |c_n|^2 = |c_n(0)|^2$ là xác suất tìm thấy E_n tại thời điểm $t = 0$

– Nếu $t \neq 0 \rightarrow |c_n(t)|^2$ là xác suất tìm thấy E_n tại thời điểm t

Rõ ràng $|c_n(t)|^2 = |c_n(0)|^2$, nghĩa là xác suất tìm thấy E_n xác định không phụ thuộc vào thời gian.

Đồng thời $W(L_n, t) = |c_n(t)|^2 = |c_n(0)|^2$ (đó là điều phải chứng minh).

PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER VỚI MỘT SỐ BÀI TOÁN ĐƠN GIẢN

§1. HÀNG RÀO THỂ NĂNG CÓ BỀ DÀY VÔ HẠN

Trước hết ta nhắc lại rằng:

– Thế năng chỉ được xác định tới một hằng số cộng tùy ý, nên có thể chọn tùy ý trị số của thế năng.

– Nếu trong một miền nào đó thế năng có trị số không đổi thì hạt sẽ chuyển động tự do trong miền đó : nếu thế năng thay đổi (nghĩa là có lực tác dụng vào hạt $\vec{F} = -\nabla U$) thì khi thế năng tăng theo chiều chuyển động hạt sẽ chịu tác dụng của lực cản, ngược lại, khi thế năng giảm theo chiều chuyển động hạt sẽ được tăng tốc.

1. Phương trình chuyển động

Xét dòng hạt qua hàng rào thế năng có bề dày vô hạn, mỗi hạt có khối lượng m , năng lượng E . Nếu hạt chuyển động theo chiều tăng của thế năng ta nói hạt gặp một hàng rào thế năng. Khoảng thời gian trong đó để thế năng tăng thực tế là hữu hạn. Để đơn giản ta giả thiết tại $x = 0$ thế năng tăng một cách đột ngột từ 0 đến U_0 .

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{khi } x \leq 0 \\ U_0 & \text{khi } x > 0 \end{cases} \quad (5.1)$$

Tại $x = 0$ hàng rào thế năng có bề cao bằng U_0 (hữu hạn).

Từ $x = 0$ đến $x = \infty$, $U(x) = U_0 = \text{const}$ ta nói hàng rào thế năng có bề dày vô hạn.

Vì hạt chuyển động tự do, một chiều nên phương trình Schrodinger cho từng miền là:

Đối với miền I:

$$\frac{d^2\Psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi_1(x) = 0 \quad (5.2)$$

Đối với miền II:

$$\frac{d^2\Psi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \Psi_2(x) = 0 \quad (5.3)$$

Đặt: $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{mv_1}{\hbar} = \frac{P_1}{\hbar}$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} = \frac{mv_2}{\hbar} = \frac{P_2}{\hbar}$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \Psi''$$

(v_1 , v_2 , P_1 , P_2 là vận tốc và xung lượng của hạt tương ứng ở miền I và miền II) thì (5.2) và (5.3) sẽ chuyển thành:

$$\Psi_1''(x) + k_1^2 \Psi_1(x) = 0 \quad (5.2')$$

$$\Psi_2''(x) + k_2^2 \Psi_2(x) = 0 \quad (5.3')$$

Ta thấy rằng (5.2) và (5.3) là các phương trình vi phân bậc hai với hệ số không đổi. Hàm sóng thỏa mãn các phương trình này chính là nghiệm riêng của chúng và có dạng $e^{\pm ik_1 x}$ và $e^{\pm ik_2 x}$, dấu "+" ứng với sóng truyền theo chiều dương trục ox và dấu "-" ứng với sóng truyền theo chiều ngược lại. Rõ ràng đó là các sóng phẳng De Broglie ở miền I và miền II.

Thật vậy, nếu nhân chúng với thừa số đơn sắc, ta được:

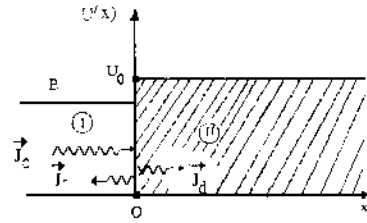
$$e^{ikx} \cdot e^{-i\omega t} = e^{-i(\omega t - kx)}$$

Nghiệm tổng quát của (5.2) và (5.3) có dạng:

$$\Psi_1(x) = a_1 e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ik_1 x} \quad (5.4)$$

$$\Psi_2(x) = a_2 e^{ik_2 x} + b_2 e^{-ik_2 x} \quad (5.5)$$

Các biên độ a_1 , b_1 , a_2 , b_2 (nói chung là phức) là các ẩn số phải tìm.



Hình 9

2. Hệ số phản xạ và hệ số truyền qua

Xét cụ thể bài toán khi hạt chuyển động từ miền I sang miền II trong hai trường hợp: $E > U_0$ và $E < U_0$.

a. Trường hợp $E > U_0$

Trong trường hợp này theo cơ học cổ điển chắc chắn hạt vượt qua hàng rào và sẽ tiếp tục chuyển động trong miền II với năng lượng $E - U_0$. Theo cơ học lượng tử hiện tượng xảy ra khác: ở giới hạn giữa hai miền, tại đó thế năng thay đổi một cách đột ngột – hiện tượng xảy ra giống như ánh sáng khi gặp giới hạn giữa hai môi trường có chiết suất khác nhau, khi đó một phần ánh sáng bị phản xạ trở lại miền I, một phần khúc xạ qua miền II, nghĩa là có tồn tại xác suất tìm thấy hạt phản xạ lại ở miền I và xác suất tìm thấy hạt khúc xạ ở miền II. Ta sẽ tính các xác suất ấy.

Ở miền I có cả sóng tới và sóng phản xạ, ở miền II chỉ có sóng tới, nên trong các biểu thức (5.4) và (5.5):

Thành phần	$a_1 e^{ik_1 x}$ ứng với sóng tới
	$b_1 e^{-ik_1 x}$ ứng với sóng phản xạ
	$a_2 e^{ik_2 x}$ ứng với sóng khúc xạ
còn thành phần	$b_2 e^{-ik_2 x} = 0$ vì ở miền II không có sóng phản xạ
Trong đó:	$ a_1 ^2$ – biểu diễn cường độ sóng tới
	$ b_1 ^2$ – biểu diễn cường độ sóng phản xạ
	$ a_2 ^2$ – biểu diễn cường độ sóng khúc xạ

Mục đích của bài toán là so sánh cường độ sóng phản xạ và sóng khúc xạ với cường độ sóng tới, do đó để tiện cho tính toán ta chọn a_1 làm đơn vị, tức là cho $a_1 = 1$. Mặt khác theo điều kiện biên (hàm sóng liên tục) của Ψ và Ψ' , ta có:

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0) \quad (5.6)$$

$$\Psi_1'(0) = \Psi_2'(0) \quad (5.7)$$

Thay (5.6) và (5.7) vào các phương trình:

$$\Psi_1(x) = a_1 e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ik_1 x}$$

$$\Psi_2(x) = a_2 e^{ik_2 x}$$

$$\text{ta được } \left. \begin{aligned} 1 + b_1 &= a_2 \\ 1 - b_1 &= a_2 \frac{k_2}{k_1} \end{aligned} \right\} \quad (5.8)$$

$$\text{Từ (5.8) suy ra: } b_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad (5.9)$$

$$a_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \quad (5.10)$$

Tiến hành tương tự như quang học, ta tính được hệ số phản xạ và hệ số truyền qua. Kí hiệu $\omega = |\Psi|^2$: mật độ hạt

$J = \omega v$: mật độ dòng hạt

– Hệ số phản xạ (xác suất phản xạ):

$$R = \frac{J_r}{J_0} = \frac{\omega_r v_r}{\omega_0 v_0} = \frac{|b_1|^2}{|a_1|^2} = |b_1|^2 = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2 \quad (5.11)$$

– Hệ số truyền qua (xác suất truyền qua):

$$D = \frac{J_d}{J_0} = \frac{\omega_d v_d}{\omega_0 v_0} = \frac{|a_2|^2}{|a_1|^2} \frac{k_2}{k_1} = |a_2|^2 \frac{k_2}{k_1} = \frac{4k_1 k_2}{|k_1 + k_2|^2} \quad (5.12)$$

Ta thấy $R + D = 1$: xác suất tìm thấy hạt trong cả hai miền bằng 1 (100%), nghĩa là hiện tượng phản xạ và hiện tượng truyền qua là chắc chắn. Từ đó rút ra:

$$D = 1 - R = 1 - \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2 = 4 \frac{\sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}}{\left(1 + \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}} \right)^2} \quad (5.13)$$

Vậy, khi $E = U_0$ thì $D = 0$ tức là không có hạt đi vào miền II, điều này trái với cơ học cổ điển.

b. Trường hợp $E < U_0$

Theo cơ học cổ điển, trường hợp này hạt không thể vượt hàng rào vào miền II vì động năng của nó âm ($E - U_0 < 0$)

– Tính hệ số phản xạ:

Vì $E < U_0$ nên $k_2 = ik$ thuần túy ảo

$$\text{ở đây } k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}$$

$$R = \frac{k_1 - ik}{k_1 + ik} \cdot \frac{k_1 + ik}{k_1 - ik} = 1$$

Tức là các hạt bị phản xạ hoàn toàn.

– Tính hệ số truyền qua $D = 1 - R = 0$

Nghĩa là không tìm thấy hạt ở miền II (kết quả giống như cơ học cổ điển). Nhưng khác với cơ học cổ điển, mặc dù phản xạ hoàn toàn, song xác suất tìm thấy hạt ở miền II vẫn khác không, ta có:

$$\Psi_2(x) = a_2 e^{ik_2 x} = a_2 e^{-kx} \neq 0 \text{ vì } a_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \neq 0$$

$$\text{Do vậy } \omega_2 = \Psi_2^*(x) \Psi_2(x) = |a_2|^2 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} x}$$

Xác suất này giảm theo hàm số mũ (nó giảm nhanh khi vào miền II).

Vậy sự phản xạ không nhất thiết chỉ xảy ra ở giới hạn giữa hai miền, mà hạt có thể đi vào miền II sau đó mới trở lại miền I.

3. Giải thích kết quả

Hiện tượng vi hạt thâm nhập vào miền "bị cấm" (đối với các hạt vi mô) là tính chất đặc thù của thế giới vi mô. Điều này có sự tương tự với quang học. Theo quang hình thì ánh sáng không thể đi từ môi trường này sang môi trường khác kém chiết quang hơn khi góc tới lớn hơn góc tới hạn (ánh sáng sẽ phản xạ toàn phần). Song quang lí đã chứng tỏ rằng ngay trong trường hợp đó ánh sáng vẫn thâm nhập vào miền kém chiết quang hơn rồi sau đó mới phản xạ lại miền I.

Hiện tượng vi hạt có mặt ở miền II khi $E < U_0$ tương tự như đối với ánh sáng. Nhưng theo cơ học cổ điển điều đó là vô lí vì động năng của hạt âm – trái với định luật bảo toàn năng lượng. Ngược lại theo cơ học lượng tử, ta biết thế năng phụ thuộc vào toạ độ, còn động năng phụ thuộc vào vận tốc (xung lượng), theo nguyên lí bất định xung lượng và toạ độ tương

ưng không thể có giá trị đồng thời xác định. Vì thế, nếu xác định năng lượng toàn phần của hạt bằng cách đo riêng động năng và thế năng là vô nghĩa. Muốn phát hiện được hạt ở miền II ta phải đo toạ độ của nó, nhưng máy đo bao giờ cũng tác dụng lên vi hạt và truyền cho nó một động năng nào đó. Phép tính đã chứng tỏ động năng đó lớn hơn giá trị $U_0 - E$, do đó động năng của hạt mà ta tìm thấy ở miền II là dương.

§2. HÀNG RÀO THẾ NĂNG CÓ BỀ DÀY HỮU HẠN

Xét dòng hạt chuyển động từ trái sang phải gặp hàng rào thế năng có bề dày d , mỗi hạt có khối lượng m , năng lượng E . Trường thế được xác định như sau:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{khi } x \leq 0 \text{ và } x \geq d \\ U_0 & \text{khi } 0 < x < d \end{cases} \quad (5.14)$$

Phương trình Schrodinger cho các miền I, II, III:

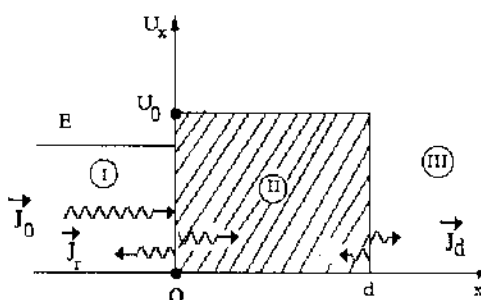
$$\frac{d^2\Psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_1(x) = 0 \quad (5.15)$$

$$\frac{d^2\Psi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\Psi_2(x) = 0 \quad (5.16)$$

$$\frac{d^2\Psi_3(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_3(x) = 0 \quad (5.17)$$

Nghiệm các phương trình trên có dạng $e^{\pm ik_1x}$, $e^{\pm ik_2x}$ và $e^{\pm ik_3x}$ ở đây $k_1^2 = k_3^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$; $k_2^2 = \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}$

Sự phản xạ xảy ra tại hai miền ứng với $x = 0$ và $x = d$, vì thế tại miền I và miền II có sóng chuyển động theo cả hai chiều, còn ở miền III chỉ có sóng đi theo chiều dương. Do đó nghiệm tổng quát có dạng:



Hình 10

$$\Psi_1(x) = a_1 e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ik_1 x} \quad (5.18)$$

$$\Psi_2(x) = a_2 e^{ik_2 x} + b_2 e^{-ik_2 x} \quad (5.19)$$

$$\Psi_3(x) = a_3 e^{ik_3 x} \quad (5.20)$$

Trong đó thành phần $a_1 e^{ik_1 x}$ ứng với sóng tới gặp hàng rào.

$b_1 e^{-ik_1 x}$ ứng với sóng phản xạ bởi hàng rào.

$a_3 e^{ik_3 x}$ ứng với sóng truyền qua hàng rào.

Để tính các hệ số phản xạ và hệ số truyền qua, cần xác định các biên độ a_1 , b_1 và a_3 . Sử dụng điều kiện biên:

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0); \quad \Psi_2(d) = \Psi_3(d)$$

$$\Psi'_1(0) = \Psi'_2(0); \quad \Psi'_2(d) = \Psi'_3(d)$$

Thay các điều kiện biên này vào các phương trình (5.18 ÷ 5.20), ta rút ra (lấy $a_1 = 1$ làm đơn vị).

$$\left. \begin{aligned} 1 + b_1 &= a_2 + b_2 \\ 1 - b_1 &= (a_2 - b_2) \frac{k_2}{k_1} \\ a_2 e^{ik_2 d} + b_2 e^{-ik_2 d} &= a_3 e^{ik_3 d} \\ a_2 e^{ik_2 d} - b_2 e^{-ik_2 d} &= \frac{k_3}{k_2} a_3 e^{ik_3 d} \end{aligned} \right\} \quad (5.21)$$

Trường hợp $E > U_0$ kết quả tính được đối với R và D , trường hợp $E < U_0$ kết quả tính với R , về nguyên tắc, không có gì khác với bài toán hàng rào vô hạn. Do đó ta chỉ tính hệ số truyền qua D trong trường hợp $E < U_0$:

$$D = \frac{J_d}{J_0} = \frac{\omega_d}{\omega_0} \frac{v_3}{v_1} = \left| \frac{a_3}{a_1} \right|^2 = |a_3|^2 \quad (v_3 = v_1)$$

Từ (5.21) rút ra:

$$a_3 = \frac{4k_1 k_2 e^{-ik_1 d}}{(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 d} - (k_1 - k_2)^2 e^{ik_2 d}}$$

ở đây $k_z = ik$ thuần túy ảo; $k = \frac{1}{h} \sqrt{2m(U_0 - E)}$

Thay $k_z = ik$ vào biểu thức a_3 , ta được:

$$a_3 = \frac{4ikk_1 e^{-ik_1 d}}{(k + ik)^2 e^{kd} - (k_1 - ik)^2 e^{-kd}}$$

$$a_3^* = \frac{-4ikk_1 e^{ik_1 d}}{(k_1 - ik)^2 e^{kd} - (k_1 + ik)^2 e^{-kd}}$$

Nếu đưa vào các hàm số Hyperbolic:

$$\operatorname{ch} x = \frac{e^x + e^{-x}}{2}; \quad \operatorname{sh} x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

thì
$$a_3 = \frac{2ikk_1 e^{-ik_1 d}}{(k_1^2 - k^2) \operatorname{sh} kd + 2ikk_1 \operatorname{ch} kd}$$

$$a_3^* = \frac{-2ikk_1 e^{ik_1 d}}{(k_1^2 - k^2) \operatorname{sh} kd - 2ikk_1 \operatorname{ch} kd}$$

và
$$D = a_3^* a_3 = \frac{4k^2 k_1^2}{(k_1^2 - k^2)^2 \operatorname{sh}^2 kd + 4kk_1 \operatorname{ch}^2 kd}$$

Lưu ý $\operatorname{ch}^2 x - \operatorname{sh}^2 x = 1$, ta được:

$$D = \frac{4k^2 k_1^2}{(k_1^2 + k^2)^2 \operatorname{sh}^2 kd + 4k_1^2 k^2} \quad (5.22)$$

Trong thực tế thường gặp các trường hợp mà $kd \gg 1$

do đó:
$$\operatorname{sh} kd \approx \frac{e^{kd}}{2}$$

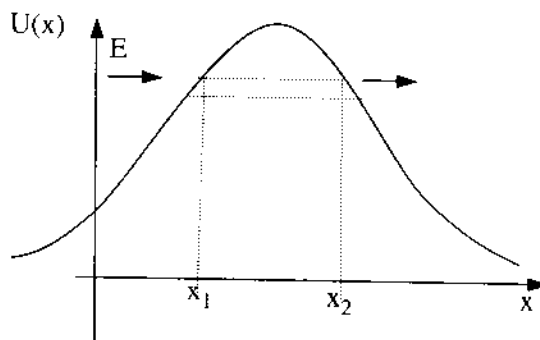
Thành ra
$$D = \frac{4}{\frac{1}{4} \left(\frac{k_1}{k} + \frac{k}{k_1} \right)^2 e^{2kd} + 4}$$

vì $e^{2kd} \gg 4$ và k với k_1 cùng bậc, nên

$$D \approx D_0 e^{-2kd} = D_0 e^{-\frac{2}{h} \sqrt{2m(U_0 - E)} d} \quad (5.23)$$

Vậy sự thâm nhập của hạt qua hàng rào thế năng phụ thuộc theo hàm số lũy thừa vào bề dày d của hàng rào.

Trên đây để đơn giản hoá ta xét trường hợp hàng rào có dạng hình chữ nhật. Trong thực tế hàng rào có dạng phức tạp hơn (hình 11).



Hình 11

Phân tích diện tích giới hạn bởi đường cong với trục

hoành thành các hình chữ nhật nguyên tố, ta đi tới công thức suy rộng:

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{U-E} dx} \quad (5.24)$$

Hiện tượng vi hạt chui qua hàng rào thế năng (khi $E < U_0$) là tính chất đặc thù của vi hạt, người ta thường gọi là hiệu ứng đường ngầm. Nhiều hiện tượng trong vật lí nguyên tử hạt nhân và các hạt cơ bản không thể giải thích được bằng lí thuyết cổ điển, lại có thể dễ dàng giải thích được trên cơ sở lí thuyết hiệu ứng đường ngầm.

§3. HỐ THẾ NĂNG CÓ THÀNH CAO VÔ HẠN

Xét vi hạt có khối lượng m, năng lượng E chuyển động trong hố thế một chiều có thành cao vô hạn. Trường thế được xác định như sau

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{khi } 0 \leq x \leq d \\ \infty & \text{khi } x < 0 \text{ và } x > d \end{cases} \quad (5.25)$$

Như vậy ở ngoài hố $U(x) = \infty$ và ở trong hố $U(x) = 0$, ta nói hố thế năng có thành cao vô hạn.

Theo cơ học cổ điển hạt rơi vào trong hố thế sẽ có năng lượng liên tục, tùy ý và năng lượng cực tiểu bằng không.

Ở trong hố hạt chuyển động tự do, vì hố có thành cao vô hạn nên hạt chỉ tồn tại ở trong hố, tại các miền giới hạn có những lực lớn vô cùng giữ hạt – nói cách khác hạt bị nhốt trong hố có thành phản xạ lí tưởng.

Xét bài toán theo cơ học lượng tử

1. Phương trình chuyển động và nghiệm của nó

Vì hạt không thể thoát ra ngoài hố, nên xác suất tìm thấy hạt ở ngoài hố bằng không, do đó hàm sóng ở ngoài hố $\Psi(x) = 0$, vậy điều kiện biên của bài toán sẽ là:

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0) = \Psi_2(d) = \Psi_3(d) \equiv 0 \quad (5.26)$$

Phương trình Schrodinger cho miền II (trong hố)

$$\frac{d^2\Psi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi_2(x) = 0 \quad (5.27)$$

Hay $\Psi_2''(x) + k^2\Psi_2(x) = 0$; ở đây $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$

Nghiệm phương trình (5.27) có dạng:

$$\Psi_2(x) = \Psi(x) = A\sin kx + B\cos kx \quad (5.28)$$

Thay điều kiện biên $\Psi(0) = 0$ vào (5.28) ta được $B = 0$

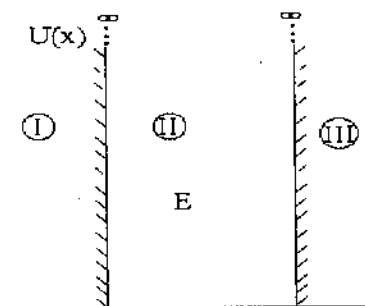
Vậy $\Psi(x) = A\sin kx \quad (5.29)$

Lại thay điều kiện biên $\Psi(d) = 0$ vào (5.29), ta rút ra:

$$kd = n\pi \quad ; n = 1, 2, 3, \dots$$

Bỏ trường hợp $n = 0$ vì khi đó hàm sóng ở trong hố sẽ bằng không – trái với điều kiện đầu bài.

Hệ số A trong (5.29) được xác định từ điều kiện chuẩn hóa của hàm $\Psi(x)$.



Hình 12

$$1 = \int_0^d \Psi^*(x) \Psi(x) dx = |A|^2 \int_0^d \sin^2 \frac{\pi n}{d} x dx = |A|^2 \frac{1}{2} \int_0^d (1 - \cos 2 \frac{\pi n}{d} x) dx$$

$$= |A|^2 \frac{d}{2} \rightarrow |A| = \sqrt{\frac{2}{d}}$$

Ta thấy A không phụ thuộc vào n và nếu A là thực thì $|A| = A$

$$\text{Tóm lại } \Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin \frac{n\pi}{d} x \quad (5.29')$$

Xác định năng lượng E: Từ các kết quả tính ở trên, ta có:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{h} = \frac{n\pi}{d} \rightarrow E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} n^2$$

$$\text{hay } E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} n^2 \quad (\text{vì } E \text{ phụ thuộc vào } n) \quad (5.30)$$

2. Nhận xét kết quả

– Năng lượng của hạt bị lượng tử hoá vì E phụ thuộc vào n mà n lấy các giá trị gián đoạn, xác định; chứng tỏ phương trình Schrodinger chỉ thoả mãn các điều kiện biên với các giá trị gián đoạn của n. Tính chất này được thể hiện một cách tự nhiên, không đòi hỏi một điều kiện phụ nào cả, nó được suy ra trực tiếp từ điều kiện biên của bài toán.

$$\text{– Khi } n = 1 \text{ thì } E_n = E_{\min} = E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} \neq 0$$

Vậy ở trạng thái cơ bản ($n = 1$) năng lượng $E_0 \neq 0$, đó là hệ quả của hệ thức bất định. Có thể chứng tỏ điều đó:

$$\text{– Chọn độ bất định } \Delta x = d \quad ; \quad \Delta p = p \quad ; \quad \Delta x \cdot \Delta p \geq h$$

$$\text{vậy } p^2 \geq \frac{h^2}{d^2} \rightarrow \frac{p^2}{2m} \geq \frac{h^2}{2md^2}$$

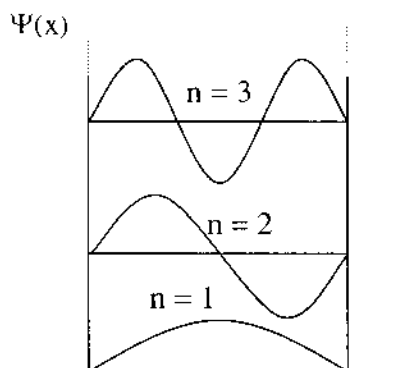
Kết quả này phù hợp một cách bán định lượng với kết quả trên.

$$\text{– Ta thấy } \frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \Rightarrow \frac{\Delta E_n}{E_n} \sim \frac{1}{n}$$

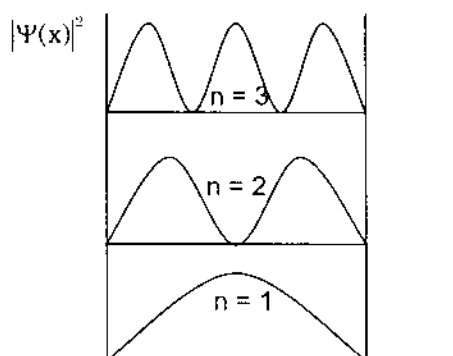
Khi $n \rightarrow \infty$ thì $\Delta E_n \rightarrow 0$ nghĩa là phổ gián đoạn sẽ biến mất và tiến tới phổ liên tục.

Tóm lại, năng lượng của hạt ở trong hố thế lấy các giá trị gián đoạn, xác định và năng lượng cực tiểu $E_{\min} \neq 0$. Tính gián đoạn của năng lượng thể hiện càng rõ khi kích thước của hố càng nhỏ, khối lượng của hạt càng nhỏ và khi số lượng tử n còn đủ nhỏ. Kết quả này hoàn toàn trái ngược với cơ học cổ điển.

– Hàm sóng $\Psi_n(x)$ phụ thuộc vào toạ độ theo quy luật tuần hoàn hình sin và phụ thuộc vào lượng tử số n .



Hình 13



Hình 14

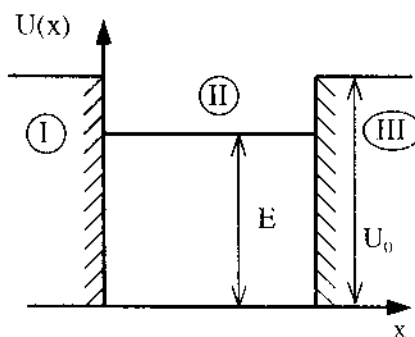
§4. HỐ THẾ NĂNG CÓ THÀNH CAO HỮU HẠN

Xét hạt khối lượng m chuyển động trong hố thế hình chữ nhật có thành cao hữu hạn. Trường thế được xác định như sau:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{khi } 0 \leq x \leq d \\ U_0 & \text{khi } x < 0 \text{ và } x > d \end{cases} \quad (5.31)$$

Ta xét trường hợp năng lượng E của hạt nhỏ hơn U_0 : ($E < U_0$).

Phương trình Schrodinger cho từng miền là:



Hình 15

$$\text{Miền I: } \frac{d^2\Psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} \Psi_1(x) = 0 \quad (5.32)$$

$$\text{Miền II: } \frac{d^2\Psi_2(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi_2(x) = 0 \quad (5.33)$$

$$\text{Miền III: } \frac{d^2\Psi_3(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} \Psi_3(x) = 0 \quad (5.34)$$

$$\text{Kí hiệu } k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad ; \quad k_1 = k_3 = ik \quad ; \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} .$$

Nghiệm các phương trình (5.32) – (5.34) có dạng $e^{\pm kx}$, nhưng ở miền I nghiệm e^{kx} không thích hợp vì khi $x \rightarrow \infty$ thì nó tăng lên vô hạn, ở miền III nghiệm e^{kx} không thích hợp vì khi $x \rightarrow \infty$ thì nó tăng lên ∞ . Nên, ta có:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_1(x) &= a_1 e^{kx} & (x < 0) \\ \Psi_2(x) &= a_2 e^{ik_2 x} + b_2 e^{-ik_2 x} \\ \Psi_3(x) &= a_3 e^{-kx} & (x > 0) \end{aligned} \right\} \quad (5.35)$$

Các nghiệm này phải thỏa mãn điều kiện biên:

$$\begin{aligned} \Psi_1(0) &= \Psi_2(0) & ; & & \Psi_1'(0) &= \Psi_2'(0) \\ \Psi_2(d) &= \Psi_3(d) & : & & \Psi_2'(d) &= \Psi_3'(d) \end{aligned} \quad (5.36)$$

Thay các điều kiện biên (5.36) vào (5.35), ta được (chọn $a_1 = 1$)

$$\left. \begin{aligned} 1 &= a_2 + b_2 \\ k &= ik_2(a_2 - b_2) \\ a_2 e^{ik_2 d} + b_2 e^{-ik_2 d} &= a_3 e^{-kd} \\ ik_2(a_2 e^{ik_2 d} - b_2 e^{-ik_2 d}) &= -ka_3 e^{-kd} \end{aligned} \right\} \quad (5.37)$$

Từ (5.37) rút ra được:

$$\begin{aligned} \frac{k - ik_2}{k + ik_2} &= \frac{k + ik_2}{k - ik_2} e^{2ik_2 d} \\ \text{hay } \frac{k - ik_2}{k + ik_2} e^{-ik_2 d} &= \frac{k + ik_2}{k - ik_2} e^{ik_2 d} \end{aligned} \quad (5.38)$$

Từ (5.38) ta được $(k^2 - k_2^2) \sinh k_2 d = -2kk_2 \cosh k_2 d$

$$\text{hay} \quad \text{tg}k_2d = -\frac{2kk_2}{k^2 - k_2^2}$$

Thay k vì k_2 theo kí hiệu ở trên, ta có:

$$\text{tg}\left(\frac{1}{h}\sqrt{2mEd}\right) = -\frac{2\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0 - 2E} \quad (5.39)$$

Cuối cùng trong biểu thức (5.39) chỉ còn E là biến số, tập hợp các giá trị của E tạo thành phổ gián đoạn.

Để liên hệ với bài toán hố thế có thành cao vô hạn, ta xét trường hợp $E \ll U_0$. Trong trường hợp này theo (5.39), suy ra:

$$\text{tg}k_2d \approx -2\sqrt{\frac{E}{U_0}}$$

Ta thấy $\text{tg}k_2d$ âm và khác 0 rất ít, nghĩa là:

$$k_2d \approx n\pi$$

$$\text{hay} \quad \frac{1}{h}\sqrt{2mE_n}d \approx n\pi \quad (5.40)$$

$$\text{Vậy: } E_n \approx \frac{\pi^2 h^2}{2md^2} n^2$$

Kết quả này chứng tỏ sự phân bố các mức năng lượng dưới trong hố thế có thành cao hữu hạn cũng giống như sự phân bố các mức năng lượng của hạt trong hố thế có thành cao vô hạn.

§5. HỐ THẾ BA CHIỀU

Mở rộng bài toán hố thế một chiều cho hố thế ba chiều. Trường thế được xác định như sau:

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{khi } 0 \leq x \leq d_1; 0 \leq y \leq d_2; 0 \leq z \leq d_3 \\ \infty & \text{khi } x < 0 \text{ và } x > d_1; y < 0 \text{ và } y > d_2; z < 0 \text{ và } z > d_3 \end{cases} \quad (5.41)$$

Ở trong hố hạt chuyển động tự do, ngoài hố hàm sóng $\Psi = 0$. Phương trình Schrodinger có dạng:

$$\frac{\partial^2 \Psi(\vec{r})}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi(\vec{r})}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi(\vec{r})}{\partial z^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (5.42)$$

$$\text{Nghiem } \Psi(x, y, z) = A \sin k_1 x \cdot \sin k_2 y \cdot \sin k_3 z \quad (5.43)$$

$$\text{ở đây } k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Thay điều kiện biên

$$\Psi(0, y, z) = \Psi(x, 0, z) = \Psi(x, y, 0) \equiv 0$$

$$\Psi(d_1, y, z) = \Psi(x, d_2, z) = \Psi(x, y, d_3) \equiv 0$$

vào (5.43), ta được:

$$k_1 d_1 = \pi n_1 ; k_2 d_2 = \pi n_2 ; k_3 d_3 = \pi n_3$$

$$n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$$

$$\text{Hệ số } A \text{ tính được từ điều kiện chuẩn hoá } A = \sqrt{\frac{8}{d_1 d_2 d_3}}$$

$$\text{Tóm lại } \Psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{d_1 d_2 d_3}} \sin \frac{\pi n_1}{d_1} x \cdot \sin \frac{\pi n_2}{d_2} y \cdot \sin \frac{\pi n_3}{d_3} z$$

$$\text{Năng lượng } E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{d_1^2} + \frac{n_2^2}{d_2^2} + \frac{n_3^2}{d_3^2} \right) \quad (5.44)$$

Với một bộ giá trị khác nhau của n_1, n_2, n_3 chỉ có một giá trị năng lượng E ứng với nhiều hàm sóng khác nhau – ta nói mức năng lượng này bị suy biến.

Nếu $d_1 = d_2 = d_3 = d$ (hộp thế lập phương) thì:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m d^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

ở đây nếu $n_1 = n_2 = n_3 = 1$ thì:

$$E_{111} = E_3 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m d^2} 3$$

n_1	n_2	n_3
1	1	2
1	2	1
2	1	1

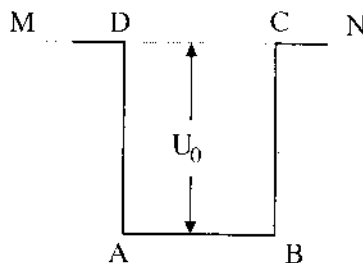
Mức này không bị suy biến ứng với một bộ giá trị duy nhất của n .

$$\text{Mức} \quad E_6 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} 6$$

Mức này ứng với ba bộ giá trị của n và tương ứng với ba hàm sóng $\Psi_{112}, \Psi_{121}, \Psi_{211}$ nghĩa là mức E_6 suy biến bậc ba.

§6. ELECTRON TRONG KIM LOẠI

Để áp dụng kết quả thu được trong những tiết trước, ta xét electron nằm trong trường thế được xác định như hình bên, ví dụ trường của electron nằm trong kim loại. Thực ra đây là trường tuần hoàn được tạo bởi các ion dương của kim loại. Trong phép tính gần đúng bậc nhất có thể thay thế bằng một trường trung bình nào đó có thế V bất biến trong toàn kim loại. Thế năng của electron âm $U_0 = -eV$, nghĩa là electron trong kim loại bị giam trong hố thế có bề sâu là U_0 .



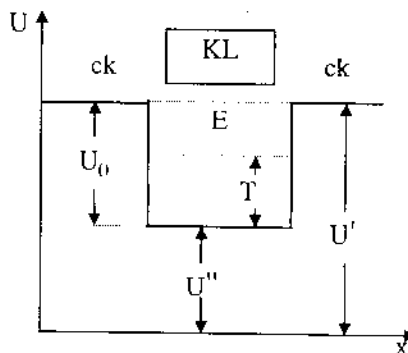
Hình 16

Do việc chọn gốc thế năng là tùy ý, nên ta sẽ chọn sao cho thế năng của electron nằm trong kim loại là dương, ví dụ bằng U'' .

Hiệu $U' - U'' = U_0$ chính là bề sâu hố thế năng, trong đó chứa các electron của kim loại.

Năng lượng E của electron chuyển động trong kim loại lớn hơn U'' và hiệu $E - U'' = T$ là động năng của nó.

Ta biết hạt ở trong hố thế có năng lượng gián đoạn, xác định. Tuy nhiên với kích thước giới hạn của miếng kim loại thì khoảng cách giữa các mức năng lượng rất nhỏ. Song sự tồn tại đó thể hiện bản chất của nguyên lý Pauli. Theo nguyên lý Pauli trên mỗi mức năng lượng của kim loại không chứa quá 2



Hình 17

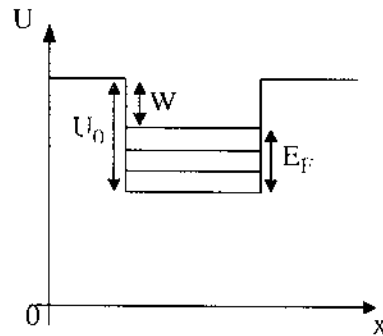
electron. Ta hình dung ban đầu trong lưới kim loại chỉ có các ion dương. Hai electron đầu tiên sẽ nằm ở mức thấp nhất, electron thứ ba phải nằm ở mức tiếp theo cao hơn.... vì số electron trong kim loại rất nhiều nên chúng sẽ lấp đầy các mức năng lượng. Mức năng lượng trên cùng trong số các mức đã được lấp đầy, khi kim loại ở độ không tuyệt đối, tạo thành giới hạn rõ rệt giữa các mức đã được lấp đầy và các mức tự do. Mức trên cùng này gọi là mức chuẩn hay giới hạn Fermi E_F . Rõ ràng để giải phóng electron đầu tiên ra khỏi kim loại cần cung cấp cho nó một năng lượng ít nhất bằng hiệu $U_0 - E_F$.

Đại lượng $W = U_0 - E_F$ gọi là công thoát của electron khỏi kim loại, thể hiện trong hiệu ứng quang điện.

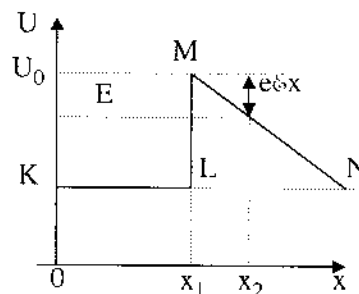
Tuy nhiên electron có thể thoát ra ngoài kim loại không chỉ dưới tác dụng của photon, mà còn dưới tác dụng nhiệt và các tác dụng khác.

Thí dụ: dưới ảnh hưởng của điện trường ngoài mạnh electron có thể thoát ra ngoài kim loại với nhiệt độ thấp tùy ý. Có thể dựa vào lý thuyết cổ điển để giải thích hiện tượng này một cách định tính, nhưng kết quả thu được mâu thuẫn với thực nghiệm. Trái lại, hiện tượng này (gọi là hiện tượng phát xạ lạnh) có thể được giải thích thỏa đáng trên cơ sở lý thuyết hiệu ứng đường ngầm của cơ học lượng tử.

Xét electron ở gần mặt ngoài kim loại. Thế năng ở gần mặt kim loại khi có trường ngoài được biểu diễn bằng đường gấp khúc KLMN (hình 19). Khi electron có năng lượng $E < U_0$, theo cơ học cổ điển, nó không thể thoát ra ngoài hàng rào thế năng được. Song theo cơ học lượng tử, do hiệu ứng đường ngầm electron có thể chui qua hàng rào ra ngoài kim loại. Xác suất truyền qua được tính theo công thức:



Hình 18



Hình 19

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{3} \int_{x_1}^{\infty} \sqrt{2m(U-E)} dx}$$

U là thế năng tại một điểm bất kì của hàng rào. Thay $U = U_0 - e\mathcal{E}x$ ($\mathcal{E}$ – cường độ của điện trường ngoài), đặt $x_1 = 0$, ta có:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \sqrt{U-E} dx &= \int_0^{\infty} \sqrt{U_0 - e\mathcal{E}x - E} dx \\ &= \frac{2}{3e\mathcal{E}} (U_0 - e\mathcal{E}x_2 - E)^{\frac{3}{2}} + \frac{2}{3e\mathcal{E}} (U_0 - E)^{\frac{3}{2}} \end{aligned}$$

ở đây số hạng thứ nhất (theo hình vẽ) bằng không, do đó:

$$D = D_0 e^{-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}(U_0-E)^{\frac{3}{2}}}{e\mathcal{E}}} = D_0 e^{-\alpha}$$

$$\text{Đặt } \alpha = \frac{4\sqrt{2m}(U_0 - E)^{\frac{3}{2}}}{3e\mathcal{E}}$$

Chính dòng phát xạ lạnh phụ thuộc vào cường độ của trường ngoài nên kết quả thu được phù hợp với thực nghiệm.

§7. DAO ĐỘNG TỬ ĐIỀU HOÀ

Nhiều vấn đề trong vật lí hạt nhân nguyên tử có thể quy về những dao động tử điều hoà tuyến tính – những dao động nhỏ xung quanh vị trí cân bằng (như dao động hạt nhân nguyên tử, dao động nhiệt trong tinh thể,...).

Trong cơ học lượng tử nếu một hạt có khối lượng m chuyển động trong trường thế

$$U = \frac{1}{2} kx^2 ; \quad k = m\omega^2 ; \quad \omega \text{ là tần số dao động}$$

thì nó sẽ thực hiện các dao động nhỏ điều hoà tuyến tính.

Toán tử năng lượng:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 \quad (5.45)$$

Phương trình Schrodinger có dạng:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2\right) \Psi(x) = 0 \quad (5.46)$$

Để tiện trong việc giải phương trình này ta đưa vào các biến số mới:

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}; \quad \xi = \sqrt{\alpha} x \quad \left(\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}\right) \quad (5.47)$$

$$\left(\frac{d}{dx} = \frac{d}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\alpha} \frac{d}{d\xi} \rightarrow \frac{d^2}{dx^2} = \alpha \frac{d^2}{d\xi^2}\right)$$

Với các biến số mới phương trình (5.46) trở thành:

$$\frac{d^2\Psi(\xi)}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2) \Psi(\xi) = 0 \quad (5.48)$$

Để giải phương trình này ta nhận xét rằng: nghiệm cần tìm phải thoả mãn các điều kiện giới nội, liên tục và đơn trị trong khoảng từ $-\infty$ đến $+\infty$ ($-\infty < \xi < \infty$). Khác với hai bài toán trước, ở đây hạt chuyển động không bị giới hạn bởi bức tường nào cả. Vì thế đối với dao động tử điều hoà không có các điều kiện biên. Điều kiện tự nhiên đối với nó là hàm sóng phải thoả mãn điều kiện bình phương khả tích. Phương trình Schrodinger (5.48) chỉ thoả mãn điều kiện này trong trường hợp trị riêng λ lấy giá trị hoàn toàn xác định theo công thức

$$\lambda = 2n + 1 \quad (\text{xem phụ lục §5}) \quad (5.49)$$

ở đây $n = 0, 1, 2, \dots$

Thay (5.49) vào (5.47), ta được:

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) = E_n \quad (5.50)$$

Trường hợp $n = 0$, ta có $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} = E_{\min}$ mức năng lượng cơ bản.

Nghiệm phương trình (5.48) có dạng:

$$\Psi_n(\xi) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) \quad (5.51)$$

Trong đó A_n là hằng số chuẩn hoá, có thể tính được từ điều kiện chuẩn hoá đối với $\Psi_n(\xi)$, $H_n(\xi)$ là đa thức Hermite – Trebusev bậc n .

Các hệ số của đa thức này được xác định nhờ công thức truy toán

$$a_n = \frac{(n+1)(n+2)}{2n+1-\lambda} a_{n+2} \quad (5.52)$$

Công thức này cho phép lần lượt tính được tất cả các hệ số khác theo một hệ số đã cho trước.

$$H_n(\xi) = a_n \left[\xi^n - \frac{n(n-1)}{1.2^2} \xi^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{1.2.2^4} \xi^{n-4} - \dots \right] \quad (5.53)$$

Cho $a_n = 2^n$; ($n = 0, 1, 2, \dots$), ta có:

$$\begin{array}{ll} H_0(\xi) = 1; & H_1(\xi) = 2\xi \\ H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2; & H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi \\ H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12; & H_5(\xi) = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi \\ \dots & \dots \end{array}$$

Đa thức này thường được biểu diễn dưới dạng:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n (e^{-\xi^2})}{d\xi^n}$$

Bằng cách tính đạo hàm người ta rút ra:

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi)$$

Nghĩa là tính được số hạng thứ ba theo hai số hạng đứng trước nó.

Tính hằng số A_n

$$1 = \int \Psi_n^*(\xi) \Psi_n(\xi) d\xi = |A_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = |A_n|^2 2^n n! \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$\text{Rút ra } A_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \sqrt{\frac{1}{n! 2^n}}$$

Thay $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ta tính được $A_0, A_1, A_2, A_3, \dots$

Tóm lại:

$$\Psi_0(\xi) = A_0 e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_0(\xi) \Rightarrow \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} = \Psi_0(x)$$

$$\Psi_1(\xi) = A_1 e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_1(\xi) \Rightarrow \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \sqrt{2\alpha} x e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} = \Psi_1(x)$$

$$\Psi_2(\xi) = A_2 e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_2(\xi) \Rightarrow \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2}} (2\alpha x^2 - 1) e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} = \Psi_2(x)$$

.....

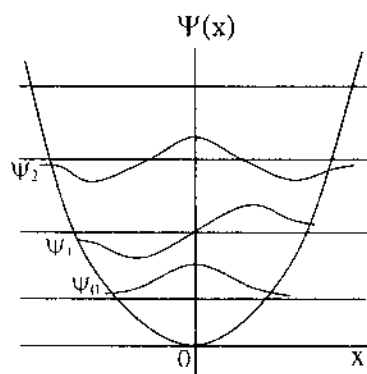
.....

.....

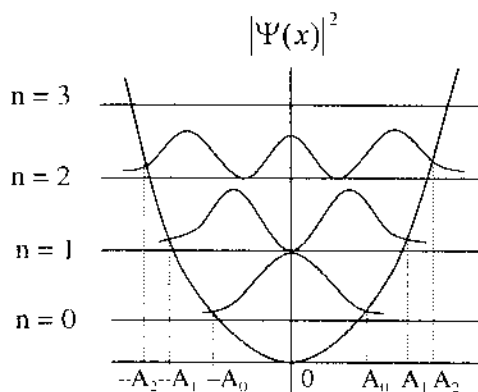
* *Nhận xét:*

– Những điểm tại đó $\Psi = 0$ gọi là nút của hàm sóng, số nút bằng số lượng tử n .

– Xác suất tìm thấy hạt trong khoảng dx xung quanh điểm x là $|\Psi_n(x)|^2 dx$, xác suất tìm thấy hạt ở ngoài giới hạn cổ điển tuy rất nhỏ nhưng vẫn khác không (xác suất cổ điển tỉ lệ nghịch với vận tốc nên cực đại ở giới hạn và cực tiểu ở vị trí cân bằng). Khi $n \rightarrow \infty$ thì xác suất lượng tử tiến tới xác suất cổ điển.



Hình 20



Hình 21

$$E_3 = \frac{7}{2} \hbar \omega$$

$$E_2 = \frac{5}{2} \hbar \omega$$

$$E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

– Năng lượng của dao động tử điều hoà bị lượng tử hoá. Điều đó gây nên do đòi hỏi tự nhiên về tính giới nội của hàm sóng trong toàn không gian. Các mức năng lượng cách đều nhau một khoảng $\hbar \omega$.

– Năng lượng cực tiểu của dao động tử $E_{\min} \neq 0$, chứng tỏ ngay khi nhiệt độ tuyệt đối bằng không năng lượng của dao động tử vẫn khác không. Đó là hệ quả của hệ thức bất định, ta có thể chứng minh điều đó:

$$\text{Theo hệ thức bất định} \quad \overline{\Delta x^2} \cdot \overline{\Delta P_x^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\begin{aligned} \text{Ta có: } \overline{\Delta x^2} &= \overline{x^2} - (\overline{x})^2 = \overline{x^2} \\ \overline{\Delta P_x^2} &= \overline{P_x^2} - (\overline{P})^2 = \overline{P_x^2} = \overline{P^2} \end{aligned} \quad \text{vì} \quad \left\{ \begin{array}{l} \overline{x} = \int |\Psi_0|^2 x dx = 0 \\ \overline{P} = \int |\Psi_0|^2 \hat{P}_x dx = 0 \end{array} \right.$$

$$\text{Từ đó } \overline{\Delta x^2} \cdot \overline{\Delta P_x^2} = \overline{x^2} \cdot \overline{P_x^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\text{Năng lượng } \overline{E} = \frac{\overline{P^2}}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \overline{x^2} \quad \text{hay} \quad \overline{E} \geq \frac{\overline{P^2}}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar^2}{4\overline{P^2}}$$

$$\text{Từ điều kiện } \frac{\partial \overline{E}}{\partial (\overline{P^2})} = 0$$

$$\text{ta tìm được } E_{\min} = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

CHUYỂN ĐỘNG TRONG TRƯỜNG XUYỀN TÂM

Trường lực gọi là xuyên tâm nếu lực tác dụng lên hạt chuyển động luôn luôn đi qua một điểm xác định (tâm của trường) và chỉ phụ thuộc vào khoảng cách từ hạt đến tâm của trường.

Trong cơ học lượng tử toán tử momen động lượng đóng vai trò đặc biệt quan trọng đối với chuyển động của hạt trong trường xuyên tâm.

§1. TOÁN TỬ MOMEN ĐỘNG LƯỢNG VÀ CÁC TÍNH CHẤT CỦA NÓ

1. Biểu thức

Trong chương 3 ta đã biết:

$$* \quad \hat{\mathbf{M}} = [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{P}}] \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{M}_x = y\hat{P}_z - z\hat{P}_y = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \\ \hat{M}_y = z\hat{P}_x - x\hat{P}_z = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \\ \hat{M}_z = x\hat{P}_y - y\hat{P}_x = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \end{array} \right. \quad (6.1)$$

$$* \quad \hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2 \quad (6.2)$$

Do tính chất đối xứng cầu của trường xuyên tâm, nên để tiện lợi người ta dùng hệ toạ độ cầu. Các toạ độ cầu liên hệ với các toạ độ vuông góc như sau:

$$\left. \begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \varphi \\ y &= r \sin \theta \sin \varphi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \right\} \begin{aligned} r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \theta &= \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \\ \varphi &= \arctg \frac{y}{x} \end{aligned}$$

Chuyển sang toạ độ cầu, ta có:

$$\begin{aligned} \hat{M}_x &= i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{M}_y &= -i\hbar \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \end{aligned} \quad (6.3)$$

$$\begin{aligned} \hat{M}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \hat{M}^2 &= -\hbar^2 \nabla_{\text{qp}}^2 \end{aligned} \quad (6.4)$$

Trong đó $\nabla_{\text{qp}}^2 = \frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$

2. Các tính chất của các toán tử momen động lượng

$$* \quad \left. \begin{aligned} [\hat{M}_x, \hat{M}_y] &= i\hbar \hat{M}_z \\ [\hat{M}_y, \hat{M}_z] &= i\hbar \hat{M}_x \\ [\hat{M}_z, \hat{M}_x] &= i\hbar \hat{M}_y \end{aligned} \right\} \quad (6.5)$$

Các toán tử $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$ không giao hoán với nhau, tức là các thành phần momen động lượng không có giá trị xác định đồng thời.

$$* \quad [\hat{M}^2, \hat{M}_x] = [\hat{M}^2, \hat{M}_y] = [\hat{M}^2, \hat{M}_z] = 0 \quad (6.6)$$

Toán tử $\hat{M}^2$ bao giờ cũng giao hoán với các toán tử thành phần $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$

$$* \quad [\hat{M}_x, x] = [\hat{M}_y, y] = [\hat{M}_z, z] = 0 \quad (6.7)$$

Các toán tử hình chiếu của $\hat{\mathbf{M}}$ và các thành phần toạ độ cùng tên giao hoán với nhau.

$$* \quad \left. \begin{aligned} [\hat{M}_x, y] &= i\hbar z \\ [\hat{M}_y, z] &= i\hbar x \\ [\hat{M}_z, x] &= i\hbar y \\ \dots & \dots \end{aligned} \right\} \quad (6.8)$$

Các toán tử thành phần momen động lượng và các thành phần toạ độ khác tên không giao hoán với nhau.

$$* \quad [\hat{M}_x, \hat{P}_x] = [\hat{M}_y, \hat{P}_y] = [\hat{M}_z, \hat{P}_z] = 0 \quad (6.9)$$

Các toán tử thành phần momen động lượng và các toán tử thành phần động lượng cùng tên giao hoán với nhau.

$$* \quad \left. \begin{aligned} [\hat{M}_x, \hat{P}_y] &= i\hbar \hat{P}_z \\ [\hat{M}_y, \hat{P}_z] &= i\hbar \hat{P}_x \\ [\hat{M}_z, \hat{P}_x] &= i\hbar \hat{P}_y \end{aligned} \right\} \quad (6.10)$$

Các toán tử thành phần của $\hat{\mathbf{M}}$ và các toán tử thành phần động lượng khác tên không giao hoán với nhau.

$$* \quad [\hat{M}^2, \hat{H}] = 0 \quad (6.11)$$

Tức là toán tử $\hat{M}^2$ và toán tử năng lượng giao hoán với nhau.

Toán tử Hamilton $\hat{H}$ trong hệ toạ độ cầu:

$$\begin{aligned} \hat{H} = \hat{T} + \hat{U} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \nabla_{\text{op}}^2 \right] + U(r) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{M}^2}{2mr^2} + U(r) \end{aligned}$$

§2 . HÀM RIÊNG VÀ TRỊ RIÊNG CỦA CÁC TOÁN TỬ $\hat{M}^2$ VÀ $\hat{M}_z$

Trong cơ học lượng tử tồn tại những trạng thái, trong đó các đại lượng M^2 và M_z có giá trị đồng thời xác định, nghĩa là các toán tử $\hat{M}^2$ và $\hat{M}_z$ có chung hàm riêng.

1. Hàm riêng và trị riêng của toán tử $\hat{M}^2$

Để tìm hàm riêng và trị riêng của $\hat{M}^2$ ta giải phương trình trị riêng:

$$\hat{M}^2 \Psi(r, \theta, \varphi) = M^2 \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (6.12)$$

ở đây $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$

hay $-\hbar^2 \nabla_{\theta\varphi}^2 Y(\theta, \varphi) = M^2 Y(\theta, \varphi) \rightarrow \nabla_{\theta\varphi}^2 Y(\theta, \varphi) + \lambda Y(\theta, \varphi) = 0$

$$\text{đặt } \lambda = \frac{M^2}{\hbar^2} \quad (6.13)$$

Viết phương trình (6.12) dưới dạng tường minh trong hệ toạ độ cầu:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} + \lambda Y(\theta, \varphi) = 0 \quad (6.12')$$

Phương trình (6.12') chỉ có nghiệm thích hợp thoả mãn đòi hỏi của hàm sóng khi λ lấy giá trị xác định theo biểu thức:

$$\lambda = l(l+1) \quad (6.14)$$

trong đó $l = 0, 1, 2, \dots$

So sánh (6.13) với (6.14) ta được:

$$M^2 = \hbar^2 l(l+1)$$

Vậy toán tử $\hat{M}^2$ có phổ trị riêng gián đoạn.

Các hàm riêng của $\hat{M}^2$ là những hàm cầu phụ thuộc vào các số lượng tử l, m .

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = A_{l,m} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (6.15)$$

ở đây $A_{l,m} = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}}$ là hằng số chuẩn hoá tính được từ điều kiện chuẩn hoá đối với $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$.

$$P_l^m(\cos \theta) = (1 - \cos^2 \theta)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m [P_l(\cos \theta)]}{d(\cos \theta)^m}$$

$$P_l(\cos \theta) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d(\cos \theta)^l} [(\cos^2 \theta - 1)^l] \quad \text{là đa thức Legendre}$$

$l = 0, 1, 2, 3, \dots$ – Số lượng tử quỹ đạo.

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ – Số lượng tử từ (phụ thuộc vào trường ngoài).

Ứng với mỗi giá trị của l thì m lấy $(2l + 1)$ giá trị. Như vậy ứng với một giá trị của M^2 có $2l + 1$ hàm riêng $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ (do m khác nhau), ta nói các trị riêng M^2 suy biến $2l + 1$ lần.

2. Hàm riêng và trị riêng của toán tử $\hat{M}_z$

Giải phương trình trị riêng đối với $\hat{M}_z$

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = f(r, \theta)\phi(\varphi)$$

$$\hat{M}_z \Psi = M_z \Psi \quad (6.16)$$

$$\text{hay } -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} = M_z \Psi \rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} = im \Psi \quad (6.16')$$

$$\text{ở đây } m = \frac{M_z}{\hbar} \quad (6.17)$$

Nghiệm phương trình (6.16') có dạng:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = f(r, \theta)\phi(\varphi) \quad (6.18)$$

Thay (6.18) vào (6.16') ta được:

$$\frac{d\phi}{d\varphi} = im\phi \rightarrow \phi = B e^{im\varphi}$$

Trong đó $B = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}$ tính được từ điều kiện chuẩn hoá đối với ϕ .

Tóm lại $\Psi(r, \theta, \varphi) = f(r, \theta)\phi(\varphi)$; $M_z = m\hbar$.

Nghĩa là trị riêng M_z bị lượng tử hoá.

Bây giờ ta sẽ xác định các giá trị của lượng tử số m : vì các tọa độ (r, θ, φ) và $(r, \theta, \varphi + 2\pi)$ đều biểu diễn cùng một điểm trong không gian và hàm sóng phải đơn trị, do đó:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \Psi(r, \theta, \varphi + 2\pi)$$

hay $f(r, \theta)\phi(\varphi) = f(r, \theta)\phi(\varphi + 2\pi)$

Nghĩa là $e^{im\varphi} = e^{im(\varphi+2\pi)}$

Suy ra $e^{i2\pi m} = 1 = \cos 2\pi m + i \sin 2\pi m$

Vậy $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

3. Hàm riêng chung của $\hat{M}^2$ và $\hat{M}_z$

Vì $f(r, \theta)$ là hàm tùy ý và m lấy giá trị nguyên nên $\hat{M}^2$ và $\hat{M}_z$ có hàm riêng chung là hàm cầu biểu diễn trạng thái trong đó các đại lượng M^2 và M_z có giá trị đồng thời xác định:

$$|M| = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad \text{và} \quad M_z = \hbar m$$

Chú ý

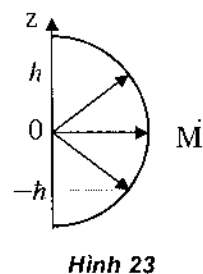
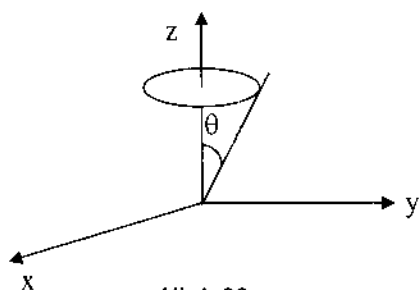
– Việc chọn M_z là hoàn toàn tùy ý, ta có thể chọn hoặc M_x , hoặc M_y , hoặc M_z . Các đại lượng M_x , M_y , M_z không có giá trị đồng thời xác định. Vậy trong một trạng thái nào đó một đại lượng có giá trị xác định thì hai đại lượng kia sẽ hoàn toàn bất định.

– $|m_{\max}| = l$ nên $|M| > |M_z|$. Do đó góc θ phải luôn khác không, nghĩa là vectơ $\vec{M}$ không bao giờ song song với các trục tọa độ. Vì nếu $\vec{M}$ trùng với một trục tọa độ nào đó và tự quay quanh trục đó thì $\vec{M}$ và các hình chiếu của nó sẽ có giá trị đồng thời xác định – trái với kết luận ở trên (trừ trường hợp duy nhất $M_x = M_y = M_z = 0$).

– Các hàm $\theta(\theta) = A_{lm} P_l^m(\cos \theta)$ và $\phi(\varphi) = e^{im\varphi}$ là các hệ hàm trực chuẩn và đầy đủ, do đó hàm $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ cũng lập thành các hệ hàm trực chuẩn và đầy đủ.

Dưới đây là một số hàm cầu đã chuẩn hoá:

Trạng thái	l	m	$Y(\theta, \varphi)$	M	M_z	M_x, M_y
s	0	0	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$	0	0	0
p	1	1	$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \cdot e^{i\varphi}$	$\hbar\sqrt{2}$	$\hbar$	không xác định
		0	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$	nt	0	nt
		-1	$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \cdot e^{-i\varphi}$	nt	$-\hbar$	nt
d	2	2	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta \cdot e^{i2\varphi}$	$\hbar\sqrt{6}$	$2\hbar$	không xác định
		1	$\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta \cdot e^{i\varphi}$	nt	$\hbar$	nt
		0	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$	nt	0	nt
		-1	$\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta \cdot e^{-i\varphi}$	nt	$-\hbar$	nt
		-2	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta \cdot e^{-i2\varphi}$	nt	$-2\hbar$	nt



Ví dụ ở trạng thái p, M có giá trị xác định là $\hbar\sqrt{2}$ ứng với 3 trạng thái Ψ_+ , Ψ_0 , Ψ_- , do đó $\Psi = c_+ \Psi_+ + c_0 \Psi_0 + c_- \Psi_-$; $|c|^2$ là xác suất của trạng thái và phụ thuộc vào điều kiện vật lí của hệ.

Nếu muốn biết hình chiếu của M trên một trục toạ độ nào đó, ta phải đặc biệt hoá trục đó (chẳng hạn đặt trường ngoài hướng dọc theo trục đó). Tác dụng của trường ngoài làm cho hệ chuyển từ trạng thái chung sang trạng thái riêng.

Ví dụ đối với ba trạng thái trên Ψ_+, Ψ_0, Ψ_- , nếu $\Psi \rightarrow \Psi_+$ thì $|c|^2 = |c_+|^2$ và $|c_0|^2 = |c_-|^2 = 0$. Nếu đo M_z ta thu được giá trị $\hbar$ nhưng hoàn toàn không biết gì về M_x và M_y .

§3. CHUYỂN ĐỘNG TRONG TRƯỜNG ĐỐI XỨNG TÂM

Xét vi hạt có khối lượng m chuyển động trong trường thế $U = U(r)$ (r là khoảng cách từ hạt đến tâm của trường). Trong hệ toạ độ cầu phương trình Schrodinger có dạng:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2} \nabla_{\theta, \varphi}^2 \right] \Psi + U(r) \Psi = E \Psi$$

hay

$$\frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r}) + \nabla_{\theta, \varphi}^2 \Psi + \frac{2mr^2}{\hbar^2} [E - U(r)] \Psi = 0 \quad (6.18)$$

Có thể tìm nghiệm của phương trình (6.18) dưới dạng tích của hai hàm số: một hàm chỉ phụ thuộc vào bán kính và một hàm chỉ phụ thuộc vào góc.

$$\Psi = \Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi) \quad (6.19)$$

Thay (6.19) vào (6.18) và chia cả hai vế cho tích $R(r)Y(\theta, \varphi)$, ta được:

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left\{ r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right\} + \frac{2mr^2}{\hbar^2} [E - U(r)] = -\frac{1}{Y(\theta, \varphi)} \nabla_{\theta, \varphi}^2 Y(\theta, \varphi) = \lambda \quad (6.20)$$

Trong phương trình (6.20) vế trái chỉ phụ thuộc vào r , vế phải chỉ phụ thuộc vào (θ, φ) nên chúng chỉ có thể bằng nhau khi cả hai vế đều không phụ thuộc gì vào các biến số r, θ, φ và cùng bằng một đại lượng λ nào đó. Vậy (6.20) sẽ tách thành hai phương trình:

– Phương trình bán kính:

$$\frac{d}{dr} \left\{ r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right\} + \frac{2mr^2}{\hbar^2} [E - U(r)] R(r) = \lambda R(r) \quad (6.21)$$

Phương trình này phụ thuộc vào $U(r)$ nên chỉ có thể tìm được nghiệm cụ thể của $R(r)$ khi biết dạng cụ thể của $U(r)$.

– Phương trình góc:

$$\nabla_{\theta, \varphi}^2 Y(\theta, \varphi) + \lambda Y(\theta, \varphi) = 0 \quad (6.22)$$

Phương trình góc không phụ thuộc vào $U(r)$ và nó đặc trưng cho mọi chuyển động trong trường xuyên tâm. Đó chính là phương trình về hàm cầu mà ta đã biết trong tiết trước. Hàm $Y(\theta, \varphi)$ phải tìm chính là hàm cầu:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = A_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

Với λ có giá trị hoàn toàn xác định $\lambda = l(l+1)$; ($l = 0, 1, 2, 3, \dots$)

Nếu biết được nghiệm (6.19) ta có thể tìm được xác suất toạ độ của hạt. Cụ thể xác suất tìm thấy hạt trong yếu tố thể tích dv là:

$$dW(r, \theta, \varphi) = |\Psi(r, \theta, \varphi)|^2 dv = |R(r)|^2 |Y(\theta, \varphi)|^2 dv \quad (6.23)$$

Trong đó: $dv = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi = r^2 dr d\Omega$ ($d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$)

– Xác suất tìm thấy hạt giữa hai hình cầu có bán kính r và $r + dr$ là:

$$dW(r) = |R(r)|^2 r^2 dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = |R(r)|^2 r^2 dr \quad (6.24)$$

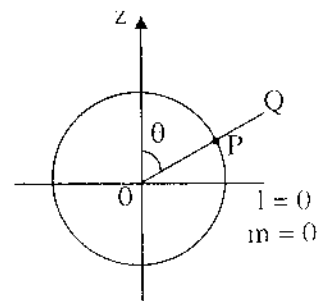
Với điều kiện $\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = 1$

– Xác suất tìm thấy hạt trong góc khối $d\Omega$ là:

$$dW(\theta, \varphi) = |Y(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = |Y(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (6.25)$$

Với điều kiện: $\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = 1$

Có thể biểu diễn sự biến thiên của $\omega(\theta)$ qua đồ thị độ cực: Lấy một đoạn OP trên nửa đường thẳng OQ làm với trục oz một góc θ , khi θ biến thiên điểm mút P sẽ vạch một đường biểu diễn, cho đường biểu diễn này quay xung quanh trục oz sẽ được một mặt biểu diễn xác suất tìm thấy hạt theo hướng θ . Ví dụ:



Hình 24

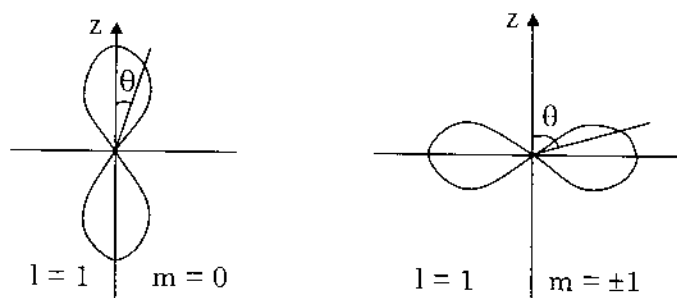
Ở trạng thái s ($l = m = 0$)

$$Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \rightarrow \omega_{0,0}(\theta) = \frac{1}{4\pi}$$

Ở trạng thái p ($l = 1; m = 0, \pm 1$)

$$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \rightarrow \omega_{1,0}(\theta) = \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta$$

$$Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \rightarrow \omega_{1,\pm 1}(\theta) = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta$$



Hình 25

§4. CHUYỂN ĐỘNG TRONG TRƯỜNG COULOMB

Một hạt tích điện chuyển động trong trường coulomb sẽ chịu tác dụng một lực tỉ lệ nghịch với bình phương khoảng cách từ hạt đến tâm của trường. Trường hợp electron mang điện tích $-e$ chuyển động trong trường lực của hạt nhân có điện tích $+Ze$ thì thế năng tương tác (không kể đến chuyển động riêng của hạt nhân) sẽ là:

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (\text{thế hút})$$

Đây chính là bài toán nguyên tử hiđro và các ion tương tự.

Phương trình Schrodinger

$$\frac{\partial}{\partial r}(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r}) + \nabla_{\theta, \varphi}^2 \Psi + \frac{2mr^2}{\hbar^2} [E - U(r)] \Psi = 0 \quad (6.18)$$

$$\text{có nghiệm là } \Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (6.19)$$

ở đây $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ là hàm cầu đã biết.

$R(r)$ là hàm bán kính sẽ tìm được từ phương trình bán kính.

$$\frac{d}{dr}(r^2 \frac{dR(r)}{dr}) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} (E + \frac{Ze^2}{r}) R(r) = l(l+1)R(r)$$

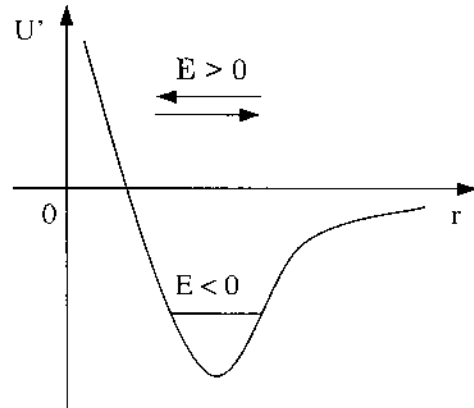
$$\text{hay} \quad \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R(r) = 0 \quad (6.26)$$

Đây là phương trình ứng với chuyển động thẳng theo bán kính với thế năng hiệu dụng:

$$U' = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

Ta thấy khi r lớn ($r \rightarrow \infty$) thì số hạng thứ nhất của U' quan trọng hơn số hạng thứ hai:

$U' < 0$ và $U' \rightarrow 0$ khi $r \rightarrow \infty$.
Ngược lại khi r nhỏ ($r \rightarrow 0$) thì số hạng thứ hai quan trọng hơn: $U' > 0$ và $U' \rightarrow \infty$ khi $r \rightarrow 0$.



Hình 26

Nhận xét: Khi $E < 0$ bài toán này có thể quy về bài toán chuyển động của hạt trong hố thế năng, ngược lại khi $E > 0$ quy về bài toán phản xạ của electron bởi hàng rào thế năng: hạt từ ∞ đến gặp hàng rào rồi phản xạ trở lại, chuyển động này không tuần hoàn và phổ năng lượng là liên tục. Trường hợp $E > 0$ bài toán rất phức tạp về lý thuyết cũng như thực tiễn ta không xét ở đây. Sau đây ta sẽ giải bài toán trong trường hợp $E < 0$.

Để giải phương trình (6.26) ta đưa vào các biến số mới:

$$\rho = \frac{r}{r_0} ; \quad \varepsilon = -\frac{E}{2|E_0|} ; \quad E_0 = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \approx -13,53 \text{ (eV)}$$

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0,53 \text{ \AA} \quad \begin{array}{l} m - \text{Khối lượng của electron} \\ e - \text{Điện tích của electron} \end{array}$$

Với các biến số mới, phương trình (6.26) biến thành:

$$\frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR(\rho)}{d\rho} + \left[\frac{2Z}{\rho} - 2\varepsilon - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R(\rho) = 0 \quad (6.27)$$

(6.27) sẽ cho nghiệm thoả mãn điều kiện giới nội của hàm sóng khi ε lấy các giá trị xác định theo biểu thức:

$$\varepsilon = -\frac{Z^2}{2n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (\text{xem phụ lục §6})$$

Từ đây ta có năng lượng:

$$E_n = -E_0 \left| \frac{Z^2}{n^2} \right| \quad (6.28)$$

Vậy năng lượng của hệ bị lượng tử hoá và chỉ phụ thuộc vào n .

Chú ý: Khi n tăng thì ΔE_n giảm và $n \rightarrow \infty$ thì $\Delta E_n \rightarrow 0$.

Giải phương trình (6.27) tìm được nghiệm:

$$R_{nl}(\rho) = c_{nl} e^{-\sqrt{2\varepsilon}\rho} \rho^l L_{n-1}^{2l+1}(\rho) \quad (6.29)$$

(L_{n-1}^{2l+1} là đa thức)

Tóm lại ta được:

Hàm sóng $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$

Năng lượng $E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{Z^2}{n^2} = -E_0 \left| \frac{Z^2}{n^2} \right|$

Các lượng tử số

$$\begin{array}{ll} n = 1, 2, 3, \dots & - \text{Số lượng tử chính} \\ l = 0, 1, 2, \dots, n-1 & - \text{Số lượng tử quỹ đạo} \\ m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l & - \text{Số lượng tử từ} \end{array}$$

Vì các mức năng lượng E_n chỉ phụ thuộc số lượng tử chính n , còn hàm sóng Ψ_{nlm} phụ thuộc cả ba số lượng tử n, l, m , do đó các mức năng lượng E_n bị suy biến, bậc suy biến là:

$$f = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 1+3+5+\dots+2n-1 = n^2$$

Sự suy biến về m là tính chất chung của chuyển động trong trường xuyên tâm, nó liên quan đến tính đối xứng tâm của trường ấy. Sự suy biến về l chỉ là đặc trưng của chuyển động trong trường coulomb thuần túy. Thực ra electron trong nguyên tử hydro và các ion tương tự không chỉ chịu tác dụng của trường coulomb thuần túy mà còn có các tương tác khác mà ta chưa xét đến. Nghiên cứu sâu hơn người ta thấy năng lượng của hạt phụ thuộc vào cả n và l .

§5. NGUYÊN TỬ HIĐRO

Ta sẽ nghiên cứu kĩ hơn nguyên tử hydro.

Trong công thức (6.28) thay $Z = 1$ ta có:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -13,53 \frac{1}{n^2} (\text{eV})$$

Ở trạng thái cơ bản $E_0 = -13,53(\text{eV})$

$$\psi_{1,0,0}(r, \theta, \varphi) = R_{1,0}(r) Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} 2r_0^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{r_0}}$$

ở đây $R_{10}(r) = 2r_0^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{r_0}}$

$$Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Từ đó xác suất $dW_{1,0}(r) = |R_{1,0}(r)|^2 r^2 dr = 4r_0^{-3} e^{-\frac{2r}{r_0}} r^2 dr$

$$dW_{0,0}(\theta, \varphi) = |Y_{0,0}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = \frac{1}{4\pi} d\Omega$$

Khi có sự chuyển mức năng lượng từ cao xuống thấp thì nguyên tử phát ra 1 photon có tần số:

$$\nu_{jk} = \frac{E_j - E_k}{h} = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{n_k^2} - \frac{1}{n_j^2} \right) = R' \left(\frac{1}{n_k^2} - \frac{1}{n_j^2} \right) \quad (*)$$

$$(n_k < n_j)$$

$$R' = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3} = 3,27 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$$

$$\text{Số sóng: } s = \frac{\nu}{c} = \frac{1}{\lambda} = \frac{R'}{c} \left(\frac{1}{n_k^2} - \frac{1}{n_j^2} \right) = R'' \left(\frac{1}{n_k^2} - \frac{1}{n_j^2} \right)$$

$$R'' = \frac{R'}{c} = 1,097374 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \text{ gọi là hằng số Rydberg.}$$

$$s = \frac{R''}{n_k^2} - \frac{R''}{n_j^2} = T(n_k) - T(n_j)$$

$T(n_k)$, $T(n_j)$ gọi là các số hạng quang phổ. Các số hạng ứng với cùng một mức hợp thành một dãy quang phổ.

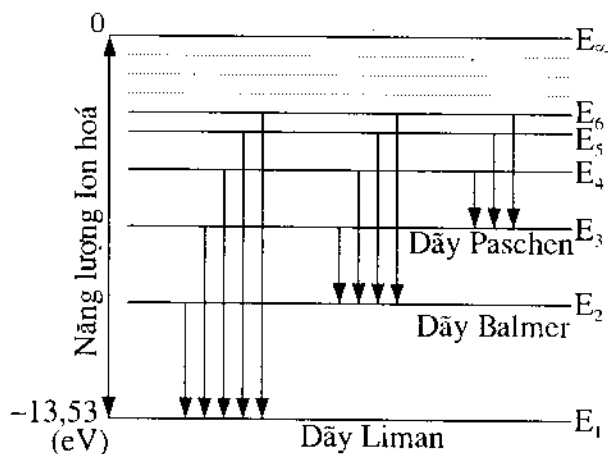
– Dãy Lyman ứng với sự dịch chuyển từ các mức có $n > 1$ về mức $n = 1$;

$$\nu = R' \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right).$$

– Dãy Balmer ứng với sự dịch chuyển từ các mức có $n > 2$ về mức $n = 2$;

$$\nu = R' \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right).$$

– Dãy Paschen ứng với sự dịch chuyển từ các mức có $n > 3$ về mức $n = 3$



Hình 27

Quang phổ của các ion tương tự hydro như He^+ , Li^{++} , ... có cùng một dạng như quang phổ hydro nhưng các vạch dịch chuyển về miền có bước sóng ngắn hơn, vì bây giờ trong công thức (*) phải nhân thêm với hệ số Z^2 .

Bây giờ ta xét sự phân bố xác suất. Trước hết ta xét sự phân bố electron theo bán kính r . Ở trạng thái cơ bản $n = 1$; $l = 0$; $m = 0$

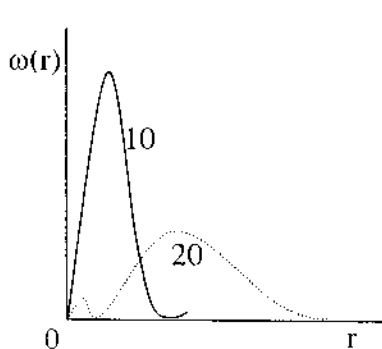
$$dW(r) = 4r_0^{-3} e^{-\frac{2r}{r_0}} r^2 dr$$

$$\omega(r) = \frac{dW(r)}{dr} = 4r_0^{-3} e^{-\frac{2r}{r_0}} r^2$$

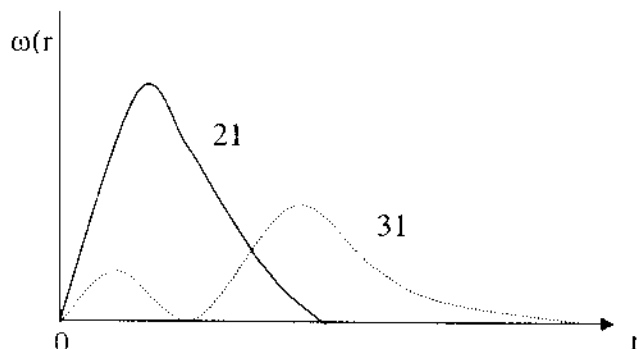
Ở đây $r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,529 \text{ \AA}$ là bán kính quỹ đạo Bohr thứ nhất.

Lí thuyết Bohr cho rằng electron chuyển động xung quanh hạt nhân theo quỹ đạo tròn (hoặc elip). Trên mỗi quỹ đạo đó momen động lượng của electron bằng một số nguyên lần hằng số $\hbar$. Ở trạng thái cơ bản electron chuyển động theo quỹ đạo tròn với bán kính bằng r_0 . Theo cơ học lượng tử electron chuyển động xung quanh hạt nhân và được phân bố như một "đám mây" quanh hạt nhân, có chỗ xác suất tìm thấy hạt lớn, có chỗ xác suất tìm thấy hạt bé, hình dung như chỗ dày đặc, chỗ thưa mỏng của đám mây. Ở trạng thái cơ bản thì xác suất phân bố cực đại ở một khoảng cách tâm là r_0 , nghĩa là trên một mặt cầu có bán kính r_0 . Hình 28 và hình 29 biểu diễn xác suất phân bố theo bán kính đối với một vài trạng thái.

Tiếp tục xét sự phân bố xác suất theo góc, ở trạng thái cơ bản xác suất phân bố hạt không phụ thuộc vào góc. Ở các trạng thái kích thích do có $l \neq 0$ nên không còn đối xứng cầu. Thí dụ ở trạng thái p ($l = 1$ và $m = 0, \pm 1$) ứng với ba trạng thái $Y_{1,0}$, $Y_{1,1}$, $Y_{1,-1}$. Sự phân bố hạt theo góc ở ba trạng thái này được mô tả ở hình 25.



Hình 28



Hình 29

§6. ROTATO

Một hệ gồm hai hạt liên kết chặt chẽ với nhau và thực hiện chuyển động quay được gọi là rotato. Loại chuyển động này thường gặp ở phân tử hai nguyên tử.

Hai hạt A và B có khối lượng tương ứng là m_A và m_B , với thế năng tương tác giữa chúng là $U(r)$ (r là khoảng cách giữa hai hạt) sẽ thực hiện chuyển động tương đối giống như chuyển động của chất điểm có khối lượng rút gọn là $m = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B}$ và chuyển động tịnh tiến giống như chuyển động tự do của chất điểm có khối lượng $M = m_A + m_B$.

Toán tử năng lượng $\hat{H}$ cho chuyển động tương đối của hệ hai hạt liên kết (như phân tử hai nguyên tử) trong hệ tọa độ cầu có dạng:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\varphi} \right] + U(r)$$

Các góc θ, φ xác định phương của đường thẳng nối hai nguyên tử.

Bằng phương pháp phân li biến số, ta tìm được nghiệm của phương trình Schrodinger $\hat{H}\Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi)$

là $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$

Thay nghiệm này vào phương trình Schrodinger và sau khi biến đổi ta thu được hai phương trình:

– Phương trình $\Delta_{\theta\varphi} Y(\theta, \varphi) + \lambda Y(\theta, \varphi) = 0$ xác định hàm cầu chung cho mọi chuyển động trong trường xuyên tâm.

– Phương trình bán kính:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[E - U(r) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) \right] R(r) = 0 \quad (6.30)$$

Đặt $V(r) = rR(r)$ và thay vào (6.30), ta được:

$$\frac{d^2 V}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] V = 0 \quad (6.31)$$

ở đây số hạng $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$ có thể coi là thế năng phụ, do đó thế năng hiệu dụng của chuyển động theo bán kính có dạng

$$W_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

Hình dưới (H.30) biểu diễn đồ thị của $W_l(r)$, ta thấy:

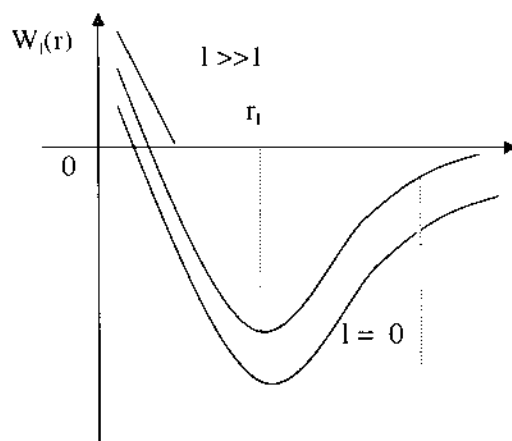
+ Khi $l = 0$ thì $W_0(r) = U(r)$.

Trường hợp này năng lượng là liên tục khi $E > 0$ và gián đoạn khi $E < 0$

+ Khi $l \gg 1$ thì $W_l(r) > 0$

Trường hợp này ứng với chuyển động quay mạnh : phân tử bị phân li thành các nguyên tử A, B do tác dụng của lực li tâm lớn.

Do vậy, ta chỉ xét trường hợp chuyển động quay nhỏ, nghĩa là trường hợp $W_l(r)$ khác $U(r)$ rất ít, ít nhất là tại miền cực tiểu của $U(r)$ (điểm $r = r_1$). Toạ độ cực tiểu r_1 của $w_l(r)$ được xác định từ điều kiện:



Hình 30

$$\frac{dw_l(r)}{dr} = \frac{dU(r)}{dr} - \frac{\hbar^2}{mr^3} l(l+1) = 0$$

Khai triển $W_l(r)$ theo lũy thừa của $(r - r_1)$

$$W_l(r) = W_l(r_1) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2 W_l(r)}{dr^2} \right)_{r_1} (r - r_1)^2 + \dots \quad (6.32)$$

trong đó: $W_l(r_1) = U(r_1) + \frac{\hbar^2}{2mr_1^2} l(l+1)$

Để liên hệ với bài toán dao động tử điều hoà tuyến tính, ta đưa vào kí hiệu:

$$\left(\frac{d^2 W_1(r_1)}{dr^2} \right) = m\omega_1^2; \quad m r_1^2 = I_1 \quad \text{và} \quad x = r - r_1$$

Với kí hiệu mới này phương trình (6.32) sẽ là:

$$W_1(r) = W_1(r_1) + \frac{1}{2} m \omega_1^2 x^2 + \dots = U(r_1) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_1^2} + \frac{1}{2} m \omega_1^2 x^2 + \dots$$

Thay biểu thức này vào (6.31) và để ý đến biểu thức $W_1(r)$, ta được:

$$\frac{d^2 V}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - U(r_1) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I_1} - \frac{1}{2} m \omega_1^2 x^2 \right] V = 0 \quad (6.33)$$

Trong phương trình (6.33), nếu đặt:

$$E' = E - U(r_1) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I_1}$$

$$\text{ta có} \quad \frac{d^2 V}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E' - \frac{1}{2} m \omega_1^2 x^2) V = 0 \quad (6.34)$$

Đây chính là phương trình của dao động tử điều hoà tuyến tính và nghiệm của nó có dạng:

$$E' = \hbar \omega_1 \left(n + \frac{1}{2} \right) ; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\text{Từ đó } E_{nl} = U(r_1) + \hbar \omega_1 \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I_1} \quad (6.35)$$

Trong phương trình (6.35) số hạng thứ nhất ở vế phải là năng lượng của electron (kể cả năng lượng tương tác coulomb của hạt nhân khi $r = r_1$). Số hạng thứ hai là năng lượng dao động với tần số ω_1 của các hạt nhân trong phân tử. Số hạng thứ ba là năng lượng quay của phân tử. Ta đã biết $\hbar^2 l(l+1)$ là trị riêng của $\hat{M}^2$, nên biểu thức năng lượng quay của phân tử trong cơ học lượng tử có dạng như trong cơ học cổ điển $\left(\frac{M^2}{2I} \right)$.

Như vậy, năng lượng của chuyển động quay bị lượng tử hoá, khoảng cách giữa hai mức năng lượng quay liên tiếp là:

$$\Delta E_{l+1} - E_l = \frac{\hbar(l+1)}{I_l}$$

Biết nghiệm $V(r)$ của phương trình (6.34) ta dễ dàng tìm được nghiệm của phương trình (6.30), từ đó tìm được hàm sóng biểu diễn trạng thái của Rotato

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} V_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Hàm này diễn tả chuyển động quay và chuyển động dao động của phân tử hai nguyên tử.

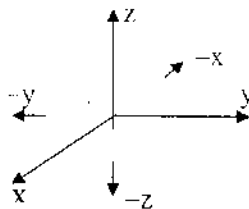
§7. ĐỊNH LUẬT BẢO TOÀN TÍNH CHẤM LẼ

Các định luật bảo toàn mà ta thường gặp như bảo toàn năng lượng, bảo toàn xung lượng,... là những định luật lượng tử tương tự như những định luật cổ điển. Song trong cơ học lượng tử còn có những định luật mà không có sự tương tự với cơ học cổ điển. Một trong những định luật đó là định luật bảo toàn tính chẵn lẻ, liên quan đến phép biến đổi đảo hệ toạ độ, tức là đổi dấu các toạ độ. Cụ thể trong hệ toạ độ vuông góc:

$$x \rightarrow -x$$

$$y \rightarrow -y$$

$$z \rightarrow -z$$



Hình 31

Phép đảo hệ toạ độ tương đương với sự thay đổi hệ toạ độ phải bằng hệ toạ độ trái.

Toán tử năng lượng $\hat{H}$ của một hệ kín (hệ cô lập) là bất biến với phép biến đổi đảo. Thật vậy, toán tử này có dạng:

$$\hat{H} = \sum_j -\frac{\hbar^2}{2m_j} \nabla_j^2 + \sum_{j \neq k} U_{jk}(\vec{r}_j - \vec{r}_k)$$

Với thế năng tương tác giữa hai hạt chỉ phụ thuộc vào khoảng cách giữa chúng. Năng lượng E (trị riêng của $\hat{H}$) không thay đổi khi $\vec{r}_j \rightarrow -\vec{r}_j$. Nếu hệ không kín mà nằm trong trường ngoài thì E vẫn bất biến nếu trường ấy là xuyên tâm và lấy tâm làm gốc của hệ toạ độ, vì ở đây $\hat{H}$ chỉ có thêm thành phần $\sum_j U(r_j)$ mà thành phần này cũng bất biến khi đảo hệ toạ độ.

Ta đưa vào toán tử đảo hệ toạ độ $\hat{I}$, nghĩa là:

$$\hat{I}\Psi(\vec{r}) = \Psi(-\vec{r})$$

$$\text{hay} \quad \hat{I}\Psi(\vec{r}) = I\Psi(\vec{r})$$

Ở đây I là trị riêng của $\hat{I}$ tương ứng với hàm riêng $\Psi(\vec{r})$, tác dụng $\hat{I}$ lên $\Psi(\vec{r})$ lần nữa.

$$\hat{I}^2\Psi(\vec{r}) = I^2\Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}) \quad (6.36)$$

Chú ý rằng khi đảo hai lần thì hệ toạ độ lại trở về trạng thái ban đầu. Từ phương trình (6.36) ta suy ra:

$$I^2 = 1 \rightarrow I = \pm 1$$

$$\text{N như vậy } \hat{I}\Psi(\vec{r}) = \Psi(-\vec{r}) = \pm\Psi(\vec{r})$$

Ta thấy, khi đảo hệ toạ độ thì hàm sóng $\Psi(\vec{r})$ có thể không đổi dấu (hàm sóng chẵn) hoặc đổi dấu (hàm sóng lẻ). Ta nói hệ được biểu diễn bằng hàm sóng chẵn thì có tính chẵn lẻ dương, hệ được biểu diễn bằng hàm sóng lẻ thì có tính chẵn lẻ âm.

Toán tử Hamilton là bất biến đối với phép biến đổi đảo, nghĩa là $\hat{H}$ giao hoán với $\hat{I}$:

$$[\hat{H}, \hat{I}] = 0$$

Nếu hệ có momen xung lượng xác định thì nó có tính chẵn lẻ xác định, vì toán tử $\hat{I}$ giao hoán với các toán tử $\hat{M}^2$ và $\hat{M}_x$ (cũng như $\hat{M}_y$) và các toán tử này không đổi khi đảo hệ toạ độ. Theo định lý chung tính chẵn lẻ là tích phân chuyển động. Như vậy, nếu hệ đã ở trạng thái chẵn

(tính chẵn lẻ dương) thì không thể chuyển sang trạng thái lẻ (tính chẵn lẻ âm). Định luật này chỉ đúng với tương tác mạnh và tương tác điện từ, như tương tác giữa các nuclon là tương tác mạnh, tương tác liên quan đến các hạt mang điện là tương tác điện từ. Định luật này không đúng đối với tương tác yếu, như tương tác gây nên hiện tượng phân rã của các hạt nhân là tương tác yếu.

NGUYÊN TỬ TRONG TỪ TRƯỜNG NGOÀI

§1. MOMEN CƠ VÀ MOMEN TỪ CỦA ELECTRON

Xét electron chuyển động trong nguyên tử hiđrô và các ion tương tự. Electron có khối lượng $m_e = 9,1.10^{-31}\text{kg}$ và điện tích $e = -1,6.10^{-19}\text{C}$.

* Theo cơ học cổ điển, electron như một chất điểm chuyển động trên quỹ đạo tròn, bán kính r , với vận tốc v xung quanh hạt nhân sẽ sinh ra dòng điện:

$$I = e \frac{v}{2\pi r}$$

Trong đó: e là điện tích của electron, $\frac{v}{2\pi r}$ là số vòng quay trong một giây.

Diện tích được bao quanh bởi dòng điện: $S = \pi r^2$

Khi chuyển động trên quỹ đạo electron có momen quỹ đạo (momen cơ)

$$\vec{M} = [\vec{r} \times \vec{p}]$$

với độ lớn $M = m_e v r$

và có momen từ $\mu = IS = \frac{1}{2} e v r$ (hệ SI)

Nếu dùng hệ CGS: $\mu = \frac{1}{c} IS = \frac{1}{2c} e v r$, (c là vận tốc ánh sáng).

μ hướng vuông góc với mặt phẳng quỹ đạo, cùng phương và ngược chiều với $\vec{M}$. Vectơ $\vec{M}$ vuông góc với mặt phẳng quỹ đạo.

Từ kết quả trên ta suy ra:

$$\frac{|\mu|}{|\vec{M}|} = \frac{e}{2m_e} \quad (7.1)$$

Đây là tỉ số từ hồi chuyển và giá trị này không đổi đối với mọi quỹ đạo.

* Theo lí thuyết của Bohr, electron chuyển động trên quỹ đạo tròn trong nguyên tử hiđrô có momen quỹ đạo bằng một số nguyên lần hằng số $\hbar$

$$M = n\hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Và momen từ $\mu = \frac{e}{2m_e} \hbar n$

$$\text{Đại lượng } \mu_0 = \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 9,273 \cdot 10^{-24} \text{ J/T} \quad (7.2)$$

gọi là Manheton Bohr

Electron có momen riêng gọi là spin $S = \frac{1}{2} \hbar$

Đồng thời có momen từ riêng $\mu_s = \frac{e\hbar}{2m_e} = \mu_0$

Ta thấy $\frac{\mu_s}{S} = \frac{e}{m_e} \quad (7.3)$

Tỉ số này lớn gấp đôi tỉ số từ hồi chuyển.

* Theo cơ học lượng tử, electron chuyển động xung quanh hạt nhân có momen động lượng được biểu diễn bằng các toán tử $\hat{M}^2$ và $\hat{M}_z$, các toán tử này có trị riêng là

$$M^2 = \hbar^2 l(l+1) \quad , \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

$$M_z = \hbar m \quad , \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Theo quan điểm của cơ học lượng tử electron có momen cơ riêng gọi là spin và spin là thuộc tính riêng của hạt.

$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)} = \frac{\hbar \sqrt{3}}{2} \quad ; \quad \text{với } s = \frac{1}{2} \quad (7.4)$$

$$\text{Hình chiếu của } S \text{ trên trục } z: S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar \quad (7.5)$$

Tỉ số giữa momen từ và momen quỹ đạo cũng giống như trong cơ học cổ điển, nghĩa là:

$$\frac{\mu}{M} = \frac{e}{2m_e}$$

$$\text{Vậy } \mu = \frac{e}{2m_e} M = \frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{l(l+1)} = \mu_0 \sqrt{l(l+1)} = \mu_l \quad (7.6)$$

$$\text{Hình chiếu trên trục z: } \mu_z = \mu_0 m \quad (7.7)$$

Còn tỉ số giữa μ_s và S cũng giống như trong cơ học cổ điển, tức là:

$$\frac{\mu_s}{S} = \frac{e}{m_e} \rightarrow \mu_s = \frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{3} = \sqrt{3} \mu_0 \quad (7.8)$$

Xét quy tắc cộng momen động lượng trong cơ học lượng tử. Giả sử có hai momen động lượng là $\vec{M}_1$ và $\vec{M}_2$, nếu bỏ qua tương tác làm thay đổi momen động lượng của hệ thì momen $\vec{M}$ của hệ là:

$$\vec{M} = \vec{M}_1 + \vec{M}_2$$

Độ lớn của chúng được tính theo công thức

$$M = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad ; \quad M_z = \hbar m$$

$$M_1 = \hbar \sqrt{l_1(l_1+1)} \quad ; \quad M_{1z} = \hbar m_1$$

$$M_2 = \hbar \sqrt{l_2(l_2+1)} \quad ; \quad M_{2z} = \hbar m_2$$

Nếu biết l_1, l_2, m_1, m_2 sẽ tính được M và M_z .

$$\text{Do } M_z = M_{1z} + M_{2z} = m_1 \hbar + m_2 \hbar = m \hbar$$

$$\text{suy ra: } m = m_1 + m_2$$

Khi hai vectơ $\vec{M}_1$ và $\vec{M}_2$ cùng phương ta có: $l = l_1 + l_2, \dots, |l_1 - l_2|$, các trường hợp còn lại thì l lấy các giá trị ở trong khoảng giữa hai giá trị trên. Từ đó xác định được l , tất cả có $2l_2 + 1$ giá trị (nếu $l_1 > l_2$). Vì $m_{\max} = l$, do đó giá trị cực đại của l là $l_1 + l_2$ và giá trị cực tiểu của l là $|l_1 - l_2|$.

Ví dụ, đối với electron: momen động lượng toàn phần

$$\vec{J} = \vec{M} + \vec{S} \quad ; \quad J_z = M_z + S_z$$

Độ lớn của M, S và J được xác định theo công thức:

$$M = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)} = \hbar \frac{\sqrt{3}}{2} \quad ; \quad (s = \frac{1}{2})$$

$$J = \hbar \sqrt{j(j+1)} \quad (j \text{ có giá trị : } l + \frac{1}{2} \text{ và } l - \frac{1}{2})$$

Tương tự momen từ toàn phần của electron:

$$\mu_{\text{tf}} = \mu_l + \mu_s \quad \left\{ \begin{array}{l} \mu_l = \mu_0 \sqrt{l(l+1)} \\ \mu_s = \mu_0 \sqrt{3} \end{array} \right.$$

§2 . DÒNG ĐIỆN TRONG NGUYÊN TỬ HIĐRO

Trường lực của nguyên tử hiđro có tính chất đối xứng cầu, trong hệ tọa độ cầu hàm sóng diễn tả trạng thái của nguyên tử có dạng:

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} = R(r) \theta(\theta) \phi(\varphi)$$

Theo hàm sóng tính được mật độ xác suất và mật độ dòng xác suất:

$$\omega = \Psi^* \Psi$$

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m_e} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$$

Từ đó, nếu nhân mật độ dòng xác suất $\vec{J}$ với điện tích e của electron ta có mật độ dòng điện:

$$\vec{J}_e = \frac{i\hbar e}{2m_e} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$$

Trong hệ tọa độ cầu $M_z = m\hbar$

và $\nabla_r = \frac{\partial}{\partial r}; \quad \nabla_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}; \quad \nabla_\varphi = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$

Vì $R(r)$ và $\theta(\theta)$ là các hàm thực nên J_r và J_θ bằng 0, nghĩa là dòng điện dọc theo bán kính và dọc theo kinh tuyến bằng 0. Còn dòng điện dọc theo vĩ tuyến khác 0, vì:

$$J_\phi = eJ = \frac{i\hbar e}{2m_e r \sin \theta} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial \phi} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} \right) = \frac{e\hbar}{m_e r \sin \theta} |\Psi|^2 m \quad (7.9)$$

Ta xét dòng điện chạy qua phần tử diện tích $d\sigma$ của mặt phẳng kinh tuyến

$$dI = J_\phi d\sigma = eJ d\sigma$$

Dòng điện tròn bao quanh diện tích $S = \pi r^2 \sin^2 \theta$ tương đương với một nam châm. Nam châm này có đại lượng đặc trưng là momen từ và hình chiếu của momen từ trên trục z

$$d\mu_z = dI \cdot S = J_\phi d\sigma S = \frac{\pi r \sin \theta \cdot e\hbar}{m_e} m |\Psi|^2 d\sigma \quad (7.10)$$

Lấy tích phân (7.10), ta được μ_z . Do đó momen từ μ (gây nên bởi chuyển động của electron) của nguyên tử có hình chiếu trên trục z là:

$$\mu_z = \int d\mu_z = \frac{me\hbar}{2m_e} \int_v |\Psi|^2 2\pi r \sin \theta d\sigma$$

Tích phân này lấy trong toàn không gian. Yếu tố $2\pi r \sin \theta d\sigma = dv$ chính là thể tích của ống dòng có tiết diện $d\sigma$. Theo điều kiện chuẩn hoá

$$\int_v |\Psi|^2 dv = 1$$

Tóm lại:

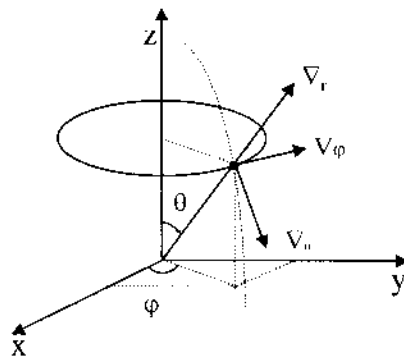
$$\mu_z = \frac{e\hbar}{2m_e} m = \mu_0 \cdot m \quad ; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Nghĩa là ta đã chứng minh được biểu thức (7.7)

Ta thấy tỉ số $\frac{\mu_z}{M_z} = \frac{e}{2m_e}$ trùng với kết quả cổ điển.

Vì z là bất kì nên tỉ số này cũng đúng cho $\left| \frac{\vec{\mu}}{M} \right|$.

Vậy, trừ trường hợp $m = 0$, trong nguyên tử hiđrô có dòng điện chạy sinh ra momen từ: nguyên tử giống như một nam châm nhỏ. Hệ quả của phương trình Schrodinger là ở trạng thái cơ bản momen từ của nguyên tử bằng không, tức là nguyên tử không phản ứng với trường ngoài. Điều này trái với thực nghiệm, vì thực nghiệm chứng tỏ ở trạng thái cơ bản momen từ của nguyên tử hiđrô có hai hướng xác định. Sở dĩ như vậy vì phương trình Schrodinger chưa diễn tả một thuộc tính quan trọng của electron – đó là spin.



Hình 33

§3. PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER CỦA ELECTRON TRONG TỪ TRƯỜNG

Cho tới nay ta mới chỉ xét chuyển động của các hạt trong trường thế vô hướng ($\vec{F} = -\nabla U$). Bây giờ ta sẽ mở rộng phương trình Schrodinger cho hạt mang điện e chuyển động trong từ trường. Giả sử từ trường ngoài có cường độ $\vec{H} = \text{rot} \vec{A}$, $\vec{A}$ là thế vectơ. Trước hết tìm dạng toán tử Hamilton trong trường hợp này. Đối với trường tĩnh điện có thế V , thì

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m_e} + eV$$

Khi có cả điện trường và từ trường thì xung lượng toàn phần là:

$$\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A}. \text{ Do đó } H = \frac{1}{2m_e} \left(\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + eV$$

$$\text{ở đây: } \left(\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 = \left(P_x - \frac{e}{c} A_x \right)^2 + \left(P_y - \frac{e}{c} A_y \right)^2 + \left(P_z - \frac{e}{c} A_z \right)^2$$

Chuyển sang dạng toán tử:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} (-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \hat{A})^2 + eV \quad (7.11)$$

Trong đó:

$$(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \hat{A})^2 = (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} \hat{A}_x)^2 + (-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} \hat{A}_y)^2 + (-i\hbar \frac{\partial}{\partial z} - \frac{e}{c} \hat{A}_z)^2$$

Để đưa biểu thức này về dạng tường minh, trước hết ta biến đổi thành phần theo trục x, sau đó suy ra kết quả tương tự cho các thành phần còn lại.

$$\begin{aligned} \text{Cụ thể: } (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} \hat{A}_x)^2 \Psi &= (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} \hat{A}_x)(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} \hat{A}_x) \Psi = \\ &= -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + i\hbar \frac{e}{c} \frac{\partial}{\partial x} (\hat{A}_x \Psi) + i\hbar \frac{e}{c} \hat{A}_x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{e^2}{c^2} \hat{A}_x^2 \Psi \end{aligned}$$

Đối với hai thành phần còn lại, ta cũng thu được kết quả tương tự:

$$\begin{aligned} (-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} \hat{A}_y)^2 \Psi &= -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + i\hbar \frac{e}{c} \frac{\partial}{\partial y} (\hat{A}_y \Psi) + i\hbar \frac{e}{c} \hat{A}_y \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \frac{e^2}{c^2} \hat{A}_y^2 \Psi \\ (-i\hbar \frac{\partial}{\partial z} - \frac{e}{c} \hat{A}_z)^2 \Psi &= -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + i\hbar \frac{e}{c} \frac{\partial}{\partial z} (\hat{A}_z \Psi) + i\hbar \frac{e}{c} \hat{A}_z \frac{\partial \Psi}{\partial z} + \frac{e^2}{c^2} \hat{A}_z^2 \Psi \end{aligned}$$

Cộng 3 đẳng thức trên với nhau và lưu ý rằng:

$$\hat{A}_x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \hat{A}_y \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \hat{A}_z \frac{\partial \Psi}{\partial z} = \hat{A} \text{ grad } \Psi$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (\hat{A}_x \Psi) + \frac{\partial}{\partial y} (\hat{A}_y \Psi) + \frac{\partial}{\partial z} (\hat{A}_z \Psi) = \text{div}(\hat{A} \Psi)$$

Vậy ta có phương trình:

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \Psi + \frac{i\hbar e}{2m_e c} \left[\hat{A} \text{ grad } \Psi + \text{div}(\hat{A} \Psi) \right] + \frac{e^2}{2m_e c^2} \hat{A}^2 \Psi + U\Psi = E\Psi \quad (7.12)$$

(đặt $U = eV$)

Nhận xét $\text{div}(\hat{A} \Psi) = \Psi \text{ div } \vec{A} + \vec{A} \text{ grad } \Psi$

Vì thế vectơ $\vec{A}$ chỉ được xác định tới gradien của một hàm vô hướng tùy ý, nên bao giờ cũng có thể chọn $\text{div } \vec{A} = 0$. Thật vậy, nếu $\vec{A}$ không thỏa mãn điều kiện này thì cũng có thể thay bằng vectơ:

$\vec{A}' = \vec{A} + \text{grad}f$, ở đây f là đại lượng vô hướng tùy ý và chọn f sao cho $\text{div grad}f = -\text{div } \vec{A}$, khi đó:

$$\text{div } \vec{A}' = \text{div}(\vec{A} + \text{grad}f) = \text{div } \vec{A} + \text{div}(\text{grad}f) = 0$$

Trong khi đó từ trường $\vec{H} = \text{rot } \vec{A}$ không thay đổi, vì:

$$\vec{H} = \text{rot } \vec{A}' = \text{rot}(\vec{A} + \text{grad}f) = \text{rot } \vec{A} \quad (\text{vì } \text{rot grad}f = 0)$$

Cuối cùng phương trình (7.12) chuyển thành:

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \Psi + \frac{i\hbar e}{m_e c} \hat{A} \text{grad} \Psi + \frac{e^2}{2m_e c^2} \hat{A}^2 \Psi + U\Psi = E\Psi \quad (7.13)$$

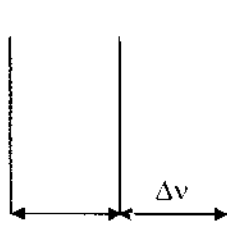
Vì tác dụng của từ trường yếu hơn tác dụng của điện trường nhiều, nên trong trường hợp điện từ trường yếu, có thể bỏ qua số hạng chứa $\hat{A}^2$, thành ra:

$$\nabla^2 \Psi + \frac{2e}{i\hbar} \hat{A} \text{grad} \Psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - U)\Psi = 0 \quad (7.14)$$

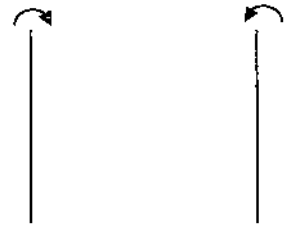
(7.14) là phương trình Schrodinger diễn tả chuyển động của electron trong điện từ trường yếu.

§4 . HIỆU ỨNG ZEEMAN ĐƠN GIẢN

Nếu đặt nguồn sáng (hơi nguyên tử hiđrô hay ion tương tự) trong từ trường, người ta thấy mỗi vạch quang phổ bị tách thành ba: vạch giữa không di chuyển, xuất hiện thêm hai vạch ở hai bên đối xứng – hiện tượng này gọi là hiệu ứng Zeeman đơn giản, do Zeeman tìm ra năm 1896.



Hình 34



a. Quan sát theo phương vuông góc với phương từ trường

$$\Delta v = \frac{eH}{4\pi m_e c} (s^{-1})$$

b. Quan sát dọc theo phương từ trường

Lí thuyết cổ điển của Lorentz cũng giải thích được hiệu ứng Zeeman đơn giản, ở đây ta giải thích hiệu ứng này theo cơ học lượng tử.

Giả sử từ trường H là đều và song song với trục z , ta có:

$$H_x = H_y = 0; H_z = H$$

Độ lớn của H tính được theo thế vectơ $\vec{A}$

$$\vec{H} = \text{rot} \vec{A} \rightarrow \vec{A} = \frac{1}{2} [\vec{H} \times \vec{r}]$$

$$\text{Từ đó suy ra } A_x = -\frac{1}{2}Hy, \quad A_y = \frac{1}{2}Hx, \quad A_z = 0$$

$$\text{Vậy } \vec{A} \text{grad} \Psi = A_x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + A_y \frac{\partial \Psi}{\partial y} + A_z \frac{\partial \Psi}{\partial z} = \frac{H}{2} (x \frac{\partial \Psi}{\partial y} - y \frac{\partial \Psi}{\partial x})$$

$$\text{Chuyển sang tọa độ cầu } \vec{A} \text{grad} \Psi = \frac{H}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial \phi}$$

Do vậy phương trình Schrodinger (7.14) chuyển thành:

$$\nabla^2 \Psi + \frac{eH}{i\hbar c} \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} + \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - U) = 0 \quad (7.15)$$

Ta tìm nghiệm của phương trình (7.15) dưới dạng:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)\theta(\theta)\phi(\phi)$$

Trong đó $\phi(\phi)$ có dạng $e^{im\phi}$

$$\text{Thành ra } \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} = im\Psi \quad \text{và} \quad \frac{eH}{i\hbar c} \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} = m \frac{eH}{\hbar c} \Psi$$

Cuối cùng ta được:

$$\nabla^2 \Psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} (E + \frac{e\hbar H}{2m_e c} m - U) \Psi = 0 \quad (7.16)$$

Đặt $E' = E + \frac{e\hbar H}{2m_e c} m$

ta có $\nabla^2 \Psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} (E' - U) \Psi = 0$

Đây là phương trình quen thuộc có trị riêng E' là các mức năng lượng của nguyên tử hiđrô trong từ trường. Các mức E' liên quan đến các mức E bởi phương trình:

$$E'_n = E_n + \frac{e\hbar H}{2m_e c} m$$

Trong đó $n = 1, 2, 3, \dots$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \quad (\text{tất cả có } 2l + 1 \text{ giá trị})$$

Vì m lấy $2l + 1$ giá trị nên mỗi mức năng lượng E_n (khi không có từ trường), tách thành $(2l + 1)$ mức E'_n (khi có từ trường). Ta nói từ trường đã khử mất sự suy biến theo số lượng tử m .

Tần số quang phổ khi có từ trường được tính theo công thức:

$$\nu_{jk} = \frac{E'_j - E'_k}{h} = \frac{E_j - E_k}{h} + \frac{eH}{4\pi m_e c} \Delta m = \nu_{0jk} + \frac{eH}{4\pi m_e c} \Delta m$$

ν_0 – tần số khi không có từ trường. Theo quy tắc lựa chọn $\Delta m = 0, \pm 1$

Vậy:

$$\nu_{jk} = \begin{cases} \nu_{0jk} + \frac{eH}{4\pi m_e c} \\ \nu_{0jk} \\ \nu_{0jk} - \frac{eH}{4\pi m_e c} \end{cases}$$

Tức là mỗi vạch ν_{jk} tách thành ba vạch.

(Chú thích: Trong hệ SI $\Delta v = \frac{e\mu'_0 H}{4\pi m_e}$; ở đây $\mu'_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ (Henry/mét)

là hằng số từ).

Hiện tượng đơn giản này chỉ quan sát thấy trong một số trường hợp nhất định. Trong đa số trường hợp sự tách vạch quang phổ dưới tác dụng của từ trường phức tạp hơn và không thể giải thích được bằng phương trình Schrodinger, vì phương trình này chưa tính đến spin của electron.

CƠ SỞ CỦA LÍ THUYẾT BIỂU DIỄN

§1. CÁC PHÉP BIỂU DIỄN TRẠNG THÁI CÁC HỆ LƯỢNG TỬ

Như đã biết, trong cơ học lượng tử không tồn tại những hệ, trong đó hai đại lượng liên hợp chính tắc có giá trị đồng thời xác định, nghĩa là không đồng thời đo được chúng hoàn toàn chính xác.

Do đó, đối với mỗi hệ lượng tử, tất cả các máy đo có thể chia thành hai nhóm. Mỗi nhóm phân loại hạt theo dấu hiệu đặc trưng, cho bởi một nhóm máy bất kì, khác nhau; mà chính những dấu hiệu này sẽ loại trừ các dấu hiệu đặc trưng cho bởi nhóm máy khác.

Ví dụ, một tập hợp hạt có toạ độ trọng tâm là (x, y, z) thì có thể chia các máy đo thành hai nhóm: nhóm thứ nhất phân tích tập hợp hạt theo toạ độ (x, y, z) và các hàm của toạ độ $F(x, y, z)$ (ví dụ theo thế năng $U(x, y, z)$); nhóm thứ hai phân tích tập hợp hạt theo xung lượng (P_x, P_y, P_z) và theo các hàm của xung lượng $\phi(P_x, P_y, P_z)$ (ví dụ theo động năng $T(P_x, P_y, P_z)$...).

Cho đến nay ta mới chỉ biểu diễn trạng thái của hạt bằng hàm của toạ độ $\Psi(\vec{r})$. Việc phân loại hạt theo toạ độ $\vec{r}$ được tiến hành bằng các máy đo của nhóm 1 sẽ loại trừ việc phân loại hạt theo xung lượng $\vec{P}$ được tiến hành bằng các máy đo của nhóm 2. Song tưởng tượng việc phân loại hạt không theo toạ độ $\vec{r}$ mà theo xung lượng $\vec{P}$, khi đó cần chọn các máy đo thuộc nhóm 2.

Tóm lại, nếu trạng thái của tập hợp được biểu diễn bằng hàm của toạ độ $\Psi(\vec{r})$ thì nó cũng có thể được biểu diễn bằng hàm của xung lượng $\phi(\vec{P})$. Trong trường hợp thứ nhất, ta nói trạng thái tương ứng với nhóm máy phân tích tập hợp hạt theo toạ độ. Trong trường hợp thứ hai, ta nói trạng thái ứng với nhóm máy phân tích tập hợp hạt theo xung lượng. Nói một cách ngắn gọn: Trạng thái được cho trong " $\vec{r}$ " – biểu diễn hay trong " $\vec{P}$ " – biểu diễn. Vậy ta cần tìm mối liên hệ giữa các phép biểu diễn.

Giả sử cho hàm sóng $\Psi(\vec{r}, t)$ (" $\vec{r}$ " – biểu diễn). Khai triển hàm $\Psi(\vec{r}, t)$ theo các hàm riêng của toán tử xung lượng $\Psi_p(\vec{r})$:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int c(\vec{P}, t) \Psi_p(\vec{r}) d\vec{p} \quad (8.1)$$

$$c(\vec{P}, t) = \int \Psi(\vec{r}, t) \Psi_p^*(\vec{r}) d\vec{v} \quad (8.2)$$

Nếu biết được biên độ $c(\vec{P}, t)$ thì sẽ xác định được hàm $\Psi(\vec{r}, t)$. Việc cho trước biên độ $c(\vec{P}, t)$ cho phép hoàn toàn xác định được $\Psi(\vec{r}, t)$.

Do đó, $c(\vec{P}, t)$ có thể coi như hàm sóng là hàm của xung lượng và biểu diễn cùng một ý nghĩa vật lý trạng thái của các hạt như hàm $\Psi(\vec{r}, t)$. Vậy biểu thức (8.1) coi như phép biến đổi hàm sóng từ " $\vec{P}$ " – biểu diễn sang " $\vec{r}$ " – biểu diễn và biểu thức (8.2) coi như phép biến đổi ngược lại, nghĩa là biến đổi hàm sóng từ " $\vec{r}$ " – biểu diễn sang " $\vec{P}$ " – biểu diễn.

Ngoài hai biểu diễn trên đây, có thể biểu diễn trạng thái của hạt theo cách khác, ví dụ biểu diễn bằng năng lượng. Giả sử toán tử năng lượng $\hat{H}$ có các trị riêng là $E_1, E_2, \dots, E_n$ và các hàm riêng là $\Psi_1(\vec{r}), \Psi_2(\vec{r}), \dots, \Psi_n(\vec{r})$. Ở đây năng lượng E được chọn làm biến số độc lập. Khai triển hàm $\Psi(\vec{r}, t)$ theo các hàm riêng $\Psi_n(\vec{r})$:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n(t) \Psi_n(\vec{r}) \quad (8.3)$$

$$c_n(t) = \int \Psi(\vec{r}, t) \Psi_n^*(\vec{r}) d\vec{v} \quad (8.4)$$

Việc cho trước các biên độ $c_n(t)$ cho phép hoàn toàn xác định được $\Psi(\vec{r}, t)$. Do đó tập hợp tất cả các hệ số $c_n(t)$ có thể coi như hàm sóng biểu diễn cùng một trạng thái như hàm $\Psi(\vec{r}, t)$ cho trong phép biểu diễn năng lượng, trong đó biến số độc lập được chọn là E . Theo quan điểm này biểu thức (8.3) là phép biến đổi hàm sóng từ " E " – biểu diễn sang " $\vec{r}$ " – biểu diễn và (8.4) là phép biến đổi ngược lại.

Từ các biểu thức trên ta suy ra: xác suất tìm thấy một giá trị xác định nào đó của các biến số độc lập bằng bình phương môđun hàm sóng trong phép biểu diễn tương ứng. Cụ thể:

– Xác suất tìm thấy giá trị tọa độ x nằm trong khoảng $x, x + dx$ là

$$W(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 dx$$

– Xác suất tìm thấy xung lượng P trong khoảng $P, P + dP$ là:

$$W(\bar{P}, t) = |c(\bar{P}, t)|^2 dP$$

– Xác suất tìm thấy năng lượng E_n là:

$$W(E_n, t) = |c_n(t)|^2 = |c(E_n, t)|^2.$$

§2. CÁC PHÉP BIỂU DIỄN CÁC TOÁN TỬ

Để việc miêu tả trạng thái Ψ theo các biến số độc lập khác nhau được đầy đủ, tổng quát, ta cần tìm thêm những phương pháp biểu diễn các toán tử theo chính các biến số độc lập đó. Cho đến nay ta mới coi các toán tử $\hat{L}$ như là hàm số của tọa độ, nghĩa là coi $\hat{L}$ có dạng $\hat{L}(-i\hbar\nabla_r, r)$, trong đó $\hat{L}$ tác dụng lên hàm $\Psi(r)$ cho hàm mới $\varphi(r)$

$$\varphi(r) = \hat{L}(-i\hbar\nabla_r, r)\Psi(r) \quad (8.5)$$

Như vậy có thể nói ta đã chọn $\hat{L}$ trong “ r ” – biểu diễn.

Hãy tìm toán tử $\hat{L}$ trong biểu diễn khác, ví dụ trong “ E ” – biểu diễn. Giả sử toán tử $\hat{H}$ có phổ trị riêng gián đoạn E_n tương ứng với các hàm riêng $\Psi_n(r)$. Từ đó có thể khai triển các hàm $\Psi(r)$ và $\varphi(r)$ theo các hàm riêng $\Psi_n(r)$

$$\left. \begin{aligned} \Psi(r) &= \sum_n c_n \Psi_n(r) \\ \varphi(r) &= \sum_n b_n \Psi_n(r) \end{aligned} \right\} \quad (8.6)$$

Tập hợp các hệ số c_n cho biết hàm số $\Psi(r)$ trong “ E ” – biểu diễn. Toán tử $\hat{L}$ đã biến đổi hàm $\Psi(r)$ thành hàm $\varphi(r)$ trong cùng một biểu diễn, đồng thời biến đổi các hệ số c_n thành các hệ số b_n . Vậy việc tìm toán tử $\hat{L}$ có thể biểu diễn trực tiếp các hệ số b_n qua các hệ số c_n , chính là phải tìm toán tử $\hat{L}$ trong “ E ” – biểu diễn.

Thế các hàm $\Psi(\vec{r})$ và $\varphi(\vec{r})$ ở (8.6) vào (8.5)

$$\sum_n b_n \Psi_n(\vec{r}) = \sum_n c_n \hat{L} \Psi_n(\vec{r})$$

Nhân 2 vế biểu thức này với $\Psi_m^*(\vec{r})$ và lấy tích phân theo $\vec{r}$ (chú ý tới tính trực giao của các hàm $\Psi_n(\vec{r})$), ta được:

$$b_m = \sum_n L_{mn} c_n \quad (8.7)$$

$$\text{Trong đó } L_{mn} = \int \Psi_m^*(\vec{r}) \hat{L} \Psi_n(\vec{r}) dV \quad (8.8)$$

Khi biết được các yếu tố L_{mn} theo (8.8) sẽ xác định được các hệ số b_m (biết được $\varphi(\vec{r})$ trong “E” – biểu diễn) theo các giá trị c_n (biết được $\Psi(\vec{r})$ trong “E” – biểu diễn). Vậy tập hợp các phần tử L_{mn} được coi như toán tử $\hat{L}$ trong “E” – biểu diễn. Tập hợp này có thể biểu diễn dưới dạng một ma trận.

§3. TOÁN TỬ VÀ MA TRẬN

1. Định nghĩa ma trận

Ma trận loại $m \times n$ là một bảng gồm $m \times n$ con số, được sắp xếp thành một bảng hình chữ nhật có m hàng và n cột

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} = \|a_{ij}\| \quad (8.9)$$

Các phần tử a_{ij} gọi là các yếu tố ma trận, nói chung là phức, i chỉ hàng, j chỉ cột.

Hai ma trận được gọi là bằng nhau $A = B$ khi tất cả các yếu tố $a_{ij} = b_{ij}$.

Nếu $m = 1$ ta có ma trận hàng $(a_{11}, a_{12}, \dots, a_{1n})$.

Nếu $n = 1$ ta có ma trận cột $\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \dots \\ a_{m1} \end{pmatrix}$

Nếu $m = n$ ta có ma trận vuông, m gọi là cấp của ma trận.

Ma trận vuông với các yếu tố $a_{ii} \neq 0$ còn tất cả các yếu tố $a_{ij} = 0$ gọi là ma trận chéo

$$\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

Ma trận chéo với các yếu tố a_{ii} bằng nhau nhưng khác đơn vị gọi là ma trận vô hướng. Ma trận chéo với tất cả các yếu tố $a_{ii} = 1$ gọi là ma trận đơn vị, kí hiệu bằng chữ I hay chữ E .

Nếu các yếu tố a_{ij} chuyển thành các yếu tố a_{ji} ta có ma trận chuyển vị, kí hiệu $A \rightarrow A^c$

Nếu các yếu tố $a_{ij} = a_{ji}$ ta có ma trận đối xứng

Nếu các yếu tố $a_{ij} = -a_{ji}$ ta có ma trận phản đối xứng

Nếu thay các yếu tố a_{ij} của ma trận A bằng các yếu tố a_{ij}^* ta được ma trận A^* là ma trận liên hợp phức của A .

Ma trận là thực nếu tất cả các yếu tố a_{ij} là thực, ma trận là phức khi có ít nhất một yếu tố là phức. Ma trận bằng không khi mọi yếu tố bằng không.

Ma trận $(A^c)^c = (A^*)^* = A^+$ gọi là ma trận liên hợp (kí hiệu A^c là ma trận chuyển vị).

Nếu $A^+ = A$ ta có ma trận tự liên hợp.

Nếu $AB = BA = E$ thì ta gọi B là nghịch đảo của A và kí hiệu $B = A^{-1}$.

2. Các phép tính về ma trận

– *Phép cộng*: $C = A + B$ tức là $c_{ij} = a_{ij} + b_{ij}$ (8.10)

$$(\alpha + \beta)A = \alpha A + \beta A$$

$$\alpha(A + B) = \alpha A + \alpha B$$

$$\alpha(\beta A) = (\alpha\beta)A$$

(α, β là các hằng số)

Phép cộng có tính chất giao hoán và tính chất kết hợp.

$$\text{– Phép nhân: } C = AB \quad \text{tức là} \quad c_{ij} = \sum_n a_{in} b_{nj} \quad (8.11)$$

$$C = \alpha A \quad \text{tức là} \quad c_{ij} = \alpha a_{ij}$$

Ta chỉ thực hiện được phép nhân hai ma trận khi số cột của ma trận thứ nhất bằng số hàng của ma trận thứ hai. Nói chung tích của hai ma trận không có tính chất giao hoán, nghĩa là $AB \neq BA$. Nếu $AB = BA$ ta nói A giao hoán với B.

Phép nhân có tính chất kết hợp và tính chất phân phối

$$(AB)C = A(BC)$$

$$A(B + C) = AB + AC$$

$$(B + C)A = BA + CA$$

$$\text{Chú ý: } (A^c)^c = A$$

$$(A + B)^c = A^c + B^c$$

$$(AB)^c = A^c B^c$$

3. Mối liên hệ giữa toán tử và ma trận

Cho toán tử $\hat{L}$, theo định nghĩa, tức là cho hệ thức:

$$\hat{L}\Psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) \quad (8.5)$$

Muốn chuyển hàm sóng từ biểu diễn tọa độ sang một biểu diễn bất kì F ta triển khai các hàm $\Psi(\vec{r})$ và $\varphi(\vec{r})$ theo các hàm riêng $\Psi_n(\vec{r})$ của toán tử $\hat{F}$. Giả sử $\hat{F}$ có phổ gián đoạn (phổ liên tục cũng tiến hành tương tự nhưng thay dấu $\sum$ bằng dấu $\int$), ta có:

$$\left. \begin{aligned} \Psi(\vec{r}) &= \sum_n c_n \Psi_n(\vec{r}) \\ \varphi(\vec{r}) &= \sum_n b_n \Psi_n(\vec{r}) \end{aligned} \right\} \quad (8.6)$$

Tập hợp các hệ số c_n và b_n cho phép xác định các hàm $\Psi(\vec{r})$ và $\varphi(\vec{r})$ trong biểu diễn F. Các tập hợp đó thường được viết dưới dạng ma trận

$$C = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_n \\ \dots \end{pmatrix}; \quad B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \\ \dots \end{pmatrix}$$

Thay (8.6) vào (8.5) và nhân cả hai vế với $\Psi_m^*(\vec{r})$ từ bên trái rồi lấy tích phân trên toàn miền biến thiên của biến số (chú ý đến điều kiện trực chuẩn), ta được:

$$b_m = \sum_n L_{mn} c_n \quad (8.7)$$

$$\text{Với } L_{mn} = \int \Psi_m^*(\vec{r}) \hat{L} \Psi_n(\vec{r}) dv \quad (8.8)$$

Nếu cho trước toán tử $\hat{L}$ hoàn toàn xác định được các phần tử L_{mn} . Hệ thức (8.5) xác định trực tiếp phép biến đổi hàm $\Psi(\vec{r})$ thành hàm $\varphi(\vec{r})$ dưới tác dụng của toán tử $\hat{L}$. Toán tử $\hat{L}$ trong “F” – biểu diễn được cho bằng hệ thức (8.8), nghĩa là cho dưới dạng ma trận. Như vậy cho ma trận L tương đương với việc cho toán tử $\hat{L}$. Hệ thức (8.7) có thể viết dưới dạng ma trận:

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} & \dots \\ L_{21} & L_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ L_{m1} & L_{m2} & \dots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_m \end{pmatrix} \dots$$

$$\text{Hay viết dưới dạng thu gọn } B = LC \quad (8.12)$$

Trong đó A và B là ma trận cột, L là ma trận loại $m \times n$.

Vì toán tử $\hat{L}$ là tự liên hợp nên ma trận L cũng là tự liên hợp. Thật vậy:

$$L_{mn} = \int \Psi_m^*(\vec{r}) \hat{L} \Psi_n(\vec{r}) dv$$

Vì theo định nghĩa của ma trận liên hợp $(L_{mn})^* = L_{nm}^*$, ta có:

$$L_{mn}^* = \int [\Psi_n^*(\vec{r}) \hat{L} \Psi_m(\vec{r})] dv$$

$$\int \Psi_n(\vec{r}) \hat{L}^* \Psi_m^*(\vec{r}) dv = \int \Psi_m^*(\vec{r}) \hat{L} \Psi_n(\vec{r}) dv$$

$$\text{So sánh ta thấy} \quad \|L_{mn}\| = \|L_{nm}^*\| \quad (\text{đpcm})$$

Vậy các đại lượng cơ học lượng tử không những được biểu diễn bằng các toán tử tự liên hợp mà còn được biểu diễn bằng các ma trận tự liên hợp.

Có nhiều cách biểu diễn hàm sóng và toán tử bằng ma trận vì ta có thể đổi hệ cơ sở. Nếu lấy các hàm riêng của toán tử năng lượng hay toán tử xung lượng làm hệ cơ sở thì ta có cách biểu diễn theo năng lượng hoặc xung lượng. Đặc biệt, nếu lấy chính các hàm riêng của toán tử $\hat{L}$ làm hệ cơ sở thì có phép biểu diễn riêng

$$L_{mn} = \int \Psi_m^*(\vec{r}) \hat{L} \Psi_n(\vec{r}) dv = L_n \delta_{mn} \quad (8.13)$$

Trong phép biểu diễn riêng ma trận của toán tử là một ma trận chéo, các phần tử nằm trên đường chéo chính là các trị riêng của toán tử.

§4. PHÉP CHUYỂN BIỂU DIỄN

Ở đây ta giới hạn chỉ xét trong biểu diễn Schrodinger. Nếu phổ trị riêng của các toán tử không thay đổi theo thời gian thì có thể dùng các toán tử, mà dạng toán học của nó không phụ thuộc vào thời gian. Trong trường hợp này thì sự thay đổi trạng thái theo thời gian được xác định bằng sự thay đổi của hàm sóng theo thời gian. Biểu diễn toán tử và hàm sóng như vậy gọi là biểu diễn Schrodinger. Trong biểu diễn Schrodinger sự thay đổi của hàm sóng theo thời gian xác định bởi phương trình Schrodinger.

Trong trường hợp hàm sóng không thay đổi theo thời gian, còn các toán tử của các đại lượng vật lý biến đổi theo thời gian ta có biểu diễn Heisenberg.

Khi nghiên cứu hệ gồm vài phần tử tương tác với nhau người ta thường dùng biểu diễn tương tác. Trong biểu diễn này toán tử Hamilton gồm hai phần: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$. Trong đó $\hat{H}_0$ là toán tử không tương tác, $\hat{V}$ là

toán tử tương tác. Biểu diễn tương tác là biểu diễn trung gian giữa biểu diễn Schrodinger và biểu diễn Heisenberg. Toán tử trong biểu diễn tương tác như toán tử trong biểu diễn Heisenberg của hệ với toán tử $\hat{H}_0$, còn sự thay đổi của hàm sóng theo thời gian trong biểu diễn này được thực hiện nhờ toán tử tương tác $\hat{V}$.

Ngoài ra người ta còn dùng những biểu diễn khác như biểu diễn lượng tử hoá lần thứ hai (hay còn gọi là biểu diễn lượng tử hoá thứ cấp).

Trước khi xét phép chuyển biểu diễn, ta tìm hiểu một số ý nghĩa hình học của hàm sóng.

1. Ý nghĩa hình học của hàm sóng

Coi hàm sóng Ψ đặc trưng cho trạng thái của hệ như vectơ Ψ trong không gian Hilbert vô hạn chiều. Mỗi đại lượng vật lý L đặc trưng cho tính chất của hệ ứng với một hệ trục tọa độ xác định, đó là các vectơ cơ sở $\Psi_1(\vec{r}), \Psi_2(\vec{r}), \dots, \Psi_n(\vec{r}), \dots$. Các vectơ này chính là các hàm riêng của toán tử $\hat{L}$ ứng với các trị riêng $L_1, L_2, \dots, L_n, \dots$ (Giả sử phổ các trị riêng là gián đoạn, song cũng có thể mở rộng cho trường hợp phổ liên tục). Các thành phần của vectơ Ψ trong hệ tọa độ vừa chọn là các biên độ $c_1, c_2, \dots, c_n, \dots$ trong hệ thức khai triển $\Psi = \sum_n c_n \Psi_n$. Ta đã biết các biên độ này được xác

định bằng công thức $c_n = \int \Psi_n^* \Psi dv$. Mặt khác đẳng thức này cũng có thể coi như tích vô hướng của hai vectơ Ψ_n và Ψ . Thật vậy nếu có hai vectơ $\varphi = \sum_n b_n \Psi_n, \Psi = \sum_n c_n \Psi_n$ thì tích vô hướng $(\varphi, \Psi) = \sum_n b_n^* c_n$; nếu φ, Ψ liên tục thì $(\varphi, \Psi) = \int \varphi^* \Psi dv$.

Tập hợp các hệ số c_n cho biết hàm sóng $\Psi(\vec{r})$ trong “ L ” – biểu diễn. Như vậy tập hợp các thành phần của vectơ Ψ trong hệ tọa độ, mà những vectơ đơn vị của chúng là các hàm riêng Ψ_n của toán tử $\hat{L}$ chính là hàm sóng Ψ trong “ L ” – biểu diễn. Hệ các vectơ cơ sở $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$ là hệ các vectơ đơn vị trực giao. Điều này được suy ra từ điều kiện trực chuẩn của các hàm riêng của $\hat{L}$

$$\int \Psi_n^* \Psi_m dv = (\Psi_n, \Psi_m) = \delta_{nm}$$

2. Phép biến đổi đơn nguyên

Trong §3 ta đã xét phép chuyển từ biểu diễn toạ độ sang biểu diễn F . Bây giờ xét một cách tổng quát hơn, đó là phép chuyển từ một biểu diễn bất kì này sang một biểu diễn bất kì khác. Để thuận tiện ta xét sự chuyển từ biểu diễn F (trong đó ma trận F có dạng chéo) sang biểu diễn D (ma trận D cũng có dạng chéo). Về mặt hình học nó có ý nghĩa là chuyển từ hệ toạ độ có các vectơ cơ sở là $\Psi_m(\vec{r})$ sang hệ toạ độ có các vectơ cơ sở là $\varphi_n(\vec{r})$ trong không gian Hilbert. Các hàm $\Psi_m(\vec{r})$ và $\varphi_n(\vec{r})$ là các hàm riêng của các toán tử $\hat{F}$ và $\hat{D}$ tương ứng.

Để có công thức biến đổi toạ độ, ta khai triển hàm $\varphi_n(\vec{r})$ theo các hàm $\Psi_m(\vec{r})$ (Giả sử phổ trị riêng là gián đoạn).

$$\varphi_n(\vec{r}) = \sum_m c_m \Psi_m(\vec{r}) = \sum_m S_{mn} \Psi_m(\vec{r}) \quad (8.14)$$

Trong đó c_m là các hệ số khai triển được xác định bởi hệ thức:

$$c_m = \int \Psi_m^*(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r}) d\vec{v}$$

$$\text{Đặt } c_m = S_{mn} = \int \Psi_m^*(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r}) d\vec{v} = (\Psi_m(\vec{r}), \varphi_n(\vec{r})) \quad (8.15)$$

Từ hệ thức (8.14) ta thấy: tập hợp các đại lượng S_{mn} lập thành một ma trận gọi là ma trận biến đổi từ biểu diễn này sang biểu diễn khác (hoặc biến đổi từ hệ toạ độ này sang hệ toạ độ khác).

Trước hết, ta xét tính chất của ma trận S . Chú ý đến điều kiện trực chuẩn của các hàm riêng $\Psi_m(\vec{r})$ và $\varphi_n(\vec{r})$, ta có:

$$\int \varphi_n^*(\vec{r}) \varphi_l(\vec{r}) d\vec{v} = \delta_{nl} \quad (8.16)$$

Thế (8.14) vào (8.16), ta được:

$$\begin{aligned} \int \varphi_n^*(\vec{r}) \varphi_l(\vec{r}) d\vec{v} &= \int \sum_m S_{mn}^* \Psi_m^*(\vec{r}) \sum_k S_{kl} \Psi_k(\vec{r}) d\vec{v} \\ &= \sum_{m,k} S_{mn}^* S_{kl} \int \Psi_m^*(\vec{r}) \Psi_k(\vec{r}) d\vec{v} = \sum_{m,k} S_{mn}^* S_{kl} \delta_{mk} \\ &= \sum_k S_{kn}^* S_{kl} = \sum_k (S^+)_{nk} S_{kl} = \delta_{nl} \end{aligned}$$

Hay viết dưới dạng ma trận:

$$S^+ S = 1 \quad (8.17)$$

Trên đây ta khai triển $\varphi_n(\vec{r})$ theo $\Psi_m(\vec{r})$, nếu làm ngược lại tức là khai triển $\Psi_m(\vec{r})$ theo $\varphi_n(\vec{r})$, và cũng tiến hành tương tự, ta được:

$$SS^+ = 1$$

Từ phương trình (8.17) ta rút ra:

$$S^+ = S^{-1}$$

Ma trận S thỏa mãn điều kiện vừa nêu trên gọi là ma trận đơn nguyên hay ma trận “Unita”. Như vậy phép biến đổi từ biểu diễn này sang biểu diễn khác được thực hiện nhờ ma trận đơn nguyên, người ta thường gọi đó là phép biến đổi đơn nguyên (trong vật lý cổ điển gọi là phép biến đổi chính tắc). Về mặt hình học phép biến đổi này ứng với một phép quay nào đó trong không gian Hilbert.

3. Sự chuyển biểu diễn của hàm sóng

Ta sẽ thiết lập mối liên hệ trực tiếp giữa các thành phần của cùng một vectơ Ψ bất kì trong các hệ toạ độ khác nhau, chẳng hạn giữa Ψ_m và φ_n nhờ ma trận đơn nguyên S .

$$\begin{aligned} \text{Giả sử } \Psi(\vec{r}) &= \sum_m c_m \Psi_m(\vec{r}) = \sum_n c_n \varphi_n(\vec{r}) = \sum_n c'_n \sum_m S_{mn} \Psi_m(\vec{r}) = \\ &= \sum_m \sum_n S_{mn} c'_n \Psi_m(\vec{r}) \end{aligned}$$

$$\text{Vậy } c_m = \sum_n S_{mn} c'_n \quad (8.18)$$

$$(\text{vì theo (8.14) } \varphi_n(\vec{r}) = \sum_m S_{mn} \Psi_m(\vec{r}))$$

Kết quả trên có thể biểu diễn dưới dạng ma trận nếu coi tập hợp các hệ số c_m và c'_n là các ma trận cột C và C'

$$C = SC' \quad (8.19)$$

Nhân hai vế (8.19) với S^+ từ bên trái và chú ý đến tính chất của ma trận đơn nguyên, ta có:

$$C' = S^+ C \quad (8.20)$$

4. Sự chuyển biểu diễn của ma trận

Ta xem xét ma trận L trong một biểu diễn bất kì sẽ biến đổi như thế nào khi nó chuyển sang biểu diễn khác. Giả sử trong “F” – biểu diễn ta có hệ thức:

$$b_l = \sum_m L_{lm} c_m$$

$$\text{hoặc } B = LC \quad (8.21)$$

$$\text{ở đây } L_{lm} = \int \Psi_l^*(\vec{r}) \hat{L} \Psi_m(\vec{r}) d\vec{v}$$

Khi chuyển sang biểu diễn khác các biên độ b và c tức là các ma trận B và C sẽ biến thành các ma trận B' và C' theo các biểu thức (8.19) và (8.20). Theo (8.19) thì:

$$C = SC' \text{ và } B = SB'$$

do đó (8.21) sẽ biến thành:

$$B = LSC' = SB'$$

Nhân trái hai vế biểu thức này với S^+ , ta được:

$$S^+ LSC' = S^+ L' C' = B'$$

Như vậy trong biểu diễn mới ma trận L biến thành ma trận L'

$$L' = S^+ L S \quad (8.22)$$

$$\text{Hay dưới dạng } (L')_{mn} = \sum_{k,l} (S^+)_{mk} L_{kl} S_{ln}$$

§5. TRỊ TRUNG BÌNH DƯỚI DẠNG MA TRẬN

Ta đã biết công thức tính trị trung bình dưới dạng toán tử:

$$\bar{L} = \int \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{L} \Psi(\vec{r}, t) d\vec{v} \quad (8.23)$$

Giả sử trong biểu diễn “F”, $\Psi_n(\vec{r}, t)$ là hàm riêng ứng với trị riêng L_n . Khai triển $\Psi(\vec{r}, t)$ theo các hàm riêng $\Psi_n(\vec{r}, t)$.

$$\left. \begin{aligned} \Psi(\vec{r}, t) &= \sum_n c_n \Psi_n(\vec{r}, t) \\ \Psi'(\vec{r}, t) &= \sum_m c_m^* \Psi_m^*(\vec{r}, t) \end{aligned} \right\} \quad (8.24)$$

Thay (8.24) vào (8.23), ta có:

$$\bar{L} = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \int \Psi_m^*(\vec{r}, t) \hat{L} \Psi_n(\vec{r}, t) dv = \sum_m \sum_n c_m^* L_{mn} c_n \quad (8.25)$$

Nếu coi tập hợp các hệ số c_n như ma trận cột, tập hợp các hệ số c_m^* như ma trận hàng, thì (8.25) có thể viết dưới dạng:

$$\bar{L} = C^* L C \quad (8.25')$$

§6. HÀM RIÊNG VÀ TRỊ RIÊNG DƯỚI DẠNG MA TRẬN

Phương trình trị riêng dưới dạng toán tử:

$$\hat{L}\Psi(\vec{r}, t) = L\Psi(\vec{r}, t) \quad (8.26)$$

(trong đó L và Ψ là trị riêng và hàm riêng của $\hat{L}$)

Giả sử trong biểu diễn “F”, L_n và $\Psi_n(\vec{r}, t)$ là các trị riêng và hàm riêng của toán tử $\hat{L}$. Khai triển $\Psi(\vec{r}, t)$ theo $\Psi_n(\vec{r}, t)$:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{r}, t)$$

Thay biểu thức này vào (8.26), đồng thời nhân cả hai vế với $\Psi_m^*(\vec{r}, t)$ từ bên trái sau đó lấy tích phân theo biến số, ta được:

$$\begin{aligned} \sum_n c_n \int \Psi_m^*(\vec{r}, t) \hat{L} \Psi_n(\vec{r}, t) dv &= L \sum_n c_n \int \Psi_m^*(\vec{r}, t) \Psi_n(\vec{r}, t) dv \\ &= \sum_n c_n L_{mn} = L \sum_n c_n \delta_{mn} \end{aligned}$$

$$\text{Hay } \sum_n (L_{mn} - L\delta_{mn}) c_n = 0 \quad (8.27)$$

Đây là hệ vô hạn các phương trình tuyến tính thuần nhất để xác định các biên độ c_n . Theo đại số học, hệ phương trình tuyến tính thuần nhất chỉ có nghiệm khác không khi định thức được tạo thành từ các hệ số của hệ phương trình bằng không. Định thức này có vô số hàng và vô số cột

$$\begin{vmatrix} L_{11}-L & L_{12} & \dots & L_{1n} \\ L_{21} & L_{22}-L & \dots & L_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ L_{m1} & L_{m2} & \dots & L_{mn}-L \end{vmatrix} = 0 \quad (8.28)$$

Phương trình này đặt ra những điều kiện giới hạn đối với những giá trị khả dĩ của L .

Đây là phương trình bậc cao vô hạn đối với L (phương trình siêu việt) và sẽ có vô số nghiệm $L = L_1, L_2, \dots, L_n, \dots$. Trong đại số người ta đã chứng minh những nghiệm như thế nhất định là thực. Tập hợp các giá trị L_n khi giải phương trình (8.28) sẽ là tập hợp các trị riêng của toán tử $\hat{L}$. Thay một trong các nghiệm đó (giả sử L_n) vào phương trình (8.27), ta tìm được các nghiệm c_n tương ứng với giá trị L_n này

$$L = L_n \text{ và } c_1 = c_1(L_n), c_2 = c_2(L_n), \dots, c_n = c_n(L_n)$$

Tập hợp các giá trị tìm được $c_1, c_2, \dots, c_n$ cho biết hàm riêng $\Psi(\vec{r}, t)$ của toán tử $\hat{L}$ ứng với trị riêng $L = L_n$.

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \sum_n c_n(L_n) \Psi_n(\vec{r}, t)$$

Trong phép biểu diễn riêng bất kì đại lượng nào cũng được biểu diễn bằng ma trận chéo. Thật vậy, nếu $\Psi_n(\vec{r})$ là hàm riêng của toán tử $\hat{L}$ thì ma trận của nó có các yếu tố

$$L_{mn} = \int \Psi_m^*(\vec{r}) \hat{L} \Psi_n(\vec{r}) dV = L_n \int \Psi_m^*(\vec{r}) \Psi_n(\vec{r}) = L_n \delta_{mn}$$

ở đây L_n là trị riêng của $\hat{L}$ tương ứng với hàm riêng $\Psi_n(\vec{r})$.

Vậy, có thể coi bài toán tìm trị riêng của toán tử $\hat{L}$ như bài toán đưa ma trận L trong biểu diễn bất kì về ma trận chéo.

Chú ý: Trị riêng của ma trận không phụ thuộc vào việc chọn biểu diễn, hay nói theo cách khác, phép biến đổi đơn nguyên không làm thay

đổi trị riêng của ma trận. Bài toán tìm trị riêng của ma trận đưa về phép biến đổi đơn nguyên, mà phép biến đổi này dẫn ma trận về dạng chéo, chính các yếu tố trên đường chéo của ma trận là trị riêng cần tìm.

§7. PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER VÀ PHƯƠNG TRÌNH HEISENBERG DƯỚI DẠNG MA TRẬN

1. Phương trình Schrodinger dưới dạng ma trận

Phương trình Schrodinger tổng quát dưới dạng toán tử:

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

có thể biểu diễn dưới dạng ma trận. Muốn vậy ta khai triển hàm Ψ theo các hàm riêng Ψ_n của toán tử $\hat{H}$, tức là tìm dạng của phương trình trong “F” – biểu diễn.

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n(t) \Psi_n(\vec{r})$$

Thay biểu thức này vào phương trình trên, ta có:

$$\sum_n c_n(t) \hat{H} \Psi_n(\vec{r}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_n c_n(t) \Psi_n(\vec{r}) = i\hbar \sum_n \frac{dc_n(t)}{dt} \Psi_n(\vec{r})$$

Nhân trái hai vế của phương trình với $\Psi_m^*(\vec{r})$ rồi lấy tích phân trên toàn miền biến thiên của các biến số, ta được:

$$\sum_n c_n(t) \int \Psi_m^*(\vec{r}) \hat{H} \Psi_n(\vec{r}) d\vec{v} = i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n(t) \int \Psi_m^*(\vec{r}) \Psi_n(\vec{r}) d\vec{v}$$

$$\text{Hay } \sum_n H_{mn} c_n(t) = i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) \quad (8.29)$$

$$\text{Trong đó } H_{mn} = \int \Psi_m^*(\vec{r}) \hat{H} \Psi_n(\vec{r}) d\vec{v}$$

Đặc biệt, khi xét phương trình Schrodinger trong biểu diễn năng lượng (tức $\Psi_n(\vec{r})$ là hàm riêng của toán tử $\hat{H}$), ta có:

$$H_{mn} = \int \Psi_m^*(\vec{r}) \hat{H} \Psi_n(\vec{r}) d\vec{r} = E_n \int \Psi_m^*(\vec{r}) \Psi_n(\vec{r}) d\vec{r} = E_n \delta_{mn}$$

Nghĩa là ma trận H có dạng chéo. Khi đó phương trình Schrodinger có dạng:

$$i\hbar \frac{dc_m(t)}{dt} = \sum_n E_n \delta_{mn} c_n(t) = c_m(t) E_m \quad (8.30)$$

Từ (8.30) rút ra:

$$\frac{dc_m(t)}{c_m(t)} = -\frac{i}{\hbar} E_m dt \rightarrow c_m(t) = c_m(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t}$$

2. Phương trình Heisenberg dưới dạng ma trận

Theo phương trình (8.25):

$$\dot{\bar{L}} = \sum_m \sum_n c_m^* \dot{L}_{mn} c_n$$

Lấy đạo hàm theo thời gian giá trị trung bình $\bar{L}$

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \frac{d\bar{L}}{dt} = \sum_m \sum_n c_m^* \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} c_n + \sum_m \sum_n \frac{dc_m^*}{dt} L_{mn} c_n + \sum_m \sum_n c_m^* L_{mn} \frac{dc_n}{dt}$$

$$\text{Từ (8.29), ta có } \frac{dc_m^*}{dt} = -\frac{1}{i\hbar} \sum_k H_{mk}^* c_k^*, \quad \frac{dc_n}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_k H_{nk} c_k$$

Thay các đạo hàm này vào trong biểu thức $\frac{d\bar{L}}{dt}$, ta được:

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \sum_m \sum_n c_m^* \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} c_n - \frac{1}{i\hbar} \sum_m \sum_n \sum_k H_{mk}^* c_k^* L_{mn} c_n + \frac{1}{i\hbar} \sum_m \sum_n \sum_k c_m^* L_{mn} H_{nk} c_k$$

Chú ý tới tính tự liên hợp của toán tử $H_{mk}^* = H_{km}$ và chú ý rằng các chỉ số m, n và k đều chạy qua những giá trị như nhau, ta có thể viết phương trình trên dưới dạng (trong số hạng thứ hai đổi chỗ các kí hiệu k với m và trong số hạng thứ ba đổi chỗ các kí hiệu k với n).

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \sum_m \sum_n c_m^* \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} c_n + \frac{1}{i\hbar} \sum_m \sum_n c_m^* \left\{ \sum_k L_{mk} H_{kn} - \sum_k H_{mk} L_{kn} \right\} c_n$$

Chú ý theo quy tắc nhân ma trận

$$\sum_k L_{mk} H_{kn} = (LH)_{mn}, \quad \sum_k H_{mk} L_{kn} = (HL)_{mn}$$

$$\text{Ta có: } \frac{d\bar{L}}{dt} = \sum_m \sum_n c_m^* \left\{ \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (HL - LH)_{mn} \right\} c_n \quad (8.31)$$

$$\text{Trong đó: } \frac{i}{\hbar} (HL - LH)_{mn} = \frac{i}{\hbar} \sum_k (H_{mk} L_{kn} - L_{mk} H_{kn}) = \frac{i}{\hbar} [H, L]_{mn} \quad (8.32)$$

là yếu tố ma trận của dấu ngoặc Poisson. So sánh với công thức của trị trung bình, ta suy ra yếu tố ma trận của $\frac{dL}{dt}$ là:

$$\left(\frac{dL}{dt} \right)_{mn} = \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [H, L]_{mn} \quad (8.33)$$

§8. KÍ HIỆU DIRAC

Hàm sóng ψ hay tập hợp các thành phần của nó Dirac gọi là ket - vectơ và kí hiệu $|\psi\rangle$. Hàm sóng ψ_{nlm} biểu diễn trạng thái theo các số lượng tử n, l, m được kí hiệu qua $|nlm\rangle$. Hàm sóng ψ^* liên hợp phức với ψ gọi là bra-vectơ và kí hiệu $\langle\psi|$, còn hàm ψ_{nlm}^* được kí hiệu qua $\langle nlm|$.

Việc gọi bra và ket xuất phát từ chữ tiếng Anh "bracket" - dấu ngoặc $\langle \rangle$.

Trong các kí hiệu ma trận ket - vectơ ứng với một cột nào đó, còn bra - vectơ ứng với một dòng nào đó. Tích vô hướng của bra-vectơ $\psi_b^* = \langle b|$ và ket-vectơ $\psi_a = |a\rangle$ được kí hiệu $\langle b|a\rangle$, tức là:

$$\int \psi_b^*(x) \psi_a(x) dx = \langle b|a\rangle \quad (8.34)$$

Mặt khác, tích vô hướng này có thể được giải thích như hàm sóng ψ_a trong "b" - biểu diễn. Thật vậy, nếu khai triển:

$$\psi_a(x) = \int c_a(b) \psi_b(x) dx \quad (8.35)$$

(đối với phổ gián đoạn tích phân được thay bằng phép lấy tổng $\sum$), thì $c_a(b)$ là hàm trạng thái $\langle\langle a \rangle\rangle$ trong "b" - biểu diễn

$$c_a(b) = \int \psi_b^*(x) \psi_a(x) dx = \langle b|a \rangle \quad (8.36)$$

Hàm sóng $\psi_a(x)$ tương ứng với trạng thái $\langle\langle a \rangle\rangle$ trong “x” – biểu diễn theo kí hiệu Dirac có dạng:

$$\psi_a(x) = \langle x|a \rangle \quad (8.37)$$

Với kí hiệu này (8.35) có thể viết lại dưới dạng:

$$\langle x|a \rangle = \int_b \langle x|b \rangle \langle b|a \rangle db \quad (8.38)$$

Từ (8.36) rút ra hệ thức:

$$\langle b|a \rangle = \langle a|b \rangle^* \quad (8.39)$$

(8.39) biểu thị mối liên hệ hàm trạng thái $\langle\langle a \rangle\rangle$ trong “b” – biểu diễn với hàm trạng thái $\langle\langle b \rangle\rangle$ trong “a” – biểu diễn.

Hàm trạng thái với xung lượng cho trước trong phép biểu diễn tọa độ $\psi_p(\vec{r})$ theo kí hiệu Dirac có dạng:

$$\psi_p(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{h^3}} e^{i\vec{p}\vec{r}} = \langle \vec{r}|\vec{p} \rangle \quad (8.40)$$

Phép khai triển hàm bất kì $\psi(\vec{r})$ theo sóng phẳng viết như sau:

$$\langle \vec{r}|\psi \rangle = \int_p \langle \vec{r}|\vec{p} \rangle \langle \vec{p}|\psi \rangle d\vec{p} \quad (8.41)$$

$$\text{hay } \langle \vec{r} | = \int_p \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | d\vec{p} \quad (8.42)$$

Hàm riêng của toán tử bình phương momen xung lượng $\hat{M}^2$, trong phép biểu diễn tọa độ theo kí hiệu Dirac, có dạng:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle = \left\langle \frac{\vec{r}}{r} \middle| l, m \right\rangle \quad (8.43)$$

Hàm $= \left\langle \frac{\vec{r}}{r} \middle| l, m \right\rangle$ thực hiện sự chuyển từ “lm” – biểu diễn tới “ $\vec{r}$ ” – biểu diễn. Ngược lại hàm:

$$Y_{lm}^*(\theta, \varphi) = \left\langle \frac{\vec{r}}{r} \middle| l, m \right\rangle^* = \left\langle l, m \middle| \frac{\vec{r}}{r} \right\rangle$$

thực hiện sự chuyển từ biểu diễn tọa độ tới biểu diễn góc. Trong trường hợp này, khi các góc θ, φ xác định phương của vectơ xung lượng thì hàm:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle = \left\langle \frac{\vec{P}}{P} \middle| l, m \right\rangle \quad (8.44)$$

thực hiện sự chuyển từ “lm” -- biểu diễn tới “P” -- biểu diễn. Nó là hàm riêng của toán tử $\hat{M}^2$ trong biểu diễn xung lượng.

Yếu tố ma trận F_{lm} trong kí hiệu Dirac có dạng:

$$F_{ba} = \int \psi_b^* \hat{F} \psi_a dV = \langle b | F | a \rangle \quad (8.45)$$

Các số a, b, đặc trưng cho trạng thái của hệ, có thể lấy tập hợp các giá trị gián đoạn hoặc liên tục. Nếu mỗi một trong các trạng thái a và b được đặc trưng bởi tập hợp các số lượng tử, ví dụ n', l', m' và n, l, m thì yếu tố ma trận thường được kí hiệu $F_{n'l'm'; nlm}$ hay $F_{nlm}^{n'l'm'}$ trong kí hiệu Dirac có dạng $\langle n'l'm' | F | nlm \rangle$.

SPIN – HỆ HẠT ĐỒNG NHẤT

§1. SPIN CỦA CÁC HẠT CƠ BẢN. HÀM SÓNG SPIN VÀ TOÁN TỬ SPIN

1. Spin của các hạt cơ bản

Hạt cơ bản là những hạt bé nhỏ nhất cấu tạo nên vật chất. Tên gọi này rất quy ước vì hiện nay người ta chưa biết được cấu tạo bên trong của chúng.

Trước đây, hàm sóng biểu diễn trạng thái của hạt mới chỉ là hàm của tọa độ và thời gian mà chưa tính đến một thuộc tính nội tại của hạt – đó là spin, nghĩa là phương trình Schrodinger chưa bao hàm thuộc tính này, nên chưa giải thích được đầy đủ tính chất của hạt cơ bản.

Với máy quang phổ có năng suất phân giải cao người ta thấy mỗi vạch quang phổ bao gồm một số vạch rất sát nhau. Điều này chứng tỏ các mức năng lượng của hệ không những phụ thuộc vào các lượng tử số n, l mà còn phụ thuộc vào một đại lượng phụ nữa – spin của hạt.

Sự tách vạch quang phổ làm hai chứng tỏ có hai khả năng định hướng momen từ của electron. Theo độ lớn của độ tách vạch có thể xác định được momen từ spin. Giả thiết về sự tồn tại spin của electron đã được nêu ra trước khi môn Cơ học lượng tử ra đời. Một trong những thí nghiệm đơn giản nhất chứng tỏ trực tiếp electron có spin là thí nghiệm của Stern và Gerlach. Theo giả thuyết Ulenbeck và Goodsmith khi electron chuyển động xung quanh hạt nhân nó có momen quỹ đạo $\vec{M} = [\vec{r} \times \vec{P}]$, momen từ

$\vec{\mu} = \frac{e}{2m_e c} \vec{M}$ và có momen riêng (chuyển động tự quay) gọi là momen spin

$\vec{S}$ và do đó có momen từ riêng $\vec{\mu}_s$. Nếu có một phương ưu tiên nào đấy (chẳng hạn oz – phương của từ trường ngoài), thì spin $\vec{S}$ và $\vec{\mu}_s$ chỉ có hai hướng xác định đối với z, tức là:

$$S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar, \quad \mu_{sz} = \pm \mu_B = \pm \frac{e\hbar}{2m_e c}$$

$$\text{Và ta đã biết tỉ số } \frac{\mu_z}{S_z} = \frac{e}{m_e c} \text{ còn } \frac{\mu}{M} = \frac{e}{2m_e c}$$

Theo cơ học lượng tử, spin là thuộc tính của các hạt cơ bản, cũng như khối lượng là thuộc tính của vật chất.

2. Hàm sóng spin và toán tử spin

Spin của electron và các tính chất của nó được rút ra từ lý thuyết của cơ học lượng tử tương đối tính (tức là từ phương trình Dirac). Song những tính chất của hạt với spin còn thu được từ nội dung của cơ học lượng tử và một số sự kiện thực nghiệm do Pauli đưa vào cơ học lượng tử và xây dựng nên cơ học lượng tử của các hạt có spin (1927). Lý thuyết Pauli về spin của các hạt là một lý thuyết bán kinh nghiệm có đặc tính khá đơn giản và cho phép thu được những kết quả quan trọng. Song lý thuyết Pauli cũng có những thiếu sót cơ bản. Trước hết nó không giải thích được sự tồn tại của Spin mà phải thừa nhận trước, mặt khác nó không tính đến những đòi hỏi của lý thuyết tương đối.

a. Hàm sóng spin

Bây giờ ta xét dạng của hàm sóng khi kể đến spin của hạt:

$$\Psi = \Psi(\mathbf{r}, S_z, t)$$

ở đây S_z là hình chiếu của spin trên trục z. Các giá trị gián đoạn của S_z xác định tính chất của hạt sơ cấp (hạt cơ bản).

Spin của đại bộ phận các hạt sơ cấp là $\frac{1}{2}$, nên hình chiếu của spin S_z có hai giá trị xác định. Do đó có thể tách hàm sóng thành hai và có thể biểu diễn dưới dạng ma trận cột:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi(\mathbf{r}, \frac{\hbar}{2}, t) \\ \Psi(\mathbf{r}, -\frac{\hbar}{2}, t) \end{pmatrix} \quad (9.1)$$

Như vậy: $|\Psi_1|^2 dv$ là xác suất để thấy hạt tại thời điểm t trong nguyên tố thể tích dv có hình chiếu spin trên trục z là $\frac{h}{2}$ và $|\Psi_2|^2 dv$ là xác suất để thấy hạt tại thời điểm t trong nguyên tố thể tích dv có hình chiếu spin trên trục z là $-\frac{h}{2}$.

Hàm sóng Ψ này phải tuân theo điều kiện chuẩn hoá, nghĩa là:

$$\sum_{S_z} \int |\Psi(\vec{r}, S_z, t)|^2 dv = 1$$

Nếu hạt ở trạng thái có hình chiếu S_z xác định (xác suất tìm được S_z không phụ thuộc vào toạ độ $\vec{r}$) thì hàm sóng Ψ có thể tách thành:

$$\Psi(\vec{r}, S_z, t) = \Psi(\vec{r}, t) \varphi(S_z) \quad (9.2)$$

Trong đó $\varphi(S_z) = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ là hàm sóng spin; c_1, c_2 là hằng số

Và $|c_1|^2, |c_2|^2$ là xác suất để thấy hạt có hình chiếu spin S_z là $\frac{h}{2}$ và $-\frac{h}{2}$.

b. Toán tử spin

Người ta đưa vào toán tử spin $\hat{S}$ để biểu diễn đại lượng spin S . Trong trường hợp tổng quát khi toán tử spin tác dụng lên hàm số $\varphi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ ta thu được hàm số mới mà các thành phần của nó là tổ hợp tuyến tính của c_1, c_2

$$\hat{S}\varphi = \begin{pmatrix} a_{11}c_1 + a_{12}c_2 \\ a_{21}c_1 + a_{22}c_2 \end{pmatrix}$$

Biểu diễn toán tử $\hat{S}$ dưới dạng ma trận: $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$

Như vậy:

$$\hat{A}\varphi = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}c_1 + a_{12}c_2 \\ a_{21}c_1 + a_{22}c_2 \end{pmatrix}$$

Nếu không thể tách hàm sóng $\Psi(\vec{r}, S_z, t)$ thành hai phần $\Psi(\vec{r}, t)$ và $\varphi(S_z)$, thì:

$$A\Psi = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}\Psi_1 + a_{12}\Psi_2 \\ a_{21}\Psi_1 + a_{22}\Psi_2 \end{pmatrix}$$

Biết hàm sóng Ψ có thể tính được trị trung bình của $\bar{A}$ ở thời điểm t có tọa độ $\vec{r}$

$$\bar{A} = \sum_{i,k} \Psi_i^* a_{ik} \Psi_k$$

Hoặc biểu diễn dưới dạng ma trận:

$$\bar{A} = \Psi^* A \Psi$$

Trong đó $\Psi^* = (\Psi_1^* \Psi_2^*)$

Nếu trị trung bình tính theo mọi vị trí của hạt thì:

$$\bar{A} = \int \Psi^* \hat{A} \Psi d\mathbf{v}$$

Sau đây ta sẽ xem xét dạng tường minh của các toán tử thành phần spin $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ và toán tử toàn phần $\hat{S}^2$. Ta thừa nhận các toán tử này cũng tuân theo các hệ thức giao hoán như đối với các toán tử thành phần momen xung lượng $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$, cụ thể là:

$$* \quad \left. \begin{aligned} [\hat{S}_x, \hat{S}_y] &= i\hbar \hat{S}_z \\ [\hat{S}_y, \hat{S}_z] &= i\hbar \hat{S}_x \\ [\hat{S}_z, \hat{S}_x] &= i\hbar \hat{S}_y \end{aligned} \right\} \quad (9.3)$$

ở đây: $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_x; \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_y; \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z$ (9.4)

Trong đó dưới dạng ma trận:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ; \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} ; \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (9.5)$$

$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ gọi là các ma trận Pauli.

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2) = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (9.6)$$

$$* \quad S_y = \hbar s_z \quad \text{với } s_z = \pm \frac{1}{2}$$

$$S^2 = \hbar^2 s(s+1) \quad \text{với } s = \frac{1}{2}$$

Những hạt có số lượng tử spin $s = \frac{1}{2}$ gọi tắt là hạt có spin $\frac{1}{2}$ (thí dụ e, p, n, v, ...).

Những hạt có số lượng tử spin $s = 0$ gọi tắt là hạt có spin 0 (thí dụ π - medon, K - medon).

Những hạt có số lượng tử spin $s = 1$ gọi tắt là hạt có spin 1 (duy nhất có photon γ).

§2. HÀM RIÊNG CỦA CÁC TOÁN TỬ HÌNH CHIẾU SPIN

Trước hết ta xét đối với $\hat{S}_x$, sau đó suy tương tự cho các thành phần khác. Để tìm hàm riêng của toán tử $\hat{S}_x$, ta giải phương trình trị riêng:

$$\hat{S} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = S_x \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (9.7)$$

Thay $\hat{S}_x$ bằng ma trận S_x , ta có:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = S_x \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} c_2 \\ c_1 \end{pmatrix} = S_x \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

$$\text{Từ đó rút ra } \frac{\hbar}{2} c_2 = S_x c_1$$

$$\frac{\hbar}{2} c_1 = S_x c_2$$

Giải hệ hai phương trình trên tìm được $S_x = \pm \frac{\hbar}{2}$ và $c_1 = \pm c_2$

Vậy hàm riêng (đã chuẩn hoá) của toán tử $\hat{S}_x$ là:

$$\Psi_{\left(S_x = \frac{\hbar}{2}\right)} = \frac{e^{im_z}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} ; \quad \Psi_{\left(S_x = -\frac{\hbar}{2}\right)} = \frac{e^{im_z}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Tương tự đối với $\hat{S}_y$ và $\hat{S}_z$:

$$\Psi_{\left(S_y = \frac{\hbar}{2}\right)} = \frac{e^{im_z}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} ; \quad \Psi_{\left(S_y = -\frac{\hbar}{2}\right)} = \frac{e^{im_z}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

$$\Psi_{\left(S_z = \frac{\hbar}{2}\right)} = \frac{e^{im_z}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} ; \quad \Psi_{\left(S_z = -\frac{\hbar}{2}\right)} = \frac{e^{im_z}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Trong đó $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, \alpha_6$ là các số thực bất kì.

§3. NGUYÊN LÝ ĐỒNG NHẤT CỦA CÁC HẠT CƠ BẢN

Xét hệ các hạt thuộc cùng một loại, ví dụ như các hạt electron, các hạt proton,... trong hệ này có xuất hiện những tính chất đặc biệt mới mà không có sự tương tự với cơ học cổ điển. Để thấy rõ đặc điểm đó ta hãy so sánh quá trình va chạm giữa hai hạt vĩ mô và hai hạt vi mô.

Trong cơ học cổ điển tính chất của mỗi hạt được đặc trưng bởi khối lượng của nó. Nếu hai hạt có khối lượng bằng nhau thì có thể coi là hoàn toàn giống nhau. Trạng thái của mỗi hạt ở thời điểm ban đầu ($t = 0$) được xác định bởi điều kiện ban đầu. Trong khi chuyển động theo quỹ đạo xác định, giả sử tại thời điểm nào đó chúng va chạm đàn hồi với nhau trong không gian, sau đó lại bay tản đi theo những quỹ đạo tương ứng xác định. Nếu biết trước những điều kiện ban đầu thì quỹ đạo chuyển động của mỗi hạt sẽ được hoàn toàn xác định và ta có thể theo dõi được chuyển động của chúng. Do đó, trong cơ học cổ điển mặc dù các hạt là hoàn toàn giống nhau, song nó vẫn bảo toàn cá tính của nó, nên luôn luôn có thể phân biệt được là hạt nào, sau khi va chạm, đi theo quỹ đạo nào trong không gian.

Trong cơ học lượng tử quá trình va chạm giữa hai hạt vi mô xảy ra hoàn toàn khác. Giả sử lúc va chạm, hai hạt ở vị trí xác định nào đó trong không gian (tọa độ va chạm được xác định), nhưng theo nguyên lý bất định thì xung lượng (do đó vận tốc) của chúng sẽ hoàn toàn không có giá trị xác định. Sau khi va chạm ta có thể ghi lại quỹ đạo của chúng (thí dụ hai vết trong buồng Wynson). Nhưng rõ ràng hai hạt như nhau, sau khi va chạm, hạt nào chuyển động theo quỹ đạo nào, về nguyên tắc, ta không thể xác định được. Thí dụ: xét hệ gồm hai nguyên tử hiđrô. Nếu hai nguyên tử ở khá xa nhau mà các đám mây điện tử không cắt nhau thì mỗi electron được định xứ xung quanh hạt nhân của mình. Nhưng nếu hai nguyên tử xích lại gần nhau đến một lúc nào đó các đám mây điện tử cắt nhau, nghĩa là tại miền cắt nhau đó xác suất để thấy hai electron của hai nguyên tử là khác không, nhưng không thể có một phương pháp nào cho phép phân biệt được electron nào thuộc nguyên tử nào. Như vậy trong thế giới vi mô hai hạt cùng loại không những chỉ giống nhau mà còn hoàn toàn đồng nhất với nhau. Nếu muốn thay đổi trạng thái ban đầu của hệ bằng cách hoán vị hai electron cho nhau thì trong hệ không có một sự thay đổi nào về mặt vật lý, cũng như không có một thí nghiệm vật lý nào có thể phát hiện được sự thay đổi đó. Vậy có nguyên lý đồng nhất của các hạt cơ bản như sau:

Trong hệ các hạt đồng nhất, chỉ tồn tại những trạng thái mà những trạng thái này không thay đổi khi hai hạt bất kì của hệ hoán vị cho nhau.

§4. TRẠNG THÁI ĐỐI XỨNG VÀ PHẢN ĐỐI XỨNG

Xét một hệ gồm N hạt đồng nhất, hàm sóng của hệ có dạng:

$$\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_j, \dots, \xi_k, \dots, \xi_n, t) \quad (9.8)$$

Trong đó ξ_j là tập hợp các biến số không gian và biến số spin của hạt thứ j .

Nếu hoán vị hai hạt bất kì, chẳng hạn giữa hai hạt thứ j và hạt thứ k , thì trạng thái mới của hệ sẽ là:

$$\Psi'(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k, \dots, \xi_j, \dots, \xi_n, t) \quad (9.8')$$

Theo nguyên lý đồng nhất của các hạt thì trạng thái mới này không khác trạng thái cũ, nghĩa là Ψ và Ψ' thực tế cùng diễn tả một trạng thái của hệ. Mặt khác, theo nguyên lý chồng chất trạng thái thì hai hàm sóng cùng diễn tả một trạng thái chỉ khác nhau một hằng số nào đó thôi, tức là:

$$\Psi'(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k, \dots, \xi_j, \dots, \xi_n, t) = \lambda \Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_j, \dots, \xi_k, \dots, \xi_n, t)$$

Nếu đưa vào toán tử hoán vị $\hat{P}_{jk}$ thì đẳng thức trên có thể viết lại

$$\hat{P}_{jk} \Psi = \Psi' = \lambda \Psi \quad (9.9)$$

Đây là phương trình trị riêng của toán tử $\hat{P}_{jk}$. Cho $\hat{P}_{jk}$ tác dụng lên Ψ một lần nữa, ta được:

$$\hat{P}_{jk}^2 \Psi = \lambda^2 \Psi = \Psi \rightarrow \lambda = \pm 1$$

Như vậy khi hoán vị hai hạt đồng nhất hàm sóng của hệ có thể giữ nguyên không đổi dấu (+) hoặc đổi dấu (-).

Hàm sóng ứng với $\lambda = 1$ gọi là hàm sóng đối xứng.

Hàm sóng ứng với $\lambda = -1$ gọi là hàm sóng phản đối xứng.

Trạng thái được biểu diễn bằng hàm sóng đối xứng gọi là trạng thái đối xứng.

Trạng thái được biểu diễn bằng hàm sóng phản đối xứng gọi là trạng thái phản đối xứng.

Không có một tác động bên ngoài nào có thể làm thay đổi tính chất đối xứng của hệ. Muốn chứng minh điều đó ta phải chứng minh tính chất đối xứng của hàm sóng là tích phân chuyển động, nghĩa là:

$$\hat{P}_{jk} \hat{H} - \hat{H} \hat{P}_{jk} = 0$$

$$\text{Ta có } \hat{H} \hat{P}_{jk} \Psi = \lambda \hat{H} \Psi$$

$$\hat{P}_{jk} \hat{H} \Psi = \hat{P}_{jk} (i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{P}_{jk} \Psi) = \lambda \hat{H} \Psi$$

$$(i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad \text{... Theo phương trình Schrodinger})$$

$$\text{Vậy } \hat{P}_{jk} \hat{H} - \hat{H} \hat{P}_{jk} = 0 \quad (\text{dpcm})$$

Tính chất đối xứng của hệ được xác định chính bằng những hạt sơ cấp tạo nên hệ. Pauli đã chứng tỏ rằng hạt có spin nguyên (thí dụ photon, π – medon,...) được diễn tả bằng hàm sóng đối xứng và tuân theo quy luật thống kê Bose – Einstein gọi là hạt Bose – Einstein hay gọi tắt là hạt Boson. Hạt có spin bán nguyên (thí dụ electron, proton, ...) được diễn tả bằng hàm sóng phản đối xứng và tuân theo quy luật thống kê Fermi – Dirac, gọi là hạt Fermi – Dirac hay gọi tắt là hạt Fermion. Hệ gồm những hạt đồng nhất phức tạp thì cần xác định spin toàn phần của hạt phức tạp, thí dụ hệ gồm những hạt α (2 proton và 2 notron) nên spin toàn phần của hạt α là một số nguyên, do đó hàm sóng của hệ các hạt α là hàm đối xứng.

§5. HÀM SÓNG CỦA HỆ CÁC HẠT FERMION VÀ HỆ CÁC HẠT BOSON. NGUYÊN LÝ PAULI

1. Hàm sóng của các hạt Fermion và các hạt Boson

Theo Pauli các hạt Fermion được diễn tả bằng hàm sóng phản đối xứng (Ψ_a), các hạt Boson được diễn tả bằng hàm sóng đối xứng (Ψ_s). Xét một hệ gồm N hạt đồng nhất không tương tác với nhau, toán tử Hamilton của hệ là:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^n \left[-\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + U(\xi_i) \right]$$

Phương trình Schrodinger của hệ ở trạng thái dừng có dạng:

$$\sum_{j=1}^n \left[-\frac{\hbar^2}{2m_j} \Delta_j + U(\xi_j) \right] \Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) = E \Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) \quad (9.10)$$

Vì hệ gồm N hạt không tương tác, nên nghiệm của phương trình này có thể viết dưới dạng:

$$\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) = \Psi_{k_1}(\xi_1) \Psi_{k_2}(\xi_2) \dots \Psi_{k_n}(\xi_n) \quad (9.11)$$

Trong đó k_i là tập hợp những số lượng tử của trạng thái mà hạt nằm trong đó. Hàm $\Psi_{k_i}(\xi_i)$ là nghiệm của phương trình Schrodinger đối với một hạt (hạt thứ i)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + U(\xi_i) \right] \Psi_{k_i}(\xi_i) = E_{k_i} \Psi_{k_i}(\xi_i)$$

Ta thấy nghiệm (9.11) không thoả mãn các đòi hỏi đối xứng. Vì (9.10) là phương trình tuyến tính nên tổ hợp tuyến tính các nghiệm (9.11) cũng sẽ là nghiệm của phương trình (9.10). Do vậy, có thể chọn các tổ hợp tuyến tính của (9.11) để thoả mãn các yêu cầu đối xứng cần thiết. Để đơn giản, trước hết ta xét hệ gồm hai hạt đồng nhất không tương tác, sau đó mở rộng cho hệ gồm N hạt. Các hàm sóng chưa được đối xứng hoá của hệ hai hạt là:

$$\Psi_1(\xi_1, \xi_2) = \Psi_{k_1}(\xi_1) \Psi_{k_2}(\xi_2)$$

$$\Psi_2(\xi_1, \xi_2) = \Psi_{k_1}(\xi_2) \Psi_{k_2}(\xi_1)$$

Hai hàm Ψ_1 và Ψ_2 đều ứng với cùng một giá trị năng lượng của hệ vì chúng đều là nghiệm của một phương trình. Từ các hàm đó có thể thiết lập hai tổ hợp tuyến tính sau đây, ứng với cùng một giá trị năng lượng.

$$\Psi_s = c_1 [\Psi_{k_1}(\xi_1) \Psi_{k_2}(\xi_2) + \Psi_{k_2}(\xi_2) \Psi_{k_1}(\xi_1)] \quad (9.12)$$

$$\Psi_a = c_2 [\Psi_{k_1}(\xi_1) \Psi_{k_2}(\xi_2) - \Psi_{k_1}(\xi_2) \Psi_{k_2}(\xi_1)] \quad (9.13)$$

Các hệ số c_1, c_2 tính được từ điều kiện chuẩn hoá đối với các hàm Ψ_s, Ψ_a , kết quả thu được $c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

Phương trình (9.13) có thể viết dưới dạng định thức:

$$\Psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \Psi_{k_1}(\xi_1) & \Psi_{k_2}(\xi_1) \\ \Psi_{k_1}(\xi_2) & \Psi_{k_2}(\xi_2) \end{vmatrix} \quad (9.13')$$

Mở rộng các công thức (9.12) và (9.13) cho hệ gồm N hạt không tương tác, ta có:

– Đối với hệ hạt Boson

$$\Psi_s = \frac{\sqrt{n_1! n_2! \dots}}{\sqrt{N!}} \sum_p \Psi_{k_1}(\xi_1) \Psi_{k_2}(\xi_2) \dots \Psi_{k_n}(\xi_n) \quad (9.14)$$

n_i là số hạt ở trạng thái thứ nhất... Tổng được lấy theo mọi khả năng hoán vị của N hạt, tổng đó bằng $N!$ (nếu tất cả các chỉ số khi lấy các giá trị không giống nhau). Hệ số $\left(\frac{n_1! n_2! \dots}{N!} \right)^{1/2}$ xuất hiện do điều kiện chuẩn hoá.

– Đối với hệ N hạt Fermion:

$$\Psi_a = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_{k_1}(\xi_1) & \Psi_{k_1}(\xi_2) & \dots & \Psi_{k_1}(\xi_n) \\ \Psi_{k_2}(\xi_1) & \Psi_{k_2}(\xi_2) & \dots & \Psi_{k_2}(\xi_n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Psi_{k_n}(\xi_1) & \Psi_{k_n}(\xi_2) & \dots & \Psi_{k_n}(\xi_n) \end{vmatrix} \quad (9.15)$$

Bây giờ ta xét hệ gồm N hạt đồng nhất có tương tác, giả sử tương tác phụ thuộc vào thời gian, vì tính đối xứng là tích phân chuyển động, nên hàm sóng diễn tả trạng thái của hệ N hạt tương tác là:

$$\Psi_s = \sum_j c_j(t) (\Psi_s)_j$$

$$\Psi_A = \sum_k c_k(t) (\Psi_a)_k$$

Các hệ số $c_j(t)$, $c_k(t)$ là các biên độ xác suất, tỉ lệ với xác suất tìm thấy hạt ở trạng thái đối xứng thứ j và trạng thái phản đối xứng thứ k . Vậy hàm sóng của hệ N hạt đồng nhất có tương tác được biểu diễn qua hàm sóng của hệ hạt không tương tác với các tính chất đối xứng xác định.

2. Nguyên lí Pauli

Xét hệ gồm N hạt Fermion. Giả sử trong hệ có hai hạt nằm trong cùng một trạng thái, chẳng hạn $k_1 = k_2$, nghĩa là hai hạt cùng được đặc trưng bởi 4 số lượng tử tương ứng bằng nhau (đối với chuyển động trong trường xuyên tâm thì có cùng n, l, m, s_z ; đối với chuyển động tự do thì có cùng (p_x, p_y, p_z, s_z)). Như vậy trong định thức (9.15) có hai hàng giống nhau, do đó định thức bằng không, tức là $\Psi_a = 0$ điều này trái với điều kiện bài toán. Vậy, có thể phát biểu nguyên lí Pauli như sau:

Trong một nguyên tử không thể có hơn một electron được đặc trưng bởi 4 số lượng tử xác định.

Pauli đã thiết lập nguyên lý này trên cơ sở phân tích những kết quả thực nghiệm về phổ của các nguyên tử phức tạp trước khi ra đời môn Cơ học lượng tử. Như vậy nguyên lý Pauli là hệ quả trực tiếp của nguyên lý về sự đồng nhất của các hạt Fermion. Nguyên lý Pauli thường được phát biểu dưới dạng khác:

Trong mỗi ô của không gian pha, có thể tích $(2\pi\hbar)^3$ không thể chứa quá một hạt với sự định hướng xác định của spin.

Nguyên lý Pauli cho phép ta hiểu được quy luật tính của cấu trúc nguyên tử phức tạp và của các hạt nhân phức tạp.

§6. HÀM SÓNG CỦA HỆ HAI HẠT ĐỒNG NHẤT CÓ SPIN $\frac{1}{2}$

Xét một trường hợp riêng của hệ hạt đồng nhất – hệ hai hạt đồng nhất, ví dụ 2 electron hoặc 2 proton.

Hàm sóng của hệ hai hạt là $\Psi(\vec{r}_1, s_{1z}, \vec{r}_2, s_{2z})$. Giả sử không có trường ngoài và tương tác giữa hai hạt không phụ thuộc vào spin của chúng. Do đó hàm sóng của hệ có thể biểu diễn dưới dạng:

$$\Psi(\vec{r}_1, s_{1z}, \vec{r}_2, s_{2z}) = F(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi(s_{1z}, s_{2z}) \quad (9.16)$$

Theo Pauli hàm sóng Ψ của hệ phải là hàm phản đối xứng, do vậy:

$$\Psi_a = F_s \varphi_a \quad \text{hoặc} \quad \Psi_a = F_a \varphi_s \quad (9.17)$$

Trước hết ta xét hàm spin φ . Biểu diễn hàm spin toàn phần dưới dạng tích các hàm riêng của các toán tử $\hat{S}^2$ và $\hat{S}_z$ của mỗi hạt, nghĩa là tích của các hàm:

$$\varphi_{\frac{1}{2}}(1), \varphi_{-\frac{1}{2}}(1), \varphi_{\frac{1}{2}}(2), \varphi_{-\frac{1}{2}}(2)$$

Hàm φ tổng quát sẽ là

$$\varphi(1, 2) = c_1 \varphi_{\frac{1}{2}}(1) \varphi_{\frac{1}{2}}(2) + c_2 \varphi_{-\frac{1}{2}}(1) \varphi_{-\frac{1}{2}}(2) + c_3 \varphi_{\frac{1}{2}}(1) \varphi_{-\frac{1}{2}}(2) + c_4 \varphi_{-\frac{1}{2}}(1) \varphi_{\frac{1}{2}}(2) \quad (9.18)$$

Vì spin được cộng theo quy tắc cộng momen, nên số lượng tử spin toàn phần của hệ có hai giá trị:

$$s = s_1 + s_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$$

và
$$s = s_1 - s_2 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$$

Từ đó số lượng tử s_z (trên trục z) lấy các giá trị:

Với $s = 1$ thì $s_z = 0, \pm 1$. Với $s = 0$ thì $s_z = 0$

Hàm φ diễn tả trạng thái của hệ với s và s_z cho trước phải thoả mãn các phương trình.

$$\left. \begin{aligned} \hat{S}^2 \varphi &= \hbar^2 s(s+1) \varphi \\ \hat{S}_z \varphi &= \hbar s_z \varphi \end{aligned} \right\} \quad (9.19)$$

Các hệ số c_1, c_2, c_3, c_4 trong biểu thức (9.18) phải được chọn sao cho hàm φ đồng thời thoả mãn các phương trình (9.19). Bằng phép thử trực tiếp người ta thấy hàm spin của hệ ứng với các điều kiện trên có thể viết dưới dạng:

$$\varphi_s = \begin{cases} \varphi_{1,1} = \varphi_{\frac{1}{2}}(1) \varphi_{\frac{1}{2}}(2) \\ \varphi_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\varphi_{\frac{1}{2}}(1) \varphi_{-\frac{1}{2}}(2) + \varphi_{-\frac{1}{2}}(1) \varphi_{\frac{1}{2}}(2) \right] \\ \varphi_{1,-1} = \varphi_{-\frac{1}{2}}(1) \varphi_{-\frac{1}{2}}(2) \end{cases} \quad \uparrow \uparrow \quad (9.20)$$

$$\varphi_s = \varphi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\varphi_{\frac{1}{2}}(1) \varphi_{-\frac{1}{2}}(2) - \varphi_{-\frac{1}{2}}(1) \varphi_{\frac{1}{2}}(2) \right] \quad \uparrow \downarrow \quad (9.21)$$

Các trạng thái được biểu diễn bởi các hàm (9.20) là đối xứng gọi là trạng thái bộ ba có spin cùng chiều. Trạng thái được biểu diễn bởi hàm số (9.21) là phản đối xứng gọi là trạng thái đơn có spin trái chiều.

Bây giờ ta xét hàm tọa độ F . Nếu hai hạt không tương tác và ở trong các trạng thái, được biểu diễn bằng các hàm Ψ_a và Ψ_b , ta có:

$$F_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_a(\vec{r}_1)\Psi_b(\vec{r}_2) - \Psi_b(\vec{r}_1)\Psi_a(\vec{r}_2)] \quad (9.22)$$

$$F_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_a(\vec{r}_1)\Psi_b(\vec{r}_2) + \Psi_b(\vec{r}_1)\Psi_a(\vec{r}_2)] \quad (9.23)$$

Kết hợp các phương trình (9.20) với (9.22) và (9.21) với (9.23) ta được các hàm sóng diễn tả trạng thái của hệ hai hạt đồng nhất có spin. Xác suất dịch chuyển giữa các trạng thái bộ ba và trạng thái đơn là bị cấm.

§7. PHƯƠNG PHÁP LƯỢNG TỬ HOÁ THỨ CẤP ĐỐI VỚI HỆ CÁC HẠT BOSON

Một trong những phương pháp quan trọng thường được ứng dụng trong cơ học lượng tử đối với hệ nhiều hạt là phương pháp lượng tử hoá thứ cấp (LTHTC). Trong phương pháp LTHTC người ta chuyển hàm sóng từ biểu diễn tọa độ tới biểu diễn mới và chọn số hạt trong trạng thái làm các biến số mới. Do vậy, sự đặc trưng cho hệ hạt bây giờ không phải là bài toán của hàm sóng $\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n, t)$ mà là bài toán của hàm sóng theo biến số mới $C(n_1, n_2, \dots, t)$. ở đây $n_1, n_2, \dots$ là số hạt ở trạng thái thứ nhất, trạng thái thứ hai, ... và gọi là các số lấp đầy.

$$\text{Đại lượng:} \quad |C(n_1, n_2, \dots, t)|^2 \quad (9.24)$$

là xác suất tại thời điểm t ở trạng thái thứ nhất tìm thấy n_1 hạt, ở trạng thái thứ hai tìm thấy n_2 hạt, ...

Việc chuyển từ biểu diễn thông thường sang biểu diễn LTHTC là một trong những ví dụ của phép chuyển từ biểu diễn này sang biểu diễn khác.

Xét một hệ gồm N hạt đồng nhất không tương tác. Kí hiệu $\psi_1(\xi), \psi_2(\xi), \dots, \psi_k(\xi), \dots$ là tập hợp các hàm trực chuẩn của riêng một hạt, các hàm đó tạo thành hệ hàm đầy đủ. Trạng thái được kí hiệu bởi chỉ số k đặc trưng cho tập hợp các số lượng tử được chọn.

Trong phương pháp biểu diễn mới các hàm cơ sở là tích của các hàm đối xứng chuẩn hoá $\psi_k(\xi_i)$. Hàm sóng cho trường hợp tổng quát khi ở trạng thái ψ_j có n_1 hạt, ở trạng thái ψ_2 có n_2 hạt, ..., có dạng:

$$\psi_{n_1, n_2, \dots}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) = \left(\frac{n_1! n_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum \psi_{k_1}(\xi_1) \psi_{k_2}(\xi_2) \dots \psi_{k_n}(\xi_n) \quad (9.25)$$

tổng được lấy theo tất cả các phép hoán vị khả dĩ các chỉ số khác nhau $k_1, k_2, \dots$

Người ta đưa vào các toán tử $\hat{a}_k$ và $\hat{a}_k^+$ tác dụng lên hàm biến số lấp đầy ở trạng thái k :

$$\hat{a}_k \psi_{n_1, \dots, n_k, \dots} = \sqrt{n_k} \psi_{n_1, \dots, n_k-1, \dots} \quad (9.26)$$

$$\hat{a}_k^+ \psi_{n_1, \dots, n_k, \dots} = \sqrt{n_k + 1} \psi_{n_1, \dots, n_k+1, \dots} \quad (9.27)$$

Toán tử $\hat{a}_k$ làm giảm số hạt trong trạng thái k đi 1, tức là n_k giảm xuống $n_k - 1$; toán tử $\hat{a}_k^+$ làm tăng số hạt này lên 1, tức là từ $n_k - 1$ lên n_k . Rõ ràng việc áp dụng liên tiếp các toán tử $\hat{a}_k$ và $\hat{a}_k^+$ không làm thay đổi số hạt ở trạng thái k , nghĩa là:

$$\hat{a}_k^+ \hat{a}_k \psi_{n_1, \dots, n_k, \dots} = n_k \psi_{n_1, \dots, n_k, \dots} \quad (9.28)$$

$$\text{Vậy } \hat{a}_k^- \hat{a}_k = n_k \quad (9.28')$$

Yếu tố ma trận của các toán tử $\hat{a}_k$ và $\hat{a}_k^+$ có dạng

$$(n_1, n_2, \dots, n_k - 1, \dots | \hat{a}_k | n_1, n_2, \dots, n_k - 1, \dots) = (a_k)_{n_k-1, n_k} = \sqrt{n_k} \quad (9.29)$$

$$(n_1, n_2, \dots, n_k + 1, \dots | \hat{a}_k^+ | n_1, n_2, \dots, n_k + 1, \dots) = (a_k)_{n_k+1, n_k} = \sqrt{n_k + 1} \quad (9.30)$$

$$(a_k^+ a_k)_{n_k, n_k} = n_k \delta_{n_k, n_k} \quad (9.31)$$

Về ý nghĩa $\hat{a}_k$ và $\hat{a}_k^+$ gọi là các toán tử huỷ và sinh hạt ở trạng thái k . $\hat{a}_k a_k$ gọi là toán tử của số hạt nằm ở trạng thái k .

Các toán tử $\hat{a}_k$ và $\hat{a}_k^+$ thoả mãn các hệ thức giao hoán:

$$\left. \begin{aligned} \hat{a}_k \hat{a}_l^+ - \hat{a}_l^+ \hat{a}_k &= \delta_{kl} \\ \hat{a}_k \hat{a}_l - \hat{a}_l \hat{a}_k &= 0 \\ \hat{a}_k^- \hat{a}_l^+ - \hat{a}_l^+ \hat{a}_k^- &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (9.32)$$

Ta sẽ biểu diễn các toán tử trong biểu diễn tọa độ qua các toán tử sinh và huỷ hạt trong biểu diễn LTHTC. Xét toán tử $\hat{L}(\xi_i)$ tác dụng lên

hàm tọa độ của hạt thứ i (tọa độ ở đây bao gồm cả spin). Do các hạt đều như nhau nên ta đưa vào toán tử $\hat{L}_1 = \sum_{i=1}^N \hat{L}(\xi_i)$. Tìm biểu thức của toán tử này trong biểu diễn LTHC. Yếu tố ma trận của $\hat{L}_1$ thu được nhờ các hàm cơ sở (9.25). Theo định nghĩa, ta có:

$$(n_1', \dots, n_k', \dots | \hat{L}_1 | n_1, \dots, n_k, \dots) = (n_1', \dots, n_k', \dots | \sum_{i=1}^N \hat{L}(\xi_i) | n_1, \dots, n_k, \dots) \quad (9.33)$$

Xét một thành phần trong tổng này:

$$(n_1', \dots, n_k', \dots | \hat{L}(\xi_i) | n_1, \dots, n_k, \dots) = \int \psi_{n_1', \dots, n_k', \dots}^* \hat{L}(\xi_i) \psi_{n_1, \dots, n_k, \dots} d\xi_1 \dots d\xi_n \quad (9.34)$$

Toán tử $\hat{L}(\xi_i)$ chỉ tác dụng lên hàm các biến số của hạt thứ i , do đó có thể viết:

$$\hat{L}(\xi_i) \psi_{n_1, \dots, n_k, \dots} = \left(\frac{n_1! \dots n_k! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum \psi_{k_1}(\xi_1) \dots \psi_{k_n}(\xi_n) \hat{L}(\xi_i) \psi_{k_1}(\xi_1) \quad (9.35)$$

Nhân (9.35) với $\psi_{n_1', \dots, n_k', \dots}^*$ và lấy tích phân. Nhận xét rằng các tích phân theo các biến số, trừ ξ_i , chỉ chứa tích của các hàm sóng. Do sự trực giao của các hàm sóng, tất cả các tích phân trong đó gồm các số nhân dạng $\psi_1^*(\xi_1) \psi_2(\xi_1)$ đều tiến đến 0, tức là chứa tích các hàm sóng của hạt (trừ hạt thứ i) đối với các trạng thái khác nhau. Chỉ có các số hạng chứa tích các hàm sóng của hạt thứ i , đối với cùng một trạng thái là khác 0. Tích phân theo biến số ξ_i có dạng:

$$(L(\xi_i))_{ik} = \int \psi_1^*(\xi_i) \hat{L}(\xi_i) \psi_k(\xi_i) d\xi_i$$

Điều đó có nghĩa là khi $l \neq k$ thì có sự chuyển dời của hạt từ trạng thái k đến trạng thái l . Do đó, số hạt ở trạng thái k giảm đi 1, còn số hạt ở trạng thái l tăng lên 1. Yếu tố ma trận tương ứng được kí hiệu:

$$(n_k - 1, n_l | \hat{L}(\xi_i) | n_k, n_l + 1) \quad (9.36)$$

Chứng nào mà các toán tử $\hat{L}(\xi_1), \hat{L}(\xi_2), \dots$ chỉ khác nhau bởi chỉ số của các hạt thì tất cả các yếu tố ma trận, khác nhau bởi chỉ số của hạt đều bằng nhau. Do đó đối với yếu tố ma trận (9.33) của toán tử $\hat{L}_1$, cuối cùng có thể viết:

$$\begin{aligned}
(n_k - 1, n_l) \left| \hat{L}_1 \right| n_k, n_l - 1) &= (n_k - 1, n_l) \left| \sum_{i=1}^N \hat{L}(\xi_i) \right| n_k, n_l - 1) \\
&= N(n_k - 1, n_l) \left| \hat{L}(\xi_l) \right| n_k, n_l - 1) = \sqrt{n_k n_l} (L(\xi))_{lk} \quad (9.37)
\end{aligned}$$

Xét yếu tố ma trận chéo, tức là khi sự phân bố lại số hạt theo các trạng thái không thay đổi, bằng cách tương tự như trên, ta có:

$$(n_1, n_2, \dots) \left| \hat{L}_1 \right| n_1, n_2, \dots) = \sum_k n_k (L(\xi))_{kk} \quad (9.38)$$

Đưa các toán tử $\hat{a}'$ và $\hat{a}$ vào các công thức (9.37) và (9.38), khi đó toán tử $\hat{L}_1$ có thể viết dưới dạng:

$$\hat{L}_1 = \sum_{k,l} (L(\xi))_{lk} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \quad (9.39)$$

Cũng bằng cách ấy, có thể thu được kết quả tương tự đối với các toán tử tác dụng lên tọa độ ξ_i, ξ_j của hai hạt:

$$\hat{L}_2 = \sum_{i,j=1}^N \hat{L}(\xi_i, \xi_j)$$

trong phép biểu diễn LTHTC:

$$\hat{L}_2 = \sum_{k,p,l,m} (lm \left| \hat{L}(\xi, \xi') \right| kp) \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_p \quad (9.40)$$

ở đây các yếu tố ma trận bằng:

$$(l, m \left| \hat{L}(\xi, \xi') \right| k, p) = \int \psi_l^*(\xi) \psi_m^*(\xi') \hat{L}(\xi, \xi') \psi_k(\xi) \psi_p(\xi') d\xi d\xi' \quad (9.41)$$

Nhờ hai công thức (9.39) và (9.40) có thể viết toán tử Hamilton của hệ hạt trong phép biểu diễn LTHTC. Trong trường hợp hệ các hạt không tương tác, nằm trong trường ngoài cho trước, ta có:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i = \sum_{i=1}^N \left[\hat{T}_i + U(\xi_i) \right] = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + U(\xi_i) \right] \quad (9.42)$$

ở đây $U(\xi_i)$ – thế năng của hạt thứ i trong trường ngoài và $\hat{T}_i$ – toán tử động năng của nó. Toán tử (9.42) là trường hợp riêng của $\hat{L}_1$. Toán tử (9.42) trong phép biểu diễn LTHTC có dạng:

$$\hat{H} = \sum_{k,l} (H_l)_{lk} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \quad (9.43)$$

Khi lấy ψ_k làm các hàm riêng của toán tử $\hat{H}_l$ của một hạt, ta có:

$$(H_l)_{lk} = \int \psi_l^*(\xi) \hat{H}_l \psi_k(\xi) d\xi = E_k \delta_{lk}$$

ở đây E_k – năng lượng của hạt ở trạng thái k . Cuối cùng:

$$\hat{H} = \sum_k E_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \quad (9.44)$$

Để ý đến (9.31) năng lượng của hệ bằng:

$$E = \sum_k E_k n_k \quad (9.45)$$

Nếu lấy ψ_k làm các hàm riêng của toán tử động năng $\hat{T}_l$, ứng với các trị riêng ε_k , thì (9.43) được viết lại dưới dạng:

$$\hat{H} = \sum_k \varepsilon_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \sum_{k,l} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \int \psi_l^* U(\xi) \psi_k d\xi \quad (9.46)$$

Xét trường hợp hệ các hạt mà giữa chúng có từng cặp tương tác, toán tử năng lượng tương tác sẽ có dạng $\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} W(\xi_i, \xi_j)$.

Khi sử dụng (9.40) ta có toán tử Hamilton trong biểu diễn LTHC

$$\hat{H} = \sum_{k,l} (H_l)_{lk} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2} \sum_{k,p,l,m} (\text{Im} |W|_{kp}) \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_p \quad (9.47)$$

khi lấy ψ_k làm hàm riêng của toán tử $\hat{H}_l$, ta có:

$$\hat{H} = \sum_k E_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2} \sum_{k,p,l,m} (\text{Im} |W|_{kp}) \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_p \quad (9.48)$$

Về ý nghĩa tương tác cặp (thành phần sau trong công thức (9.47)) có thể coi như sự va chạm nhẹ giữa hai hạt nằm ở các trạng thái p và k . Sau tương tác chúng chuyển sang các trạng thái l và m .

Nhận xét rằng công thức (9.43) có thể thu được nhờ phương pháp hình thức sau: Trong biểu thức giá trị trung bình:

$$\bar{H} = \int \psi^*(\xi_i) \hat{H}_i \psi(\xi_i) dV_i$$

hàm sóng được thay bằng toán tử trong không gian của các số lấp đầy.

$$\psi(\xi) \rightarrow \hat{\psi}(\xi) = \sum_k \hat{a}_k \psi_k(\xi) \quad (9.49)$$

$$\psi^*(\xi) \rightarrow \hat{\psi}^*(\xi) = \sum_k \hat{a}_k^\dagger \psi_k^*(\xi) \quad (9.49')$$

Khi đó ở vế phải của $\bar{H}$ ta có:

$$\int \psi^*(\xi) \hat{H}_i \psi(\xi) d\xi \rightarrow \sum_{k,l} \int \hat{a}_l^\dagger \psi_l^*(\xi) \hat{H}_i \hat{a}_k \psi_k(\xi) d\xi = \sum_{k,l} (H_i)_{lk} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \quad (9.50)$$

So sánh (9.50) với (9.43) cho thấy khi thay hàm sóng thông thường bằng toán tử, vế phải của $\bar{H}$ trùng với (9.43). Điều này có nghĩa là khi đó có thể thay một cách hình thức $\bar{H}$ bằng $\hat{H}$ trong biểu diễn LTHTC.

Việc thay hàm sóng ψ bằng toán tử $\hat{\psi}$ liên quan đến tên gọi của phương pháp LTHTC. Với sự LTHTC không những tất cả các đại lượng lượng tử được thay bằng các toán tử mà chính hàm sóng cũng được thay bằng toán tử. Mặc dù sự LTHTC là phương pháp hình thức, nhưng nó tỏ ra rất thuận lợi đối với hàng loạt các bài toán của cơ học lượng tử.

Bằng cách tương tự dễ dàng thu được Hamiltonien của hệ các hạt tương tác cặp đôi xuất phát từ công thức

$$\bar{H} = \int \psi^*(\xi_i) \hat{H}_i \psi(\xi_i) dV_i + \frac{1}{2} \int \psi^*(\xi_i) \psi^*(\xi_j) W_{ij}(\xi_i, \xi_j) \psi(\xi_i) \psi(\xi_j) dV_i dV_j$$

§8. PHƯƠNG PHÁP LTHTC ĐỐI VỚI CÁC HẠT FERMION

Các kết quả thu được đối với hệ các hạt Boson cũng sẽ đúng đối với hệ các hạt Fermion. Tuy nhiên các toán tử $\hat{a}_k$ và $\hat{a}_k^\dagger$ bây giờ không thể thoả mãn các hệ thức (9.32). Thật vậy, đối với các toán tử $\hat{a}_k$ và $\hat{a}_k^\dagger$ tuân theo các công thức (9.32), các trị riêng của tích $\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$ bằng các số nguyên dương tùy ý n_k . Đối với hệ các hạt Fermion các số lấp đầy chỉ có thể bằng 0 và 1 theo nguyên lý Pauli. Các toán tử $\hat{a}_k$ và $\hat{a}_k^\dagger$ bây giờ cần phải được xác định sao cho các trị riêng của $\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$ bằng 0 hoặc 1, tức là:

$$(\hat{a}_k^+ \hat{a}_k)_{n_k n_k} = n_k = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases} \quad (9.51)$$

Điều kiện (9.51) sẽ được thoả mãn, nếu các toán tử $\hat{a}_k$ và $\hat{a}_k^+$ tuân theo các quy tắc phản giao hoán sau:

$$\hat{a}_k \hat{a}_j^+ + \hat{a}_j^+ \hat{a}_k = \delta_{kj} \quad (9.52)$$

$$\hat{a}_k \hat{a}_l + \hat{a}_l \hat{a}_k = \hat{a}_k^+ \hat{a}_l^+ + \hat{a}_l^+ \hat{a}_k^+ = 0 \quad (9.53)$$

Để thoả mãn điều kiện này cần phải thừa nhận:

$$(\hat{a}_k^+ \hat{a}_k)^2 = \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \quad (9.54)$$

Thật vậy, mở ngoặc vế trái và sử dụng (9.52), ta được:

$$(\hat{a}_k^+ \hat{a}_k)^2 = \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k = \hat{a}_k^+ \hat{a}_k (1 - \hat{a}_k \hat{a}_k^+) = \hat{a}_k^+ \hat{a}_k - \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \hat{a}_k \hat{a}_k^+ = \hat{a}_k^+ \hat{a}_k$$

(vì $\hat{a}_k^2 = 0$, suy ra từ (9.33)).

Khi lấy các yếu tố ma trận chéo đối với hệ thức (9.54), ta tìm được $n_k^2 = n_k$. Đẳng thức này chỉ có thể thoả mãn khi $n_k = 0$ và $n_k = 1$. Dựa vào hệ thức (9.53) có thể tìm được dạng tường minh của ma trận a_k . Chừng nào mà các số n_k chỉ lấy hai giá trị 0 và 1, thì các toán tử $\hat{a}_k$ và $\hat{a}_k^+$ theo các biến số này là ma trận hạng hai. Các yếu tố của ma trận tương ứng bằng:

$$(a_k)_{01} = (a_k^-)_{10} = \prod_{l=1}^{k-1} (1 - 2n_l) \quad (9.55)$$

Tất cả các yếu tố ma trận khác đều bằng 0. Trong kết quả nhân đại lượng $(1 - 2n_l)$, ở đây $l = 1, 2, \dots, k-1$, thu được kết quả +1 hoặc -1 do sự phụ thuộc vào giá trị của số lấp đầy các trạng thái.

Phương trình Schrodinger trong phép biểu diễn các số lấp đầy, khi toán tử Hamilton được cho bởi công thức (9.47), chứa trong đó định luật bảo toàn số hạt toàn phần. Tuy nhiên việc đưa vào các toán tử $\hat{a}_k$ và $\hat{a}_k^+$, biểu diễn sự hấp thụ và sinh hạt, cho phép khi suy rộng tương ứng để nghiên cứu các quá trình, trong đó số hạt của loại đã cho không được bảo toàn.

LÍ THUYẾT NHIỀU LOẠN

§1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Trong các chương trước khi vận dụng phương trình Schrodinger để giải một số bài toán như dao động tử điều hoà, electron trong nguyên tử hydro và các ion tương tự... ta thu được nghiệm chính xác về năng lượng và hàm sóng của các bài toán đó. Tuy vậy ta cũng đã phải thực hiện những phép tính khá phức tạp.

Hầu hết các bài toán của cơ học lượng tử đều dẫn đến các phương trình khá phức tạp mà không giải được một cách hoàn toàn chính xác. Đó là các bài toán nghiên cứu các hệ nguyên tử phức tạp (nguyên tử nhiều electron, phân tử...). Trong những năm gần đây, nhờ máy tính điện tử, người ta đã giải được bằng số với độ chính xác khá cao các phương trình của cơ học lượng tử. Song việc nghiên cứu các phương pháp giải tích để giải gần đúng các phương trình của cơ học lượng tử đối với các hệ nguyên tử thực (gần giống với hệ lí tưởng, mà hệ này đã biết nghiệm chính xác) vẫn có tầm quan trọng đặc biệt. Một trong những phương pháp gần đúng đó là lí thuyết nhiễu loạn.

Danh từ nhiễu loạn bắt nguồn từ thiên văn học. Cơ học Newton đã giải được bài toán hai vật thể hoàn toàn chính xác. Thí dụ bài toán xét chuyển động của hệ gồm Mặt Trời và Trái Đất hay Trái Đất và Mặt Trăng. Song, khi nghiên cứu bài toán này, nếu chỉ chú ý đến tương tác giữa hai vật thể với nhau, mà không tính đến tương tác của chúng với các vật thể khác, thì trong một số trường hợp kết quả lí thuyết không phù hợp với kết quả quan sát được, nghĩa là quỹ đạo lí thuyết sai khác với quỹ đạo thực. Hiện tượng sai lệch này gọi là nhiễu loạn. Như vậy, vấn đề đặt ra là phải giải bài toán nhiều vật thể. Các bài toán này không thể giải được chính xác mà phải dùng phương pháp gần đúng, gọi là lí thuyết nhiễu loạn.

Nội dung của lí thuyết nhiễu loạn bao gồm: trước hết giải bài toán hai vật, tức là trong tập hợp các lực tác dụng lên vật, ta tách ra những lực

chính, giải bài toán trong trường hợp này và thu được nghiệm chính xác, gọi là phép tính gần đúng bậc 0. Sau đó chú ý đến những lực phụ và tính số hiệu chỉnh vào nghiệm gần đúng bậc 0 đó. Có thể tính tới số hiệu chỉnh bậc 1, bậc 2,... cho đến bậc n tùy ý. Trong thiên văn học người ta đã thu được kết quả là: Trong phép tính gần đúng bậc 1, năng lượng trong chuyển động nhiễu loạn bằng năng lượng khi không có nhiễu loạn cộng với thế năng tương tác nhiễu loạn trung bình, tính theo quỹ đạo không bị nhiễu loạn.

Trong cơ học lượng tử lý thuyết nhiễu loạn cũng thu được kết quả tương tự như trên.

§2. LÝ THUYẾT NHIỄU LOẠN DỪNG KHÔNG SUY BIẾN

Xét cơ sở lý thuyết nhiễu loạn dừng trong trường hợp không suy biến, nghĩa là một giá trị năng lượng E_n tương ứng với một hàm trạng thái Ψ_n . Như vậy cần giải phương trình Schrodinger dừng:

$$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n \quad (10.1)$$

ở đây: $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{U}'$

$\hat{H}^0 = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{U}^0 \right)$ là toán tử Hamilton khi không có nhiễu loạn.

$\hat{U}'$ là toán tử nhiễu loạn.

Điều kiện để áp dụng lý thuyết nhiễu loạn là:

- Đã giải được chính xác phương trình

$$\hat{H}^0\hat{\Psi}_n^0 = E_n^0\Psi_n^0 \quad (10.2)$$

- $\hat{U}'$ nhỏ so với $\hat{H}^0$, khái niệm $\hat{U}'$ nhỏ so với $\hat{H}^0$ nghĩa là tác dụng của toán tử $\hat{U}'$ lên hàm sóng làm cho trạng thái của hệ thay đổi rất ít so với tác dụng của toán tử $\hat{H}^0$.

Vì $\hat{U}'$ nhỏ nên để tiện cho lý luận sau này, ta đặt $\hat{U}' = \epsilon\hat{U}''$ trong đó ϵ là thông số rất nhỏ không thứ nguyên.

Thay $\hat{H}^0$ và $\hat{U}$ vào (10.1), ta có:

$$(\hat{H}^0 + \varepsilon \hat{U})\Psi_n = E_n \Psi_n \quad (10.3)$$

Nếu $\varepsilon = 0$ thì phương trình (10.3) chuyển thành phương trình (10.2), vì ε nhỏ nên Ψ_n và E_n (của bài toán nhiễu loạn) khác Ψ_n^0 và E_n^0 (của bài toán không nhiễu loạn) rất ít, do đó có thể khai triển Ψ_n và E_n thành chuỗi theo ε :

$$\Psi_n = \Psi_n^0 + \Psi_n^1 + \Psi_n^{11} + \dots$$

$$E_n = E_n^0 + E_n^1 + E_n^{11} + \dots$$

Trong đó:

$\Psi_n^0 = \varepsilon^0 \Psi_n^0$; $E_n^0 = \varepsilon^0 E_n^0$ là các giá trị trong phép tính gần đúng bậc 0.

$\Psi_n^1 = \varepsilon^1 \Psi_n^0$; $E_n^1 = \varepsilon^1 E_n^0$ là các giá trị trong phép tính gần đúng bậc 1.

$\Psi_n^{11} = \varepsilon^2 \Psi_n^0$; $E_n^{11} = \varepsilon^2 E_n^0$ là các giá trị trong phép tính gần đúng bậc 2.

Ở đây ta chỉ giới hạn xét trong phép tính gần đúng bậc nhất, nghĩa là chỉ tính đến số hiệu chính bậc 1 (tức là chỉ giữ lại 2 số hạng đầu trong khai triển trên).

$$\left. \begin{aligned} \Psi_n &= \Psi_n^0 + \Psi_n^1 \\ E_n &= E_n^0 + E_n^1 \end{aligned} \right\} \quad (10.4)$$

Thế (10.4) vào (10.3), ta được:

$$(\hat{H}^0 + \hat{U})(\Psi_n^0 + \Psi_n^1) = (E_n^0 + E_n^1)(\Psi_n^0 + \Psi_n^1)$$

Bỏ qua các số hạng tỉ lệ với ε^2 và chú ý $\hat{H}^0 \Psi_n^0 = E_n^0 \Psi_n^0$, cuối cùng thu được phương trình để xác định Ψ_n^1 và E_n^1 .

$$(\hat{H}^0 - E_n^0)\Psi_n^1 = (E_n^1 - \hat{U})\Psi_n^0 \quad (10.5)$$

Sau đây sẽ tính số hiệu chính về năng lượng E_n^1 và hàm sóng Ψ_n^1 .

a. Xác định số hiệu chính về năng lượng E_n^1

Nhân trái hai vế của phương trình (10.5) với Ψ_n^{0*} và lấy tích phân theo biến số, ta được:

$$\int \Psi_n^{0*} (\hat{H}^0 - E_n^0) \Psi_n^1 dv = \int \Psi_n^{0*} (E_n^1 - \hat{U}') \Psi_n^0 dv \quad (10.6)$$

– Xét vế trái phương trình (10.6):

Biến đổi vế trái (10.6) và chú ý $\hat{H}^0 = \hat{H}^{0*}$, $E_n^{0*} = E_n^0$, thu được:

$$\begin{aligned} \int \Psi_n^{0*} \hat{H}^0 \Psi_n^1 dv - \int \Psi_n^{0*} E_n^0 \Psi_n^1 dv &= \int (\hat{H}^0 \Psi_n^0)^* \Psi_n^1 dv - E_n^0 \int \Psi_n^{0*} \Psi_n^1 dv \\ &= E_n^{0*} \int \Psi_n^{0*} \Psi_n^1 dv - E_n^0 \int \Psi_n^{0*} \Psi_n^1 dv = 0 \end{aligned}$$

Nghĩa là vế trái (10.6) bằng không. do đó vế phải (10.6) bằng không.

– Xét vế phải phương trình (10.6):

$$\begin{aligned} 0 &= \int \Psi_n^{0*} (E_n^1 - \hat{U}') \Psi_n^0 dv = \int \Psi_n^{0*} E_n^1 \Psi_n^0 dv - \int \Psi_n^{0*} \hat{U}' \Psi_n^0 dv \\ &= E_n^1 \int \Psi_n^{0*} \Psi_n^0 dv - \bar{U}' \end{aligned}$$

$$\text{Từ đó} \quad E_n^1 = \bar{U}' \quad (10.7)$$

Vậy, hiệu chỉnh bậc 1 về năng lượng bằng trung bình lượng tử của thế năng tương tác nhiễu loạn tính theo trạng thái không có nhiễu loạn.

b. Xác định số hiệu chỉnh về hàm sóng Ψ_n^1

Khai triển Ψ_n^1 theo các hàm riêng của toán tử $\hat{H}^0$ (giả sử Ψ_k^0 là hàm riêng của $\hat{H}^0$), ta có:

$$\Psi_n^1 = \sum_k a_k \Psi_k^0 \quad (10.8)$$

Để xác định các hệ số a_k ta sử dụng phương trình (10.5). Thế (10.8) vào (10.5):

$$(\hat{H}^0 - E_n^0) \sum_k a_k \Psi_k^0 = (E_n^1 - \hat{U}') \Psi_n^0$$

$$\text{chú ý} \quad \hat{H}^0 \sum_k a_k \Psi_k^0 = \sum_k a_k \hat{H}^0 \Psi_k^0 = \sum_k a_k E_k^0 \Psi_k^0$$

$$\text{thu được} \quad \sum_k a_k (E_k^0 - E_n^0) \Psi_k^0 = (E_n^1 - \hat{U}') \Psi_n^0 \quad (10.9)$$

Nhân trái hai vế của (10.9) với Ψ_m^{0*} và lấy tích phân trên toàn miền biến thiên của các biến số:

$$\begin{aligned}
\int \Psi_m^{0*} \sum_k a_k (E_k^0 - E_n^0) \Psi_k^0 dv &= \int \Psi_m^{0*} (E_n^I - \hat{U}) \Psi_n^0 dv \\
&= \sum_k a_k (E_k^0 - E_n^0) \int \Psi_m^{0*} \Psi_k^0 dv = \int \Psi_m^{0*} E_n^I \Psi_n^0 dv - \int \Psi_m^{0*} \hat{U} \Psi_n^0 dv \\
&= \sum_k a_k (E_k^0 - E_n^0) \delta_{mk} = E_n^I \delta_{nn} - U'_{mn} \\
&= a_m (E_m^0 - E_n^0) = -U'_{mn}
\end{aligned}$$

ta được:
$$a_m = -\frac{U'_{mn}}{E_m^0 - E_n^0} = -\frac{U'_{nm}}{E_n^0 - E_m^0}$$

Thay chỉ số $m = k$, ta có:

$$a_k = \frac{U'_{kn}}{E_n^0 - E_k^0} \quad (10.10)$$

Cuối cùng, thay a_k vào (10.8), ta được:

$$\Psi_n^I = \sum_k \frac{U'_{kn}}{E_n^0 - E_k^0} \Psi_k^0$$

Dựa vào (10.10) có thể tính được tất cả các hệ số a_k trừ a_n . Từ điều kiện chuẩn hoá tính được $a_n = 0$.

§3. LÝ THUYẾT NHIỀU LOẠN DỪNG CÓ SUY BIẾN

Trường hợp có suy biến – Một giá trị năng lượng tương ứng với nhiều trạng thái, giả sử trị riêng E_n^0 suy biến bậc f , tức là E_n^0 tương ứng với f hàm sóng Ψ_{nk}^0 ($k = 1, 2, \dots, f$).

Khi hệ bị nhiễu loạn thì sự suy biến có thể bị tước bỏ hoàn toàn (trị riêng E_n^0 tách thành E_{nk}^0 mức, mỗi mức E_{nk}^0 ứng với một hàm Ψ_{nk}^0) hoặc bị tước bỏ một phần (trị riêng E_n^0 tách thành E_{ni}^0 mức con, số mức con này ít hơn số hàm Ψ_{nk}^0).

Sự suy biến luôn luôn gắn liền với tính đối xứng của hệ, do đó, gắn với tính đối xứng của toán tử $\hat{H}$, tức là gắn với tính đối xứng của phương trình Schrodinger. Vì vậy, nếu hệ nằm trong trường có nhiễu loạn thì sự

đối xứng của hệ sẽ bị phá vỡ, dẫn đến các trị riêng E_n^0 của toán tử $\hat{H}$ không còn suy biến, hoặc bậc suy biến bị giảm xuống. Xét hệ bị nhiễu loạn, giả sử mức E_n^0 tách thành f mức con E_{nk}^0 nằm gần nhau, mỗi mức con này tương ứng với một hàm sóng Ψ_{nk}^0 (suy biến bị tước bỏ hoàn toàn). Coi nhiễu loạn là nhỏ và ta chỉ giới hạn tìm hiệu chỉnh bậc 1 về năng lượng và bậc 0 về hàm sóng.

Để tìm hiệu chỉnh năng lượng E_n^1 phải giải phương trình (10.5):

$$(\hat{H}^0 - E_n^0)\Psi_n^1 = (E_n^1 - \hat{U}')\Psi_n^0$$

Để tìm hiệu chỉnh bậc 0 về hàm sóng, ta nhận xét rằng mỗi hàm Ψ_n^0 là tổ hợp tuyến tính các hàm riêng Ψ_{nk}^0 của toán tử $\hat{H}^0$:

$$\Psi_n^0 = \sum_k a_{nk} \Psi_{nk}^0 \quad (10.11)$$

Thay (10.11) vào (10.5), ta được:

$$(\hat{H}^0 - E_n^0)\Psi_n^1 = (E_n^1 - \hat{U}') \sum_k a_{nk} \Psi_{nk}^0 \quad (10.12)$$

Các hàm Ψ_{nk}^0 đã biết trước, do đó cần xác định các hệ số a_{nk} . Nhân trái hai vế của phương trình (10.12) với Ψ_{nj}^{0*} rồi lấy tích phân theo biến số, ta có:

$$\int \Psi_{nj}^{0*} (\hat{H}^0 - E_n^0) \Psi_n^1 dv = \sum_k a_{nk} \int \Psi_{nj}^{0*} (E_n^1 - \hat{U}') \Psi_{nk}^0 dv \quad (10.13)$$

Ta thấy vế trái phương trình này bằng 0 vì $\hat{H}^0$ là toán tử tự liên hợp. Do đó vế phải (10.13) bằng không:

$$\begin{aligned} & \sum_k a_{nk} \int \Psi_{nj}^{0*} (E_n^1 - \hat{U}') \Psi_{nk}^0 dv \\ &= \sum_k a_{nk} \left\{ \int \Psi_{nj}^{0*} E_n^1 \Psi_{nk}^0 dv - \int \Psi_{nj}^{0*} \hat{U}' \Psi_{nk}^0 dv \right\} = 0 \end{aligned}$$

$$\text{Hay } \sum_k (U_{jk}' - E_n^1 \delta_{jk}) a_{nk} = 0 \quad (10.14)$$

$$\text{ở đây } U_{jk}' = \int \Psi_{nj}^{0*} \hat{U}' \Psi_{nk}^0 dv \text{ và } \delta_{jk} = \int \Psi_{nj}^{0*} \Psi_{nk}^0 dv$$

(10.14) là hệ phương trình tuyến tính có thể viết dưới dạng tường minh

$$(U'_{11} - E_n^I) a_{n1} + U'_{12} a_{n2} + \dots + U'_{1f} a_{nf} = 0$$

$$U'_{21} a_{n1} + (U'_{22} - E_n^I) a_{n2} + \dots + U'_{2f} a_{nf} = 0$$

$$\dots \dots \dots \dots$$

$$U'_{f1} a_{n1} + U'_{f2} a_{n2} + \dots + (U'_{ff} - E_n^I) a_{nf} = 0$$

Giải phương trình này sẽ tìm được các hệ số a_{nk} . Ta biết hệ phương trình này sẽ có nghiệm khác không khi định thức của hệ phương trình bằng không:

$$\begin{vmatrix} U'_{11} - E_n^I & U'_{12} & \dots & U'_{1f} \\ U'_{21} & U'_{22} - E_n^I & \dots & U'_{2f} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ U'_{f1} & U'_{f2} & \dots & U'_{ff} - E_n^I \end{vmatrix} = 0 \quad (10.15)$$

Giải phương trình (10.15) sẽ được f nghiệm đối với E_n^I , từ đó tìm được:

$$E_{nk} = E_n^0 + E_{nk}^I \left\{ \begin{array}{l} E_{n1} = E_n^0 + E_{n1}^I \\ E_{n2} = E_n^0 + E_{n2}^I \\ \dots \dots \dots \\ E_{nf} = E_n^0 + E_{nf}^I \end{array} \right\} \quad (10.16)$$

Thay một trong các nghiệm E_n^I vào hệ phương trình (10.14) sẽ tìm được f nghiệm đối với a_{nk} .

Tóm lại:

Khi không có nhiễu loạn

$$E_n^0 \rightarrow \begin{vmatrix} \Psi_{n1}^0 \\ \Psi_{n2}^0 \\ \dots \\ \Psi_{nf}^0 \end{vmatrix}$$

Khi có nhiễu loạn

$$E_n^0 \rightarrow \begin{vmatrix} E_{n1} - \Psi_{n1}^0 \\ E_{n2} - \Psi_{n2}^0 \\ \dots \\ E_{nf} - \Psi_{nf}^0 \end{vmatrix}$$

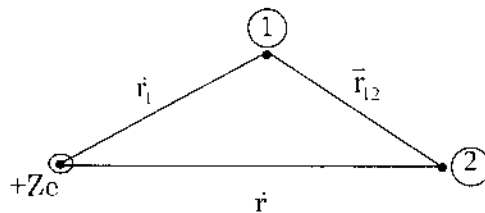
§4. TRẠNG THÁI CƠ BẢN CỦA NGUYÊN TỬ HELI VÀ CÁC ION TƯƠNG TỰ

Kết quả lí thuyết nhiễu loạn dừng không suy biến có thể áp dụng để khảo sát trạng thái bình thường của nguyên tử Heli và các ion tương tự. Ở trạng thái này năng lượng không suy biến, còn ở các trạng thái kích thích năng lượng có sự suy biến nên cần phải giải thích bằng lí thuyết nhiễu loạn dừng có suy biến.

Nguyên tử Heli và các ion tương tự là một hệ gồm hai electron chuyển động trong trường lực coulomb của hạt nhân mang điện tích dương Ze . Khối lượng của hạt nhân rất lớn so với khối lượng của electron nên có thể coi hạt nhân đứng yên so với electron. Giả sử các electron có khối lượng và toạ độ tương ứng là m_1, m_2 và $\vec{r}_1, \vec{r}_2$ và khoảng cách giữa chúng là $|\vec{r}_{12}| = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$.

Dưới đây, ta sẽ tìm năng lượng và hàm sóng của hệ, muốn vậy cần giải phương trình Schrodinger:

$$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n \quad (10.1)$$



Hình 36

ở đây $\Psi_n = \Psi_n(r_1, \theta_1, \varphi_1, r_2, \theta_2, \varphi_2)$

$$\hat{H} = \hat{H}(r_1, \theta_1, \varphi_1, r_2, \theta_2, \varphi_2) = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}$$

(Trong biểu thức này bỏ qua các tương tác khác như tương tác momen từ của electron).

$$\text{Đặt } \hat{H}_1^0 = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{Ze^2}{r_1}$$

$$\hat{H}_2^0 = -\frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 - \frac{Ze^2}{r_2}$$

$$\hat{U} = \frac{e^2}{r_{12}}$$

Ta có thể viết lại phương trình (10.1):

$$(\hat{H}_1^0 + \hat{H}_2^0 + \hat{U}')\Psi_n = E_n \Psi_n \quad (10.17)$$

Giải phương trình này sẽ tìm được Ψ_n và E_n .

a. Xác định Ψ_n^0 và E_n^0

Trong phép tính gần đúng bậc 0, tức là bỏ qua tương tác giữa hai electron $U' = 0$, (10.17) chuyển thành.

$$(\hat{H}_1^0 + \hat{H}_2^0)\Psi_n^0 = E_n^0 \Psi_n^0 \quad (10.18)$$

Nghiệm phương trình có dạng:

$$\Psi_n^0(1,2) = \Psi_n^0(1)\Psi_n^0(2) \quad (10.19)$$

Trong đó kí hiệu $\Psi_n^0(1,2) = \Psi_n^0(r_1, \theta_1, \phi_1, r_2, \theta_2, \phi_2)$

$$\Psi_n^0(1) = \Psi_n^0(r_1, \theta_1, \phi_1)$$

$$\Psi_n^0(2) = \Psi_n^0(r_2, \theta_2, \phi_2)$$

Thay nghiệm (10.19) vào phương trình (10.18) và chú ý $\hat{H}_1^0$ chỉ tác dụng lên $\Psi_n^0(1)$, $\hat{H}_2^0$ chỉ tác dụng lên $\Psi_n^0(2)$, sau khi chia cả hai vế cho tích $\Psi_n^0(1)\Psi_n^0(2)$, ta được:

$$\frac{1}{\Psi_n^0(1)}\hat{H}_1^0\Psi_n^0(1) + \frac{1}{\Psi_n^0(2)}\hat{H}_2^0\Psi_n^0(2) = E_n^0(1) + E_n^0(2) = E_n^0 \quad (10.20)$$

$$(\text{Vì } \hat{H}_1^0\Psi_n^0(1) = E_n^0(1)\Psi_n^0(1); \quad \hat{H}_2^0\Psi_n^0(2) = E_n^0(2)\Psi_n^0(2))$$

Các trị riêng $E_n^0(1)$ và $E_n^0(2)$ chính là nghiệm của bài toán nguyên tử hidro mà ta đã biết.

$$E_n^0(1) = E_n^0(2) = -\frac{mc^4}{2h^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2} = -|E_0| \frac{Z^2}{n^2}$$

$$E_0 = -13,53 \text{ (eV)}$$

và hàm sóng $\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$

Ở trạng thái cơ bản $n = 1$ và $l = 0, m = 0$, do đó:

$$E_1^0(1) = E_1^0(2) = -|E_0|Z^2$$

$$\Psi_{100}(\mathbf{r}, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi r_0^3}} e^{-\frac{Zr}{r_0}}$$

Cuối cùng đối với cả hệ $E_1^0 = E_1^0(1) + E_1^0(2) = -2|E_0|Z^2$

Với Heli $Z = 2$: $E_1^0 = -2.13,53.4 = -108,24 \text{ (eV)}$

$$\Psi_{100}^0(1, 2) = \Psi_{100}^0(1)\Psi_{100}^0(2) = \frac{Z^3}{\pi r_0^3} e^{-\frac{Z}{r_0}(r_1+r_2)}$$

b. Xác định E_1^1

Nếu kể đến tương tác giữa hai electron ($U^1 \neq 0$), cần phải tính số hiệu chỉnh về năng lượng. Theo kết quả lí thuyết nhiễu loạn không suy biến:

$$\begin{aligned} E_1^1 &= \bar{U}^1 = \int \Psi_{100}^{0*} \hat{U}^1 \Psi_{100}^0 d\mathbf{v} = \int \frac{e^2}{r_{12}} |\Psi_{100}|^2 d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \\ &= \left(\frac{Z^3}{\pi r_0^3}\right)^2 e^2 \int \frac{e^{-\frac{2Z}{r_0}(r_1+r_2)}}{r_{12}} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \end{aligned} \quad (10.21)$$

Trong đó $|\mathbf{r}_{12}| = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$; $d\mathbf{v}_1 = r_1^2 dr_1 \sin \theta_1 d\theta_1 d\varphi_1$,

$$d\mathbf{v}_2 = r_2^2 dr_2 \sin \theta_2 d\theta_2 d\varphi_2$$

Kết quả tính toán thu được:

$$E_1^1 = \frac{5}{4} \frac{me^4}{2h^2} Z = \frac{5}{4} |E_0| Z$$

Do vậy ở trạng thái cơ bản năng lượng của nguyên tử Heli và các ion tương tự trong phép tính gần đúng bậc nhất là:

$$E_1 = E_1^0 + E_1^1 = -2|E_0|Z^2 + \frac{5}{4}|E_0|Z$$

Với Heli $Z = 2$: $E_1 = -8|E_0| + \frac{5}{2}|E_0| = -74,42 \text{ (eV)}$

Trong khi đó kết quả thực nghiệm đo được $E_1 = -78,62$ (eV). Ta thấy, năng lượng của nguyên tử Heli trong phép tính gần đúng bậc nhất gần đúng với kết quả thực nghiệm hơn so với phép tính gần đúng bậc 0.

§5. TRẠNG THÁI BẤT KÌ CỦA NGUYÊN TỬ HELI VÀ CÁC ION TƯƠNG TỰ. NĂNG LƯỢNG TRAO ĐỔI

Trạng thái bình thường của nguyên tử Heli được giải thích bằng lí thuyết nhiễu loạn dừng không suy biến. Lí thuyết nhiễu loạn dừng có suy biến được vận dụng để giải thích trạng thái bất kì của nguyên tử Heli. Nguyên tử Heli là nguyên tử đơn giản nhất trong số các nguyên tử nhiều electron. Heli và các ion tương tự Li^+ , Be^{2+} , ... có hai electron chuyển động xung quanh hạt nhân mang điện tích Ze . Phương trình Schrodinger đối với hệ (10.17):

$$(\hat{H}_1^0 + \hat{H}_2^0 + \hat{U}')\Psi_n = E_n \Psi_n$$

1. Trường hợp không tính đến spin của electron

a) Nếu coi nhiễu loạn là không đáng kể ($U' = 0$) thì trong phép tính gần đúng bậc 0 hàm sóng của hệ có thể viết dưới dạng:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_1^0 &= \Psi_1^0(1,2) = \Psi_\alpha^0(1)\Psi_\beta^0(2) \\ \Psi_2^0 &= \Psi_2^0(2,1) = \Psi_\alpha^0(2)\Psi_\beta^0(1) \end{aligned} \right\} \quad (10.22)$$

ở đây $\Psi_\alpha^0(1)$ – hàm sóng của electron (1) ở trạng thái α .

$\Psi_\beta^0(2)$ – hàm sóng của electron (2) ở trạng thái β .

Theo nguyên lí đồng nhất của các hạt cơ bản thì hàm sóng diễn tả trạng thái của hệ hai hạt không tương tác phải thể hiện tính chất đối xứng, tức là:

$$\Psi'' = \Psi^0(1,2) = a_1 \Psi_1^0 + a_2 \Psi_2^0 \quad (\text{Với } a_1 = \pm a_2) \quad (10.23)$$

Năng lượng của hệ bằng:

$$E_n^0 = E_{n\alpha}^0 + E_{n\beta}^0 \quad ; \quad (E^0 = E_\alpha^0 + E_\beta^0)$$

Trong đó E_n^0 và E_p^0 là năng lượng của electron trong nguyên tử hydro ở các trạng thái α và β tương ứng.

Nếu kể đến tương tác giữa hai electron ($U' \neq 0$), cần tính hiệu chỉnh bậc nhất về năng lượng E_n^I và tính hàm sóng $\Psi''(1, 2)$, nghĩa là cần xác định các hệ số a_1, a_2 trong biểu thức (10.23). Ta nhận xét rằng các hàm sóng Ψ_1^0 và Ψ_2^0 diễn tả cùng một trạng thái tương ứng với cùng một giá trị năng lượng E_n^0 (theo nguyên lý đồng nhất). Nhưng các hàm Ψ_1^0 và Ψ_2^0 này khác nhau là do có sự trao đổi vị trí của hai electron cho nhau. Do vậy, năng lượng có sự suy biến và gọi là suy biến trao đổi.

Để xác định giá trị E_n^I và các hệ số a_1, a_2 ta vận dụng lý thuyết nhiễu loạn dừng có suy biến, cụ thể là phải giải hệ phương trình sau (xuất phát từ phương trình (10.14)):

$$\left. \begin{aligned} (U'_{11} - E_n^I)a_1 + U'_{12}a_2 &= 0 \\ U'_{21}a_1 + (U'_{22} - E_n^I)a_2 &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (10.24)$$

Trong đó $U'_{mn} = \int \Psi_m^* \hat{U} \Psi_n dv$

Do tính chất đối xứng của hệ, nên $U' = \frac{e^2}{r_{12}}$ không thay đổi khi hoán vị hai electron cho nhau, nghĩa là khi $\Psi_1^0 \Leftrightarrow \Psi_2^0$, từ đó ta có:

$$U'_{11} = U'_{22} = K \quad \text{và} \quad U'_{12} = U'_{21} = L$$

Mặt khác từ các yếu tố của ma trận, ta thấy:

$$U'_{11} = U'_{11}^* \quad , \quad U'_{22} = U'_{22}^* \quad , \quad U'_{12} = U'_{12}^* \quad , \quad U'_{21} = U'_{21}^*$$

Như vậy K và L là thực. Vậy (10.24) chuyển thành:

$$\left. \begin{aligned} (K - E_n^I)a_1 + La_2 &= 0 \\ La_1 + (K - E_n^I)a_2 &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (10.25)$$

Điều kiện để hệ phương trình trên có nghiệm khác 0 là:

$$\begin{vmatrix} (K - E_n^I) & L \\ L & (K - E_n^I) \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow (K - E_n^I)^2 - L^2 = 0$$

Suy ra:

$$\begin{aligned} E_n^I &= K \pm L & E_{n1}^I &= K + L \\ & & E_{n2}^I &= K - L \end{aligned} \quad (10.26)$$

Ta thấy nhiễu loạn đã khử mất sự suy biến.

Bây giờ ta sẽ xác định hàm sóng. Lần lượt thay các giá trị E_{n1}^I , E_{n2}^I vào hệ phương trình (10.25), tìm được $a_1 = \pm a_2$.

Kết quả này cũng đã thu được ở trên khi dựa vào các tính chất của hệ hạt đồng nhất. Từ điều kiện chuẩn hoá:

$$1 = \int \Psi^* \Psi dv = a_1^2 \int (\Psi_1^* + \Psi_2^*)(\Psi_1 + \Psi_2) dv = 2a_1^2$$

tính được $a_1 = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}$.

Tóm lại:

$$\Psi^0 = a_1(\Psi_1^0 \pm \Psi_2^0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_\alpha^0(1)\Psi_\beta^0(2) \pm \Psi_\alpha^0(2)\Psi_\beta^0(1) \right] = F(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (10.27)$$

Và nhiễu loạn đã tách đôi mức năng lượng E_n^0 :

$$\left. \begin{aligned} E_s &= E_n^0 + K + L \rightarrow \Psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_\alpha^0(1)\Psi_\beta^0(2) + \Psi_\alpha^0(2)\Psi_\beta^0(1) \right] \\ E_a &= E_n^0 + K - L \rightarrow \Psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_\alpha^0(1)\Psi_\beta^0(2) - \Psi_\alpha^0(2)\Psi_\beta^0(1) \right] \end{aligned} \right\} \quad (10.28)$$

Về ý nghĩa, có thể coi K là năng lượng tương ứng với tương tác coulomb giữa hai electron và L là năng lượng trao đổi (mỗi electron ở trong một trạng thái luôn luôn có thể đổi chỗ cho các electron khác). Năng lượng trao đổi là một thuộc tính lượng tử mà không có sự tương tự với vật lí cổ điển.

2. Trường hợp tính đến spin của electron

Ta thấy trong phương trình (10.17) toán tử Hamilton không chứa yếu tố spin. Khi kể đến spin, nghiệm của phương trình (10.17) có thể viết dưới dạng:

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = F(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi(S_{1z}, S_{2z}) \quad (10.29)$$

Hàm tọa độ $F(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ đã tìm được theo (10.27), còn hàm spin $\phi(S_{1z}, S_{2z})$ ta đã biết (theo (9.20) và (9.21) – xem §6 chương 9) là hàm đối xứng nếu khi hoán vị hai electron cho nhau, spin toàn phần của hệ bằng 1 (spin cùng chiều) – trạng thái bộ ba; và là hàm phản đối xứng nếu spin toàn phần của hệ bằng 0 (spin trái chiều) – trạng thái đơn. Heli ở trạng thái đơn gọi là Para heli, còn Heli ở trạng thái bộ ba gọi là Ortho heli.

Vậy trạng thái bình thường của Heli là Para Heli. Đó là trạng thái $1s$ ($n = 1, l = m = 0$) ứng với năng lượng E_1 . Nếu hai electron cùng nằm ở trạng thái $1s$ thì, theo nguyên lý Pauli, chúng phải có spin trái chiều. Ở trạng thái bình thường năng lượng của hệ bằng $2E_1^0$ nếu bỏ qua tương tác giữa hai electron, và bằng $2E_1^0 + (K \pm L)$ nếu kể đến tương tác giữa hai electron.

Hàm sóng diễn tả trạng thái của các electron trong nguyên tử Heli và các ion tương tự là hàm phản đối xứng:

$$\Psi_A = F_a \phi_s \quad \text{hay} \quad \Psi_A = F_s \phi_a$$

§6. HIỆU ỨNG STARK

Sự tách các vạch quang phổ dưới tác dụng của điện trường ngoài gọi là hiệu ứng Stark, do Stark tìm ra năm 1913. Cho đến nay hiện tượng này vẫn chưa được nghiên cứu nhiều do những khó khăn về thực nghiệm trong việc tạo ra điện trường mạnh. Thực nghiệm chỉ ra rằng dưới tác dụng của điện trường ngoài lên nguyên tử Hidro và các nguyên tử khác thể hiện rất khác nhau. Nếu cường độ điện trường không lớn lắm ($\mathcal{E} < 10^5 \frac{\text{V}}{\text{cm}}$) thì độ

tách vạch trong dãy Balmer của nguyên tử Hidro tỉ lệ bậc nhất với cường độ điện trường, gọi là hiệu ứng Stark bậc 1 (tuyến tính), còn đối với các nguyên tử khác thì tỉ lệ bậc 2 với cường độ điện trường gọi là hiệu ứng Stark bậc 2 (phi tuyến). Với cường độ điện trường lớn ($\mathcal{E} \approx 10^5 \frac{\text{V}}{\text{cm}}$) xuất

hiện sự tách vạch bổ sung tỉ lệ bậc cao với cường độ điện trường (với

nguyên tử Hidrô thì tỉ lệ bậc 2). Dưới tác dụng của điện trường mạnh ($\mathcal{E} > 10^5 \frac{\text{V}}{\text{cm}}$) các vạch phổ tách ra rồi mở rộng dần và cuối cùng biến mất.

Lí thuyết cổ điển không thể giải thích được hiệu ứng Stark, song hiệu ứng Stark hoàn toàn có thể giải thích được thoả đáng theo cơ học lượng tử. Ở đây ta chỉ giới hạn xét hiệu ứng Stark bậc nhất đối với nguyên tử Hidrô và các ion tương tự. Lí thuyết nhiễu loạn dừng sẽ được vận dụng để giải thích hiện tượng này. Xuất phát từ phương trình Schrodinger:

$$(\hat{H}^0 + \hat{U}')\Psi_n = E_n \Psi_n \quad (10.30)$$

Trong đó: $\hat{H}^0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{r}$; $\hat{U}'$ là toán tử tương tác nhiễu loạn

Chú ý rằng điều kiện để vận dụng được lí thuyết nhiễu loạn là: Đã giải được phương trình $\hat{H}^0\Psi_{nk}^0 = E_n^0\Psi_{nk}^0$ (phần này diễn tả chuyển động của electron trong trường lực coulomb của hạt nhân) và $\hat{U}' \ll \hat{H}^0$. Giả sử điện trường ngoài hướng dọc theo trục z ($\mathcal{E} = \mathcal{E}_z$; $\mathcal{E}_x = \mathcal{E}_y = 0$). Như vậy thế năng của electron trong điện trường là $U' = -e\mathcal{E}z$.

$$\text{Suy ra } F = F_z = -\frac{\partial U'}{\partial z} = -e\mathcal{E} \quad (F_x = F_y = 0)$$

Coi $U' = -e\mathcal{E}z$ là phù hợp, vì điện trường bên trong tác dụng lên electron do hạt nhân gây ra vào cỡ $\mathcal{E}_0 = \frac{e}{r_0^2} \approx 5 \cdot 10^9 \frac{\text{V}}{\text{cm}}$ ($r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ là bán kính quỹ đạo Bohr thứ nhất).

Trong khi đó điện trường ngoài (do các thí nghiệm tạo ra) chỉ có thể đạt tới cỡ $10^4 - 10^5 \frac{\text{V}}{\text{cm}}$. Nhiệm vụ của bài toán là tìm giá trị năng lượng:

$$E_n = E_n^0 + E_n^1$$

và hàm sóng $\Psi_n^0 = \sum_k a_{nk} \Psi_{nk}^0$ (E_n^0 và Ψ_{nk}^0 là trị riêng và hàm riêng của toán tử $\hat{H}^0$).

Để xác định E_n^1 và các hệ số a_{nk} cần giải phương trình:

$$\sum_k (U_{jk} - E_n^1 \delta_{jk}) a_{nk} \quad (10.14)$$

Cụ thể, ta xét trạng thái với $n = 2$. Vì trạng thái cơ bản ($n = 1$) năng lượng không bị suy biến (chỉ xét trường hợp năng lượng gián đoạn).

a. Trường hợp không có nhiễu loạn ($U' = 0$)

Trong phép tính gần đúng bậc 0 năng lượng của electron trong nguyên tử Hidro với $n = 2$, $z = 1$ là:

$$E_2^0 = -|E_0| \frac{1}{2^2} = -\frac{|E_0|}{4} \quad ; \quad (E_0 = -13,5 \text{ (eV)})$$

Các hàm sóng tương ứng với E_2^0 là (trong hệ tọa độ cầu hàm sóng $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$):

n	l	m	Ψ
2	0	0	$\Psi_1^0 = \Psi_{200}^0 = R_{20}(r) Y_{00}(\theta, \varphi)$
		0	$\Psi_2^0 = \Psi_{210}^0 = R_{21}(r) Y_{10}(\theta, \varphi)$
	1	1	$\Psi_3^0 = \Psi_{211}^0 = R_{21}(r) Y_{11}(\theta, \varphi)$
		-1	$\Psi_4^0 = \Psi_{21-1}^0 = R_{21}(r) Y_{1-1}(\theta, \varphi)$

(10.31)

$$\left. \begin{aligned} \text{Trong đó } R_{20} &= \frac{1}{\sqrt{2r_0^3}} e^{-\frac{\rho}{2}} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) \\ R_{21} &= \frac{1}{\sqrt{6r_0^3}} e^{-\frac{\rho}{2}} \cdot \frac{\rho}{2} \end{aligned} \right\} \quad (\text{Đặt: } \rho = \frac{r}{r_0}) \quad (10.32)$$

$$\left. \begin{aligned} Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \\ Y_{1\pm 1} &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi} \end{aligned} \right\} \quad (10.33)$$

b. Trường hợp có nhiễu loạn ($U' \neq 0$)

Để tính E_n^I và các hệ số a_{nk} , ta giải hệ phương trình:

$$\left. \begin{aligned} (U'_{11} - E_n^I) a_{n1} + U'_{12} a_{n2} + U'_{13} a_{n3} + U'_{14} a_{n4} &= 0 \\ U'_{21} a_{n1} + (U'_{22} - E_n^I) a_{n2} + U'_{23} a_{n3} + U'_{24} a_{n4} &= 0 \\ U'_{31} a_{n1} + U'_{32} a_{n2} + (U'_{33} - E_n^I) a_{n3} + U'_{34} a_{n4} &= 0 \\ U'_{41} a_{n1} + U'_{42} a_{n2} + U'_{43} a_{n3} + (U'_{44} - E_n^I) a_{n4} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (10.34)$$

Điều kiện để cho hệ phương trình này có nghiệm khác 0 là:

$$\begin{vmatrix} U'_{11} - E_n^I & U'_{12} & U'_{13} & U'_{14} \\ U'_{21} & U'_{22} - E_n^I & U'_{23} & U'_{24} \\ U'_{31} & U'_{32} & U'_{33} - E_n^I & U'_{34} \\ U'_{41} & U'_{42} & U'_{43} & U'_{44} - E_n^I \end{vmatrix} = 0 \quad (10.35)$$

Khai triển định thức (10.35), ta được phương trình bậc 4 đối với E_n^I . Giải ra tìm được E_n^I . Trước hết ta lần lượt tìm các yếu tố ma trận:

$$U'_{jk} = \int \Psi_{nj}^{0*} \hat{U} \Psi_{nk}^0 dv = - \int \Psi_{nj}^{0*} e^{-\alpha z} \Psi_{nk}^0 dv$$

$$j, k = 1, 2, 3, 4; dv = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi$$

Để tính các yếu tố U'_{jk} , ta chuyển các hàm riêng từ hệ tọa độ cầu sang hệ tọa độ Descartes (Chú ý: $x = r \sin \theta \cos \varphi$; $y = r \sin \theta \sin \varphi$; $z = r \cos \theta$), ta có:

$$\sin \theta e^{i\varphi} = \sin \theta (\cos \varphi + i \sin \varphi) = \frac{x + iy}{r}$$

$$\sin \theta e^{-i\varphi} = \sin \theta (\cos \varphi - i \sin \varphi) = \frac{x - iy}{r}$$

Từ đó (10.31) chuyển thành:

$$\Psi_l^0 = \Psi_{200}^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{20} = f(r)$$

$$\Psi_2^0 = \Psi_{210}^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta R_{21} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} R_{21} = z F(r)$$

$$\Psi_3^0 = \Psi_{211}^0 = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \cdot e^{i\varphi} R_{21} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x+iy}{r\sqrt{2}} R_{21} = \frac{x+iy}{\sqrt{2}} F(r)$$

$$\Psi_4^0 = \Psi_{21-1}^0 = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \cdot e^{-i\varphi} R_{21} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x-iy}{r\sqrt{2}} R_{21} = \frac{x-iy}{\sqrt{2}} F(r)$$

Nhận xét rằng trong 16 yếu tố ma trận của (10.35) chỉ có $U'_{12} = U'_{21} \neq 0$, còn lại tất cả các yếu tố khác đều bằng 0, vì khi thay các hàm trên vào các yếu tố ma trận U_{jk} ta thấy tất cả các tích phân đều bằng không, trừ hai tích phân:

$$U'_{12} = U'_{21} = -e\mathcal{E} \int f(r) F(r) z^2 dv$$

Trở lại các biến số cầu r, θ, φ :

$$\begin{aligned} U'_{12} = U'_{21} &= -e\mathcal{E} \frac{\sqrt{3}}{4\pi\sqrt{12}r_0^6} \int r \cos^2 \theta e^{-\rho} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) \frac{\rho}{2} dv = \\ &= \frac{e\mathcal{E}}{8\pi r_0^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \int_0^\infty \frac{r^4}{2r_0} e^{-\rho} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) dr \\ &= -\frac{e\mathcal{E}}{8\pi r_0^3} \cdot \varphi \left|_0^{2\pi} \left(-\frac{\cos^3 \theta}{3}\right) \right|_0^\pi \int_0^\infty \frac{r^4}{2r_0} e^{-\rho} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) dr \\ &= -\frac{e\mathcal{E}}{12r_0^3} \int_0^\infty r^4 e^{-\rho} \left(r - \frac{\rho}{2}\right) dr \end{aligned}$$

Lấy tích phân từng phần tích phân trên, thu được kết quả:

$$\int_0^\infty r^4 e^{-\rho} \left(1 - \frac{r}{2r_0}\right) dv = -36r_0^5$$

Tóm lại $U'_{12} = U'_{21} = 3e\mathcal{E}r_0$

Thay kết quả tính được của các yếu tố ma trận trên vào hệ phương trình (10.34), ta có:

$$\begin{aligned}
-E_n^I a_{n1} + 3e\epsilon r_0 a_{n2} &= 0 \\
3e\epsilon r_0 a_{n2} - E_n^I a_{n3} &= 0 \\
-E_n^I a_{n3} &= 0 \\
-E_n^I a_{n4} &= 0
\end{aligned} \tag{10.36}$$

Và định thức (10.35) có dạng:

$$\begin{vmatrix}
-E_n^I & 3e\epsilon r_0 & 0 & 0 \\
3e\epsilon r_0 & -E_n^I & 0 & 0 \\
0 & 0 & -E_n^I & 0 \\
0 & 0 & 0 & -E_n^I
\end{vmatrix} = 0 \tag{10.37}$$

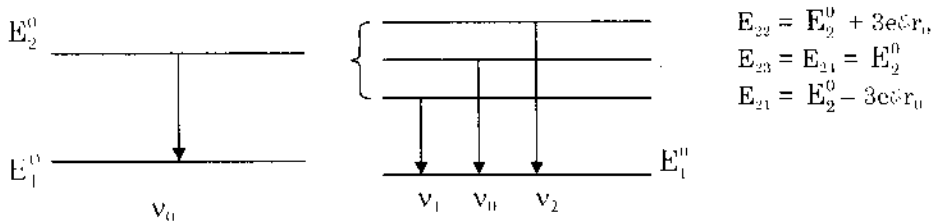
Giải (10.37) ta được

$$(E_n^I)^2 \{ (E_n^I)^2 - 9e^2 \epsilon^2 r_0^2 \} = 0 \Rightarrow \begin{cases} E_{n1}^I = 3e\epsilon r_0 \\ E_{n2}^I = -3e\epsilon r_0 \\ E_{n3}^I = E_{n4}^I = 0 \end{cases}$$

Vậy nhiễu loạn đã làm giảm bậc suy biến

$$E_2^0 \rightarrow \begin{cases} E_{21} = E_2^0 - 3e\epsilon r_0 \\ E_{22} = E_2^0 + 3e\epsilon r_0 \\ E_{23} = E_{24} = E_2^0 \end{cases}$$

Có thể minh họa hiện tượng trên bằng hình ảnh sơ đồ mức năng lượng.



Hình 37

Kết quả là, thay cho một vạch quang phổ ứng với sự chuyển dời $E_2^0 \rightarrow E_1^0$: v_0 (trên hình vẽ, sự chuyển dời biểu diễn bằng các mũi tên), ta có ba vạch ứng với các dịch chuyển:

$$E_{21} \rightarrow E_1^0 : \nu_1$$

$$E_{23}, E_{24} \rightarrow E_1^0 : \nu_0$$

$$E_{22} \rightarrow E_1^0 : \nu_2$$

Đó là hiện tượng tách các vạch quang phổ trong điện trường. Chú ý rằng để cho đơn giản, ta chỉ xét sự tách của vạch thứ nhất thuộc dãy Lyman, còn Stark nghiên cứu sự tách vạch của dãy Balmer.

Tiếp theo, ta xác định hàm sóng trong phép tính gần đúng bậc 0 ứng với các mức năng lượng trên. Cụ thể ta phải xác định các hệ số a_{nk} bằng cách thay lần lượt các giá trị E_{nl}^I vào hệ phương trình (10.36).

1. Với $E_{nl}^I = 3e\mathcal{E}r_0$, ta có hệ phương trình:

$$\begin{aligned} -3e\mathcal{E}r_0 a_{n1} + 3e\mathcal{E}r_0 a_{n2} &= 0 \\ 3e\mathcal{E}r_0 a_{n1} - 3e\mathcal{E}r_0 a_{n2} &= 0 \\ -3e\mathcal{E}r_0 a_{n3} &= 0 \\ -3e\mathcal{E}r_0 a_{n4} &= 0 \end{aligned}$$

Giải ra, tìm được $a_{n1} = a_{n2}$ và $a_{n3} = a_{n4} = 0$.

Vậy, trong phép tính gần đúng bậc 0, hàm sóng:

$$\Psi_1^0 = \Psi_{200}^0 = a_{n1} \Psi_{n1}^0 + a_{n2} \Psi_{n2}^0 = a_{n1} (\Psi_{n1}^0 + \Psi_{n2}^0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{n1}^0 + \Psi_{n2}^0)$$

Hệ số $a_{n1} = a_{n2} = \frac{1}{\sqrt{2}}$ xác định được từ điều kiện chuẩn hoá của hàm Ψ_1^0 .

2. Với $E_{nl}^I = -3e\mathcal{E}r_0$, ta có:

$$\begin{aligned} 3e\mathcal{E}r_0 a_{n1} + 3e\mathcal{E}r_0 a_{n2} &= 0 \\ 3e\mathcal{E}r_0 a_{n1} - 3e\mathcal{E}r_0 a_{n2} &= 0 \\ 3e\mathcal{E}r_0 a_{n3} &= 0 \\ 3e\mathcal{E}r_0 a_{n4} &= 0 \end{aligned}$$

Giải ra, tìm được $a_{n1} = -a_{n2}$ và $a_{n3} = a_{n4} = 0$.

Vậy, hàm sóng tương ứng bằng:

$$\Psi_2^0 = \Psi_{210}^0 = a_{n1} \Psi_{n1}^0 - a_{n2} \Psi_{n2}^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{n1}^0 - \Psi_{n2}^0)$$

$$(a_{n1} = -a_{n2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ xác định được từ điều kiện chuẩn hoá của hàm } \Psi_2^0).$$

3. Với $E_{n3}^I = E_{n4}^I = 0$, ta có:

$$0.a_{n1} + 3e\epsilon r_0 a_{n2} = 0$$

$$3e\epsilon r_0 a_{n1} + 0.a_{n2} = 0$$

$$0.a_{n1} = 0$$

$$0.a_{n1} = 0$$

Từ hệ phương trình trên, ta thấy: $a_{n1} = a_{n2} = 0$ còn a_{n3} và a_{n4} là bất kì. Do đó hàm sóng tương ứng có dạng:

$$\Psi_3^0 = \Psi_4^0 = a_{n3} \Psi_{n3}^0 + a_{n4} \Psi_{n4}^0.$$

Tóm lại, điện trường ngoài đã làm cho mức năng lượng E_2^0 giảm suy biến từ bậc 4 xuống bậc 2.

§7. NHIỀU LOẠN KHÔNG DỪNG

Ở đây ta giới hạn xét nhiễu loạn phụ thuộc vào thời gian – một trong những đặc trưng quan trọng của bài toán nhiễu loạn.

Nhiễu loạn phụ thuộc vào thời gian có nghĩa là toán tử nhiễu loạn là hàm số của thời gian $\hat{U} = \hat{U}(t)$. Giả thiết rằng các trạng thái dừng của hệ khi không có nhiễu loạn đã biết, tức là đã biết hàm sóng:

$$\Psi_n^0(x,t) = \Psi_n^0(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

thoả mãn phương trình không nhiễu loạn:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_n^0(x,t)}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi_n^0(x,t) \quad (10.38)$$

Ta giới hạn xét trường hợp lúc đầu khi trạng thái của hệ không nhiễu loạn thuộc phổ gián đoạn. Nếu nhiễu loạn tác dụng lên hệ là nhỏ và

biểu diễn bằng toán tử $\hat{U}(t)$ thì hàm Ψ của hệ nhiều loạn thoả mãn phương trình:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{U})\Psi \quad (10.39)$$

Phương pháp gần đúng để giải phương trình này đã được Dirac nghiên cứu và thường gọi là lý thuyết nhiễu loạn Dirac hay phương pháp biến đổi các hằng số.

Trạng thái của hệ nhiễu loạn phụ thuộc vào thời gian, còn năng lượng của hệ là tích phân chuyển động (năng lượng được bảo toàn).

Bây giờ bài toán của chúng ta không phải là tìm các trạng thái dừng mà là tìm các hàm sóng phụ thuộc vào thời gian. Do đó phương pháp lý thuyết nhiễu loạn cần phải thay đổi. Nghiệm của phương trình (10.39) trong phương pháp biến đổi các hằng số được biểu diễn dưới dạng khai triển theo các hàm riêng của bài toán không nhiễu loạn:

$$\Psi(x, t) = \sum_k c_k(t) \Psi_k^0(x, t) \quad (10.40)$$

Chứng nào mà các hàm sóng $\Psi_k^0(x, t)$ tạo thành một hệ đầy đủ thì luôn luôn có thể thực hiện được phép khai triển như thế. Các hệ số khai triển $c_k(t)$ chỉ là hàm của thời gian, không phụ thuộc vào tọa độ.

Thay (10.40) vào (10.39), ta được:

$$i\hbar \sum_k \left(\frac{dc_k}{dt} \Psi_k^0(x, t) + c_k \frac{\partial \Psi_k^0(x, t)}{\partial t} \right) = \sum_k c_k (\hat{H}_0 + \hat{U}) \Psi_k^0(x, t) \quad (10.41)$$

Nhân (10.41) với $\Psi_m^0(x, t)$ từ bên trái rồi lấy tích phân trong toàn không gian, khi để ý đến (10.38) và tính trực chuẩn các hàm riêng của hệ không nhiễu loạn, ta có:

$$i\hbar \frac{dc_m}{dt} = \sum_k U_{mk} e^{i\omega_{mk}t} c_k \quad (10.42)$$

ở đây $U_{mk} = \int \Psi_m^{0*}(x) \hat{U} \Psi_k^0(x) dx$ là yếu tố ma trận của toán tử nhiễu loạn và $\omega_{mk} = \frac{1}{\hbar} (E_m - E_k)$.

Hệ phương trình (10.42) là chính xác. Nó tương đương với phương trình xuất phát (10.39) chừng nào mà tập hợp các hệ số c_k cho phép hoàn toàn xác định hàm sóng Ψ . Tuy nhiên việc giải hệ phương trình vô hạn (10.42) không đơn giản hơn việc giải phương trình xuất phát (10.39). Do đó để đơn giản hoá hệ phương trình (10.42), ta giả sử nhiễu loạn tác dụng lên hệ là nhỏ. Giả sử lúc đầu khi $t \leq 0$, hệ nằm ở một trạng thái nào đó với hàm sóng là Ψ_n^0 . Khi $t > 0$ trong khai triển (10.40), tất cả các hệ số đều bằng 0, trừ hệ số với chỉ số n .

$$c_k(0) = \delta_{kn} \quad (10.43)$$

Bắt đầu từ thời điểm $t = 0$ hệ chịu tác động của nhiễu loạn nhỏ. Giả sử rằng do nhiễu loạn yếu nên hàm sóng Ψ_n^0 của trạng thái ban đầu thay đổi rất ít theo thời gian. Do đó các hệ số $c_k(t)$ tại thời điểm $t > 0$ sẽ có dạng:

$$c_k(t) = c_k^0(t) + c_k^1(t) + c_k^2(t) + \dots \quad (10.44)$$

ở đây $c_k^0(t) - c_k(0) = \delta_{nk}$

Số hiệu chính $c_k^1(t)$ có cỡ rất nhỏ; $c_k^2(t)$ số hiệu chính bậc hai, ...

Thay (10.44) vào (10.42), tìm được:

$$i\hbar \frac{dc_m^1}{dt} = \sum_k U_{mk} e^{i\omega_{mk}t} c_k^0 = U_{mn} e^{i\omega_{mn}t} \quad (10.45)$$

ở đây ta đã bỏ qua các số hiệu chính bậc 2 và bậc cao hơn.

Lấy tích phân (10.45), thu được:

$$c_m^1(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t U_{mn} e^{i\omega_{mn}t} dt \quad (10.46)$$

Bằng cách tương tự ta có thể tìm được các số hiệu chính bậc 2 và bậc cao hơn vào hiệu chính bậc 0. Thí dụ, đối với hiệu chính bậc 2 người ta thu được biểu thức:

$$c_m^2 = \frac{1}{i\hbar} \sum_k \int_0^t U_{mk} e^{i\omega_{mk}t} c_k^1(t) dt \quad (10.47)$$

Nếu nhiễu loạn đủ nhỏ thì trong khai triển có thể giới hạn lấy các thành phần hiệu chính bậc thấp. Do đó, hàm sóng tại thời điểm bất kì $t > 0$, về nguyên tắc, có thể tìm được với độ chính xác mong muốn.

§8. SỰ CHUYỂN DỊCH CỦA HỆ ĐẾN TRẠNG THÁI MỚI DƯỚI ẢNH HƯỞNG CỦA NHIỀU LOẠN

Nếu tại thời điểm $t \leq 0$ hệ ở trạng thái có năng lượng xác định và được biểu diễn bởi hàm sóng Ψ_n^0 , khi $t > 0$ dưới tác dụng của toán tử nhiễu loạn $\hat{U}'(t)$ hệ sẽ ở trạng thái mới được biểu diễn bằng hàm sóng (10.40). Điều này có nghĩa là khi $t > 0$ có thể tìm thấy hệ ở một trạng thái bất kì trong số các trạng thái khả dĩ của nó. Xác suất tìm thấy hệ ở một trạng thái lượng tử m nào đó được xác định theo quy tắc chung của cơ học lượng tử bởi đại lượng $|c_m|^2$. Vì ở thời điểm ban đầu $t = 0$ hệ nằm ở trạng thái dừng n , do đó $|c_n|^2$ là xác suất dịch chuyển của hệ từ trạng thái n đến trạng thái m sau thời gian t . $W_{mn}(t) = |c_m(t)|^2 \equiv |c_{mn}(t)|^2$.

Ở đây chỉ số thứ hai kí hiệu trạng thái ban đầu của hệ.

Vậy nhiễu loạn là nguyên nhân gây nên sự dịch chuyển của hệ từ trạng thái lượng tử này đến trạng thái lượng tử khác. Nét đặc thù của quá trình này không có sự tương tự trong vật lí cổ điển, theo vật lí cổ điển thì nhiễu loạn đã gây nên sự dịch chuyển của hệ từ trạng thái dừng với năng lượng xác định đến trạng thái mới, trong đó năng lượng không có giá trị xác định. Thường có cách hiểu cho rằng dưới tác dụng của nhiễu loạn hệ dịch chuyển nhảy vọt đến một trong các trạng thái năng lượng khả dĩ. Song hiểu như thế là sai lầm và mâu thuẫn với các cơ sở vật lí của cơ học lượng tử. Trong thực tế trạng thái cuối được biểu diễn bởi hàm sóng Ψ chính là trạng thái xác định.

Sự dịch chuyển từ trạng thái ban đầu đến trạng thái cuối không thực hiện nhảy vọt mà diễn ra theo thời gian. Thật vậy, như sẽ thấy dưới đây, xác suất dịch chuyển được xác định bởi đặc trưng của nhiễu loạn và phụ thuộc vào thời gian.

1. Xét hệ tại thời điểm ban đầu $t = 0$ hàm trạng thái là $\Psi(x, 0) = \Psi_n(x)$ với năng lượng $E = E_n$. Do tác dụng của bên ngoài hoặc do bởi nguyên nhân bên trong trạng thái của hệ sẽ biến đổi theo thời gian. Ở thời điểm t hàm sóng của hệ là $\Psi(x, t)$. Do có biến đổi nên năng lượng của hệ không còn được xác định nữa. Tiến hành đo năng lượng ta sẽ thu được các giá trị khác nhau E_k (k có nhiều giá trị) với xác suất tương ứng $W_k(t)$. Hàm sóng có thể biểu diễn dưới dạng:

$$\Psi(x, t) = \sum_k c_k(t) \Psi_k(x) \quad (10.48)$$

Trong đó $\Psi_k(x)$ là hàm riêng của toán tử $\hat{H}$. Bình phương môđun các hệ số khai triển $c_k(t)$ cho $W_k(t)$ là xác suất để đo được giá trị năng lượng E_k , đó cũng là xác suất để hệ dịch chuyển từ trạng thái có năng lượng E_n đến trạng thái có năng lượng E_k trong khoảng thời gian từ 0 đến t .

Bây giờ chú ý đến trạng thái cuối $\Psi_m(x)$. Xác suất dịch chuyển từ trạng thái $\Psi_n(x)$ đến trạng thái $\Psi_m(x)$ trong khoảng thời gian t là $W_{mn}(t)$ và để chỉ rõ trạng thái ban đầu người ta kí hiệu:

$$W_{mn}(t) = |c_m(t)|^2$$

Trong phép tính gần đúng bậc 1, ta có:

$$c_m^1(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t U'_{mn} e^{i\omega_{mn}t} dt$$

2. Xét một số trường hợp đặc biệt

2.1. Trường hợp nhiễu loạn không phụ thuộc vào thời gian. Trong trường hợp này:

$$c_m^1(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t U'_{mn} e^{i\omega_{mn}t} dt \quad (10.49)$$

Xác suất dịch chuyển từ trạng thái n đến trạng thái m trong khoảng thời gian t trong phép tính gần đúng bậc 1 là:

$$W_{mn}(t) = |c_m^1(t)|^2 = 4 |U'_{mn}|^2 \frac{\sin^2 \omega_{mn} t}{\hbar^2 \omega_{mn}^2} \quad (10.50)$$

Xác suất dịch chuyển từ trạng thái n đến tất cả các trạng thái khác là:

$$W(t) = \sum_k W_{kn}(t) = \sum_k |c_k^1(t)|^2 = 4 |U'_{kn}|^2 \sum_k \frac{\sin^2 \omega_{kn} t}{\hbar^2 \omega_{kn}^2} \quad (10.51)$$

Nếu các trạng thái cuối ở phổ liên tục (E có giá trị liên tục) thì thay dấu tổng bằng dấu tích phân:

$$\int \frac{\sin^2 \omega_{kn} t}{h^2 \omega_{kn}^2} \rho(E_k) h d\omega_{kn}$$

Trong đó $\rho(E_k)$ là mật độ trạng thái k. Khi tích tích phân ta coi $\rho(E_k)$ không đổi và sử dụng công thức:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \alpha x}{x^2} dx = \pi \alpha$$

$$\text{ta được: } W(t) = \frac{2\pi t}{h} |U'_{kn}|^2 \rho(E_k) \quad (10.52)$$

2.2. Trường hợp nhiễu loạn tuần hoàn (đơn sắc):

$$U'(t) = U'_0 e^{-i\omega t} \quad (10.53)$$

Xác suất dịch chuyển có dạng:

$$W_{kn}(t) = |c_k^1(t)|^2 = 4|U'_{kn}|^2 \frac{\sin^2 (\omega_{kn} - \omega) t}{h^2 (\omega_{kn} - \omega)^2} \quad (10.54)$$

Ta thấy khi $\omega = \omega_{kn}$ thì xác suất có giá trị cực đại. Khi năng lượng $h\omega$ của bức xạ kích thích bằng hiệu giữa hai mức năng lượng $E_k - E_n$ thì xác suất dịch chuyển từ trạng thái n lên trạng thái k là cực đại, đó là tính chất cộng hưởng của sự bức xạ.

Trường hợp $t \rightarrow \infty$, dựa vào công thức:

$$\lim_{A \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 Ax}{\pi Ax^2} = \delta(x)$$

$$\text{ta có: } W_{kn}(t) = \frac{2\pi}{h} |U'_{kn}|^2 t \delta(\omega_{kn} - \omega) \quad (10.55)$$

Nếu tính trong một đơn vị thời gian, ta có:

$$\frac{dW_{kn}(t)}{dt} = \frac{2\pi}{h} |U'_{kn}|^2 \delta(\omega_{kn} - \omega)$$

Như vậy khi xét trong khoảng thời gian dài sự dịch chuyển chỉ xảy ra nếu đối số của hàm Delta Dirac bằng không, tức là hệ thức $E_k - E_n = h\omega$ được thoả mãn (năng lượng bức xạ kích thích đúng bằng hiệu giữa hai mức năng lượng).

LÍ THUYẾT TÁN XẠ

§1. ĐẶT VẤN ĐỀ BÀI TOÁN TÁN XẠ

1. Lí thuyết tán xạ là một trong những bài toán rất quan trọng của cơ học lượng tử. Ở đây chúng ta không đi sâu xem xét đầy đủ, cụ thể toàn bộ lí thuyết mà chỉ giới hạn xem xét lí thuyết mở đầu và trình bày một số phương pháp đơn giản.

Nghiên cứu các định luật tán xạ là một trong những nguồn thông tin cơ bản về cấu trúc nguyên tử, hạt nhân và các hạt cơ bản.

Giả sử có hạt A (hạt tán xạ, ví dụ nguyên tử) và hạt B (hạt tới, có thể là một hạt trong dòng hạt tới) tới theo phương z tương tác với hạt A. Khi tương tác trạng thái của chúng sẽ thay đổi. Thứ nhất, hạt B sẽ thay đổi phương chuyển động, thứ hai, nó có thể truyền năng lượng ε cho hạt A. Sau tương tác nếu $\varepsilon = 0$, ta nói va chạm đàn hồi (chỉ thay đổi phương chuyển động); nếu $\varepsilon \neq 0$ ta nói va chạm không đàn hồi, ở đây ta chỉ giới hạn xét va chạm đàn hồi và không kể đến spin của hạt.

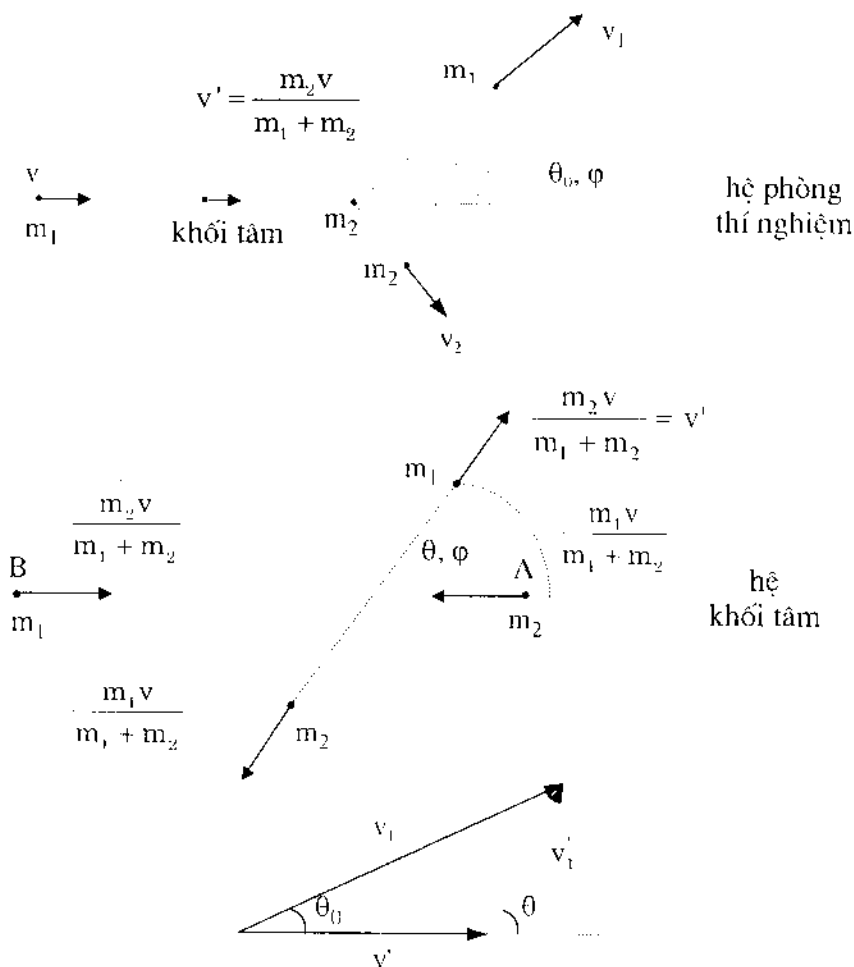
Thông thường quá trình tán xạ diễn ra như sau: hạt A có khối lượng m_1 đứng yên (có thể là một hạt trong vật rắn đứng yên gọi là bia), hạt B có khối lượng m_2 (có thể là một hạt trong dòng hạt tới) chuyển động về phía A với vận tốc v (hoặc xung lượng $\vec{P}$) hướng theo trục Oz. Hạt A gọi là hạt gây ra tán xạ, hạt B gọi là hạt tán xạ. Sau quá trình tán xạ xung lượng của hạt B biến thành $\vec{P}_1 = m_1 \vec{v}_1$, còn hạt A thì bị giật lùi. Như vậy là hướng chuyển động của hạt B thay đổi. Gọi góc $\vec{P}_1$ hợp với trục Oz là θ_1 và góc phương vị của $\vec{P}_1$ là ϕ_1 . Các đại lượng này đo trong hệ quy chiếu đứng yên (hệ quy chiếu phòng thí nghiệm).

Nếu dùng hệ quy chiếu gắn với khối tâm của hệ hai hạt (hệ quy chiếu khối tâm) thì khối tâm đứng yên, hạt B có vận tốc v' .

$$v' = v - \frac{m_1 v}{m_1 + m_2} = \frac{m_2 v}{m_1 + m_2}$$

Còn hạt A có vận tốc $\frac{m_1 v}{m_1 + m_2}$ hướng theo chiều ngược lại. Góc θ xác định hướng của xung lượng hạt B sau tán xạ, khi đó góc θ trong hệ khối tâm thì có giá trị khác với θ_0 do trong hệ phòng thí nghiệm:

$$\operatorname{tg} \theta_0 = \frac{m_2 \sin \theta}{m_1 + m_2 \cos \theta} \quad ; \quad \varphi = \varphi_0 \quad (11.1)$$



Hình 38

2. Tiết diện hiệu dụng của tán xạ

Xét một chùm hạt có mật độ dòng (số hạt tới một đơn vị diện tích trong một đơn vị thời gian) là N . Giả thiết rằng giữa các hạt tới không có giao thoa và các hạt ở bia ở xa nhau đến mức có thể xét riêng quá trình va chạm của dòng hạt tới với từng hạt xác định của bia. Gọi $d\Omega_0$ là góc khối nhỏ theo hướng xác định bởi θ_0 với phương ban đầu của chùm hạt và bởi góc φ_0 . Số hạt tán xạ trong góc khối $d\Omega_0$ trong đơn vị thời gian sẽ tỉ lệ với mật độ dòng N và có thể viết dưới dạng:

$$dN = N\sigma_0(\theta_0, \varphi_0)d\Omega_0 = N\sigma(\theta, \varphi)d\Omega \quad (11.2)$$

Ở đây chỉ số 0 chỉ các đại lượng đo trong hệ phòng thí nghiệm, $\sigma_0(\theta_0, \varphi_0)$ – tiết diện hiệu dụng vi phân của tán xạ, đơn vị thường dùng là $\text{barn} = 10^{-28}\text{cm}^2$. Đại lượng $\sigma_0(\theta_0, \varphi_0)d\Omega_0$ biểu thị diện tích tiết diện ngang của chùm hạt ban đầu chứa số hạt bằng số hạt tán xạ trong góc khối $d\Omega_0$. Lấy tích phân theo toàn bộ mặt cầu bán kính bằng đơn vị ta được tiết diện hiệu dụng toàn phần Σ_0 của tán xạ:

$$\Sigma_0 = \int \sigma_0(\theta_0, \varphi_0)d\Omega_0 \quad (11.3)$$

Tiết diện hiệu dụng trong hệ khối tâm và trong hệ phòng thí nghiệm liên hệ với nhau qua hệ thức:

$$\sigma_0(\theta_0, \varphi_0) = \frac{(1 + 2\gamma \cos \theta + \gamma^2)^2}{|1 + \gamma \cos \theta|} \sigma(\theta, \varphi) \quad (11.4)$$

với:
$$\gamma = \frac{m_1}{m_2}$$

Hệ thức (11.4) có thể chứng minh được xuất phát từ đẳng thức

$$\sigma_0(\theta_0, \varphi_0) \sin \theta_0 d\theta_0 d\varphi_0 = \sigma(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi$$

biểu thị sự bằng nhau về số hạt tán xạ trong góc khối $d\Omega_0$ và $d\Omega$ tương ứng.

Theo lý thuyết cổ điển thì sự va chạm coi như một quá trình phụ thuộc tường minh vào thời gian. Trong cơ học lượng tử người ta xem xét bài toán dừng tương đương, giống như khi nghiên cứu sự chuyển động của hạt qua hàng rào thế năng. Hàm sóng $\Psi(\vec{r})$ của sự tán xạ là nghiệm của phương trình Schrodinger. Trong hệ khối tâm phương trình này có dạng:

$$\nabla^2 \Psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - U) \Psi = 0 \quad (11.5)$$

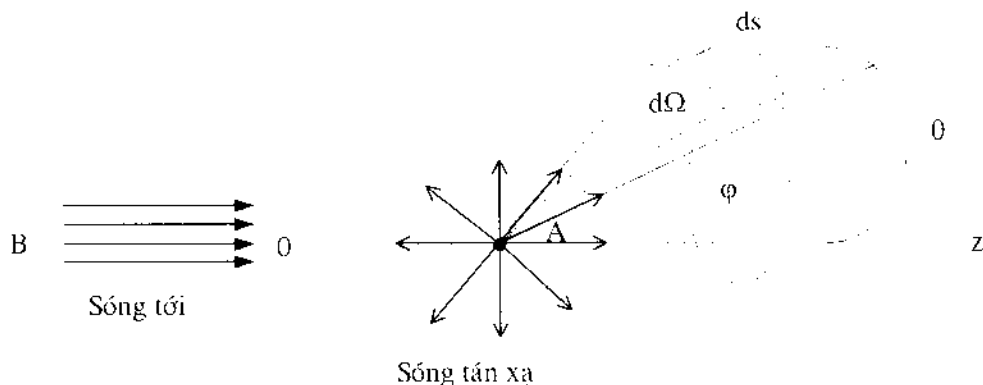
ở đây μ là khối lượng rút gọn của hệ.

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

U là thế năng tương tác giữa hai hạt và năng lượng E có giá trị là:

$$E = E_{kt} = \frac{P^2}{2\mu} > 0 \quad (11.6)$$

$\vec{P}$ là xung lượng của hạt có khối lượng μ và vận tốc $\vec{v}$. vận tốc ban đầu hướng theo trục z nên $\vec{P}$ cũng hướng theo trục z .



Hình 39

Ở khoảng cách lớn hàm sóng mô tả trạng thái của hạt chuyển động tự do. Các hạt tới mô tả bởi sóng phẳng:

$$\Psi_i = be^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = be^{ikz} \quad (11.7)$$

Mật độ dòng của sóng này tính theo biểu thức:

$$\vec{J}_i = \frac{\hbar k}{\mu} |\Psi_i|^2 = \vec{v} |b_i|^2 \quad (11.8)$$

Hạt bị tán xạ được mô tả bởi sóng cầu đi xa tâm và có dạng tiệm cận

$$\Psi_{\text{in}} = bA(\theta, \varphi) \cdot \frac{1}{r} e^{i p r} \quad (11.9)$$

Vậy nghiệm của (11.5) có dạng:

$$\Psi_{\text{in}}(\vec{r}) = b \left\{ e^{i p r} + A(\theta, \varphi) \frac{1}{r} e^{i p r} \right\} \quad (11.10)$$

Và mật độ dòng tán xạ $\vec{J}_{\text{in}}$, thành phần xuyên tâm của $\vec{J}_{\text{in}}$ là:

$$(J_{\text{in}})_r = \frac{i\hbar}{2\mu} (\Psi_{\text{in}}^* \frac{\partial \Psi_{\text{in}}}{\partial r} - \Psi_{\text{in}} \frac{\partial \Psi_{\text{in}}^*}{\partial r}) = \frac{v|b|^2 |A(\theta, \varphi)|^2}{r} \quad (11.11)$$

Từ đó có thể suy ra số hạt tán xạ trong góc khối $d\Omega$ trong một đơn vị thời gian là:

$$\frac{v|b|^2 |A(\theta, \varphi)|^2 r^2}{r^2} d\Omega = v|b|^2 |A(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (11.12)$$

So sánh với (11.2) ta có:

$$\sigma(\theta, \varphi) = |A(\theta, \varphi)|^2 \quad (11.13)$$

Hệ số b có thể xác định tùy ý. Có thể chọn b sao cho mật độ dòng hạt tới bằng đơn vị, khi đó $b = \frac{1}{\sqrt{v}}$, cũng có khi chọn $b = 1$.

§2. TÍNH BIÊN ĐỘ TÁN XẠ ĐÀN HỒI BẰNG PHƯƠNG PHÁP GẦN ĐÚNG BORN

Ta giới hạn nghiên cứu tán xạ đàn hồi và không xét đến cấu tạo bên trong của hạt tán xạ A . Tác dụng của hạt A đối với hạt B trong trường hợp này có thể coi như tác dụng của tâm lực. Nếu tâm A có đối xứng cầu thì trường tạo bởi hạt A có thể coi như trường xuyên tâm. Trong trường đó kí hiệu thế năng của hạt B là $U(r)$ (r là khoảng cách từ tâm A đến hạt B). Gọi năng lượng của hạt B là E . Cho $U(r = \infty) = 0$ thì $E > 0$, vì ta chỉ chú ý đến trường hợp khi B với năng lượng E chuyển động từ ∞ tới A . Theo lí thuyết

về chuyển động trong trường xuyên tâm thì các trạng thái như thế của B chỉ có thể có khi $E > 0$.

Kí hiệu hàm sóng của B là $\Psi(x, y, z)$, ta có thể viết phương trình Schrodinger dưới dạng:

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\Psi = 0 \quad (11.14)$$

(ở đây $m = m_B$). Coi $U(r)$ giảm đủ nhanh theo r . Đưa vào các kí hiệu:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} \quad (11.15)$$

$$\frac{2m}{\hbar^2} U(r) = V(r) \quad (11.16)$$

Bây giờ (11.14) chuyển thành:

$$\Delta\Psi + k^2\Psi = V(r)\Psi \quad (11.17)$$

Ta chỉ chọn những nghiệm thích hợp với ý nghĩa vật lí của bài toán, tức là với khoảng cách r lớn thì các nghiệm của Ψ là tập hợp của các sóng phẳng của dòng hạt tới và sóng tán xạ của các hạt tán xạ. Do đó có thể viết Ψ dưới dạng:

$$\Psi = \Psi_i + \Psi_{is} = \Psi^0 + Q \quad (11.18)$$

Kí hiệu: $\Psi_i = \Psi^0$; $\Psi_{is} = Q$.

Dòng hạt tới theo trục z , nên:

$$\Psi^0 = \Psi_i = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{ikz} \quad (11.19)$$

($L^3 = 1$ dv thể tích)

Chuẩn hoá Ψ^0 nghĩa là mật độ các hạt tới $|\Psi^0|^2 = 1$ (1 hạt/1dv thể tích). Khi đó mật độ dòng sẽ bằng:

$$N = J_z = \frac{\hbar k}{m} |\Psi^0|^2 = v |\Psi^0|^2 = v \quad (11.20)$$

(v là vận tốc của hạt).

Hàm Ψ_{tx} biểu diễn trạng thái của các hạt tán xạ, khi r lớn có dạng.

$$\Psi_{\text{tx}}(r, \theta, \varphi) = Q(r, \theta, \varphi) = A(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (11.21)$$

Ở đây $A(\theta, \varphi)$ là biên độ sóng tán xạ, θ là góc tán xạ (góc giữa r và Oz).

Tính dòng hạt tán xạ khi r lớn:

$$J_r = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ Q \frac{\partial Q^*}{\partial r} - Q^* \frac{\partial Q}{\partial r} \right\} = \frac{\hbar k}{m} |A(\theta, \varphi)|^2 \frac{1}{r^2} = v \frac{1}{r^2} |A(\theta, \varphi)|^2 \quad (11.22)$$

Từ đó dòng hạt đi qua diện tích dS sẽ là:

$$dN = J_r dS = v |A(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (11.23)$$

$$(d\Omega = \frac{dS}{r^2})$$

$$\text{Suy ra } \sigma(\theta, \varphi) = \frac{dN}{N d\Omega} = |A(\theta, \varphi)|^2 \quad (11.24)$$

Như vậy để tính tiết diện hiệu dụng cần phải biết biên độ sóng tán xạ $A(\theta, \varphi)$. Để tìm sóng tán xạ Q , ta coi hàm $V(r)$ ở (11.16) là nhiễu loạn và áp dụng phương pháp nhiễu loạn để giải phương trình (11.17). Thay (11.18) vào (11.17) và bỏ qua số hạng $V \cdot Q$ (số hiệu chỉnh bậc 2), ta được:

$$\Delta Q + k^2 Q = V \Psi^0 \quad (11.25)$$

Bây giờ ta cần tìm nghiệm của (11.25) có dạng tiệm cận (11.21). Xét hàm:

$$\Phi(\vec{r}, t) = \Phi_0(\vec{r}) e^{-i\omega t} \quad (11.26)$$

Ở đây $\vec{r}$ là bán kính vectơ của điểm (x, y, z) , t là thời gian, ω là tần số. Coi Φ như thế vô hướng do các diện tích phân bố đều trong không gian gây ra với mật độ:

$$\rho(\vec{r}, t) = \rho_0(\vec{r}) e^{-i\omega t} \quad (11.27)$$

Theo điện động lực học, ta biết thế năng thoả mãn phương trình d'Alambert:

$$\Delta\Phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = -4\pi\rho \quad (11.28)$$

c là vận tốc lan truyền sóng điện từ.

Nghiệm của phương trình (11.28), như đã biết, nếu coi sóng do các điện tích bức xạ $\rho(\vec{r}', t)dv'$ nằm ở điểm $\vec{r}'$, thì thế tĩnh điện tại điểm $\vec{r}$ ở thời điểm t bằng:

$$\Phi(\vec{r}, t) = \int \frac{\rho(\vec{r}', t - \frac{|\vec{r}' - \vec{r}|}{c})}{|\vec{r}' - \vec{r}|} dv' \quad (11.29)$$

Ở đây $|\vec{r}' - \vec{r}|$ là khoảng cách từ điểm $\vec{r}'$ (trong đó có điện tích $\rho dv'$) tới điểm $\vec{r}$. Thay Φ theo (11.26) và ρ theo (11.27) vào (11.25), ta được:

$$\Phi_0(\vec{r}) = \int \frac{\rho_0(\vec{r}') e^{i\omega(\vec{r}' - \vec{r})/c}}{|\vec{r}' - \vec{r}|} dv' \quad (11.30)$$

Thay Φ và ρ vào phương trình D'Alembert và giản ước với $e^{-i\omega t}$, ta được:

$$\Delta\Phi_0 + \frac{\omega^2}{c^2} \Phi_0 = -4\pi\rho_0 \quad (11.31)$$

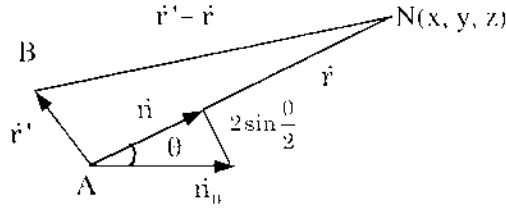
So sánh (11.31) với (11.25) ta thấy chúng trùng nhau, nếu đặt:

$$\Phi_0 = Q; \quad \frac{\omega}{c} = k; \quad \rho_0 = -\frac{1}{4\pi} \nabla^2 \Psi^0 \quad (11.32)$$

Từ đó dựa vào (11.30), ta rút ra:

$$Q(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\nabla^2(\vec{r}') \Psi^0(\vec{r}') e^{ik(\vec{r}' - \vec{r})}}{|\vec{r}' - \vec{r}|} dv' \quad (11.33)$$

chính là nghiệm của (11.25). Ta thấy khi đó $Q(\vec{r})$ chỉ là sóng tán xạ, vì (11.29) là nghiệm đối với sóng bức xạ.



Hình 40

Bây giờ ta tìm dạng của $Q(\vec{r})$ khi ở xa tâm A. Kí hiệu vectơ đơn vị trên trục Oz là $\vec{n}_0$ và vectơ đơn vị trên phương $\vec{r}$ (phương tán xạ) là $\vec{n}$. Trước hết biến đổi $|\vec{r}' - \vec{r}|$. Từ hình vẽ ta thấy:

$$|\vec{r}' - \vec{r}|^2 = r'^2 + r^2 - 2\vec{n}\vec{r}': |\vec{r}' - \vec{r}| = r' \quad |\vec{r}'| = r'$$

Khi $r \gg r'$, ta được:

$$|\vec{r}' - \vec{r}| = r - \vec{n}\vec{r}' + F\left(\frac{\vec{r}'}{r}\right) \quad (11.34)$$

Ở đây $F\left(\frac{\vec{r}'}{r}\right)$ là các thành phần $\frac{\vec{r}'}{r}$ và các bậc cao hơn. Thay (11.34) vào (11.33) và ở mẫu số bỏ qua $\vec{n}\vec{r}'$ so với r , ta thu được biểu thức Q khi r lớn.

$$Q(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-ik\vec{n}\vec{r}'} V(\vec{r}') \Psi^0(\vec{r}') d\vec{v}' \quad (11.33')$$

Thay $\Psi^0(\vec{r}')$ theo (11.19) vào đây và chú ý $z' = \vec{r}'\vec{n}_0$, ta được:

$$Q(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{ik(\vec{n}_0 - \vec{n})\vec{r}'} V(\vec{r}') d\vec{v}' \quad (11.35)$$

So sánh (11.35) với (11.21), ta có:

$$A(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{ik(\vec{n}_0 - \vec{n})\vec{r}'} V(\vec{r}') d\vec{v}' \quad (11.36)$$

$$\text{Đặt } \vec{K} = k(\vec{n}_0 - \vec{n}) \rightarrow |\vec{K}| = k|\vec{n}_0 - \vec{n}| = 2k \sin \frac{\theta}{2} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2} \quad (11.37)$$

và chú ý đến (11.16), ta được:

$$A(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') d\mathbf{v}' \quad (11.38)$$

Ta thấy biên độ tán xạ tỉ lệ với thành phần Fourier trong khai triển thế năng theo sóng phẳng $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}$.

Thay $A(\theta, \varphi)$ vào (11.24), ta có:

$$\sigma(\theta, \varphi) = \frac{1}{16\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \left[\int e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') d\mathbf{v}' \right]^2 \quad (11.39)$$

Công thức này là gần đúng (gần đúng bậc nhất theo nhiễu loạn). Trong lý thuyết tán xạ phép tính gần đúng này thường gọi là phương pháp Born.

Cường độ tán xạ $|Q(\mathbf{r})|^2$ ở gần tâm tán xạ là nhỏ so với cường độ sóng tới $|\Psi^0(\mathbf{r})|^2$. Thật vậy từ (11.39) khi $r = 0$, coi trường lực là xuyên tâm, sau khi lấy tích phân theo θ, φ , ta được:

$$\left| \frac{Q}{\Psi^0} \right| = \frac{2m}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty U(r') \frac{\sin kr'}{kr'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} r' dr' \right|$$

Khi $k \rightarrow \infty$ thì tích phân tiến tới 0. Do đó khi năng lượng của hạt đủ lớn (k lớn) thì phương pháp Born luôn áp dụng được.

§3. PHA CỦA SÓNG TÁN XẠ VÀ TIẾT DIỆN HIỆU DỤNG RIÊNG PHẦN

$$\text{Phương trình } \Delta\Psi + k^2\Psi = V(\mathbf{r})\Psi \quad (11.40)$$

có dạng giống như phương trình bán kính của bài toán hạt chuyển động trong trường xuyên tâm, nó chỉ khác phương trình bán kính bởi thừa

số $\frac{2m}{\hbar^2}$. Do đó nghiệm của (11.40) (ứng với năng lượng $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, momen

$M^2 = \hbar^2 l(l+1)$ và $M_z = m\hbar$) có thể viết:

$$\Psi_{lm}(r, \theta, \varphi) = R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (11.41)$$

Trong đó nếu đặt $R_l = \frac{Q_l}{r}$ thì từ (11.40), ta có:

$$\frac{d^2 Q_l}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] Q_l = V(r) Q_l \quad (11.42)$$

Nghiệm tổng quát của (11.40) có thể biểu diễn dưới dạng khai triển theo các hàm riêng trực giao $\Psi_{lm}(r, \theta, \varphi)$.

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} c_{lm} R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (11.43)$$

Nghĩa là nghiệm tổng quát biểu diễn dưới dạng chồng chất các hàm trạng thái được đặc trưng bởi các số lượng tử l, m .

Đối với bài toán tán xạ ta cần tìm nghiệm thành phần có dạng tiệm cận:

$$\Psi_{r, \varphi} = e^{ikr} + A(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (11.44)$$

tức là gồm thành phần sóng phẳng ban đầu và sóng tán xạ. Nghiệm này có sự đối xứng xung quanh trục z . Do đó nó không phụ thuộc vào góc φ , vì nó không phụ thuộc vào φ nên nếu như trong tổng (11.43) ta bỏ đi tất cả các số hạng với $m \neq 0$, và vì $Y_{l0}(\theta, \varphi)$ chỉ khác đa thức Legendre bởi thừa số $P_l(\cos\theta)$, nên nghiệm cần tìm có thể biểu diễn dưới dạng:

$$\Psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l R_l(r) P_l(\cos\theta) \quad (11.45)$$

Dưới đây ta xác định các biên độ c_l . Trước hết xét dạng tiệm cận của nghiệm (11.45). Khi $r \rightarrow \infty$ thì $R_l(r)$ có dạng $\frac{1}{r} A \sin(kr + \alpha_l)$.

Đặt $\alpha_l = -\frac{\pi l}{2} + \gamma_l$ và chọn hệ số chuẩn hoá của $R_l(r)$ sao cho $A = \frac{1}{k}$, ta được:

$$R_l(r)_{r \rightarrow \infty} = \frac{\sin(kr - \frac{\pi l}{2} + \gamma_l)}{kr} \quad (11.46)$$

Như vậy hàm $\Psi(r, \theta)$ có dạng tiệm cận:

$$\Psi(r, \theta)_{r \rightarrow \infty} = \sum_{l=0}^{\infty} c_l P_l(\cos \theta) \left\{ \frac{e^{i(kr - \frac{\pi l}{2} + \gamma_l)}}{2ikr} - \frac{e^{-i(kr - \frac{\pi l}{2} + \gamma_l)}}{2ikr} \right\} \quad (11.47)$$

Bây giờ ta chọn các hệ số c_l sao cho (11.47) trùng với (11.45). Muốn vậy ta khai triển sóng phẳng $e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta}$ theo đa thức Legendre:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\frac{\pi l}{2}} \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} I_{l+\frac{1}{2}}(kr) P_l(\cos \theta) \quad (11.48)$$

Ở đây $I_{l+\frac{1}{2}}$ là hàm Bessel bậc $l + \frac{1}{2}$. Ý nghĩa của việc khai triển này là sự biểu diễn các sóng phẳng dưới dạng chồng chất các sóng cầu đứng, tức là khai triển các hàm trạng thái với momen xung lượng khác nhau đối với gốc toạ độ ($r = 0$). Mỗi thành phần của tổng (11.48) chính là nghiệm của phương trình (11.40) với $V(r) = 0$, tức là đối với chuyển động tự do với momen xung lượng cho trước. Khi r lớn ta có:

$$I_{l+\frac{1}{2}}(kr)_{r \rightarrow \infty} = \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sin(kr - \frac{\pi l}{2}) \quad (11.49)$$

$$\text{Đặt } A(\theta) = \sum_l \frac{A_l}{2ik} P_l(\cos \theta) \quad (11.50)$$

ta có thể biểu diễn $\Psi(r, \theta)_{r \rightarrow \infty}$ dưới dạng:

$$\Psi(r, \theta)_{r \rightarrow \infty} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) \left\{ (2l+1) e^{i\frac{\pi l}{2}} \left[\frac{e^{i(kr - \frac{\pi l}{2})}}{2ikr} - \frac{e^{-i(kr - \frac{\pi l}{2})}}{2ikr} \right] + \frac{A_l e^{ikr}}{2ikr} \right\} \quad (11.51)$$

So sánh (11.51) với (11.47), ta rút ra:

$$\left. \begin{aligned} c_l e^{-i\gamma_l} &= (2l+1)e^{i\frac{\pi}{2}} \\ c_l e^{-i\frac{\pi}{2} + i\gamma_l} &= (2l+1) + A_l \end{aligned} \right\} \Rightarrow A_l = (2l+1)(e^{2i\gamma_l} - 1) \quad (11.52)$$

Do đó biên độ tán xạ:

$$A(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\gamma_l} - 1)P_l(\cos\theta) \quad (11.53)$$

Và tiết diện hiệu dụng vi phân:

$$\sigma(\theta) = |A(\theta)|^2 = \frac{1}{4k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\gamma_l} - 1)P_l(\cos\theta) \right|^2 \quad (11.54)$$

Tiết diện hiệu dụng tán xạ đàn hồi:

$$\Sigma(\theta) = \int \sigma(\theta) d\Omega = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \gamma_l \quad (11.55)$$

Ta thấy tiết diện vi phân cũng như tiết diện toàn phần phụ thuộc vào pha của sóng tán xạ γ_l . Đại lượng:

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \gamma_l \quad (11.56)$$

là tiết diện hiệu dụng đối với các hạt có bình phương momen xung lượng $M^2 = \hbar^2 l(l+1)$ đối với tâm lực, gọi là tiết diện hiệu dụng riêng phần và γ_l gọi là pha của sóng tán xạ riêng phần.

§4. TÁN XẠ ĐÀN HỒI BỞI NGUYÊN TỬ ĐỐI VỚI CÁC HẠT MANG ĐIỆN CHUYỂN ĐỘNG NHANH

1. Ta sẽ áp dụng công thức tiết diện hiệu dụng đối với một số trường hợp tán xạ đàn hồi bởi nguyên tử của các hạt mang điện chuyển động nhanh. Trước đây ta giả sử trước và sau va chạm nguyên tử đứng yên. Nếu vận tốc của dòng hạt tới rất lớn so với vận tốc nhiệt của nguyên tử thì có thể bỏ qua vận tốc của nguyên tử trước lúc va chạm. Sau va chạm chỉ có

thể bỏ qua vận tốc của nguyên tử nếu khối lượng m của hạt tới rất nhỏ so với khối lượng của nguyên tử M . Nếu các điều kiện trên được thoả mãn thì ta có thể tính tiết diện hiệu dụng trong tán xạ đàn hồi.

Giả sử hạt tới có khối lượng m , điện tích e_1 . Kí hiệu $-\rho(\vec{r}'')$ là mật độ điện tích do các lớp điện tử của nguyên tử gây nên tại điểm $\vec{r}''$, giả sử ρ có đối xứng cầu, thế tĩnh điện tại điểm $\vec{r}$ sẽ là:

$$\varphi(r) = \frac{Ze}{r} - e \int \frac{\rho(\vec{r}'')}{|\vec{r}'' - \vec{r}|} d\vec{v}'' \quad (11.57)$$

Thế năng của hạt bằng:

$$U(r) = e_1 \varphi(r) = \frac{zee_1}{r} - ee_1 \int \frac{\rho(\vec{r}'')}{|\vec{r}'' - \vec{r}|} d\vec{v}'' \quad (11.58)$$

Thay (11.58) (trong đó thay $r = r'$) vào (11.38), ta được:

$$A(0) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{Zee_1}{4\pi} \int \frac{e^{i\vec{K}\vec{r}'}}{r'} d\vec{v}' + \frac{2mee_1}{\hbar^2 4\pi} \int e^{i\vec{K}\vec{r}'} d\vec{v}' \int \frac{\rho(\vec{r}'') d\vec{v}''}{|\vec{r}'' - \vec{r}'|} \quad (11.59)$$

Sau khi tính toán khá phức tạp, người ta thu được:

$$A(0) = -\frac{ee_1}{2mv^2} \{Z - F(\theta)\} \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} \quad (11.60)$$

Trong đó: $F(\theta) = 4\pi \int_0^\infty \frac{\sin \vec{K}\vec{r}}{Kr} \rho(\vec{r}) r^2 dr$ gọi là hệ số nguyên tử.

$$\text{Ở đây: } K = 2k \sin \frac{\theta}{2} = \frac{2mv}{\hbar} \sin \frac{\theta}{2}$$

Từ đó ta có :

$$\sigma(\theta) = |A(\theta)|^2 = \frac{e^2 e_1^2}{4m^2 v^4} \{Z - F(\theta)\}^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (11.61)$$

Để tính $F(\theta)$, giả sử ρ giảm nhanh theo lũy thừa khi khoảng cách tới hạt nhân tăng lên.

$$\rho = \rho_0 e^{-\frac{r}{a}}, \quad a \text{ là bán kính nguyên tử.}$$

Nói chung nguyên tử trung hoà về điện, nên:

$$\int \rho dv = Z$$

$$\text{Từ đó } \rho_0 = \frac{Z}{8\pi a^3}$$

Sau khi lấy tích phân, ta được:

$$F(\theta) = \frac{Z}{(1 + K^2 a^2)^2} = \frac{Z}{(1 + 4k^2 a^2 \sin^2 \frac{\theta}{2})^2}$$

Cuối cùng ta được:

$$\sigma(\theta) = \frac{e^2 d_1^2 Z^2}{4m^2 v^4} \left[1 - \frac{1}{(1 + 4k^2 a^2 \sin^2 \frac{\theta}{2})^2} \right] \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (11.62)$$

Đối với các hạt chuyển động nhanh $ka \gg 1$, nên từ (11.62) đối với các góc không quá nhỏ thì có thể bỏ qua thành phần thứ hai trong dấu móc của (11.62), như vậy:

$$\sigma(\theta) = \frac{e^2 e_1^2 Z^2}{4m^2 v^4} \left(\sin^4 \frac{\theta}{2} \right)^{-1} \quad (11.63)$$

Công thức này trùng với công thức Rutherford.

2. Một số thí dụ

a. Tán xạ của các hạt α

Ta biết $e_1 = e_\alpha = 2e$; $m_\alpha \approx 4m_H \approx 6.6 \cdot 10^{-27} \text{kg}$.

Giả sử đối với các nguyên tử nặng $M \gg m_\alpha$. Vận tốc của hạt α trong phóng xạ tự nhiên vào cỡ 10^9cm/s , từ đó suy ra $k \approx 10^{12} \div 10^{13} \text{cm}^{-1}$, $a \approx 10^{-8} \text{cm}$ nên $ka \approx 10^4$, $\sin \frac{\theta}{2} \approx 10^{-4} \div 10^{-5}$.

$$\text{Vậy } \sigma_\alpha(\theta) = \frac{e^4 Z^2}{m_\alpha^2 v_\alpha^4} \left(\sin^4 \frac{\theta}{2} \right)^{-1} \quad (11.64)$$

b. Tán xạ của các hạt electron

Đối với các hạt electron $m_e \approx 9,1.10^{-31}\text{kg}$, $e \approx -1,6.10^{-19}\text{C}$ nên chỉ áp dụng được phương pháp Born đối với các electron có năng lượng vào cỡ vài trăm electronvon.

Khi $E_e \approx 500\text{eV}$ thì $v_e \approx 1,3.10^9\text{cm/s}$; $k \approx 1,3.10^9\text{cm}^{-1}$ nên $ka \approx 1$. Do vậy không thể bỏ qua thừa số $F(\theta)$, nghĩa là:

$$\sigma_e(\theta) = \frac{e^4}{4m_e^2 v_e^4} \{Z - F(\theta)\}^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (11.65)$$

$F(0)$ là hàm số của K ($F = F(K)$).

Người ta có thể xác định K từ thực nghiệm và tính toán bằng lí thuyết. Kết quả cho thấy số liệu thực nghiệm phù hợp với lí thuyết.

§5. TÁN XẠ CỘNG HƯỞNG

Xét biểu thức tiết diện hiệu dụng riêng phần (11.56):

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \gamma_l$$

Ta thấy σ_l không thể vượt qua giá trị cực đại.

$$\sigma_l < \sigma_{l_{\max}} = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \quad (11.66)$$

Giá trị này ứng với $\gamma_l = \frac{\pi}{2}$.

Trong một số trường hợp có một sóng riêng phần nào đó có đóng góp quan trọng trong tiết diện tán xạ. Với giá trị pha $\gamma_l = \frac{\pi}{2}$, khi năng lượng của sóng $E = E_r$ đối với sóng riêng phần đang xét, ta nói có sự tán xạ cộng hưởng.

Ta xét sự phụ thuộc của γ_l vào năng lượng E . Khi $\gamma_l = \frac{\pi}{2}$ thì $\sin \gamma = 1$ do đó $\text{ctg} \gamma_l = 0$. Phân tích $\text{ctg} \gamma_l$ thành chuỗi ở lân cận điểm $E = E_r$.

$$\operatorname{ctg} \gamma_1 \approx \frac{2}{\chi} (E - E_r) \quad (11.67)$$

$$\text{Khi đó } \sin^2 \gamma_1 = \frac{1}{1 + \operatorname{ctg}^2 \gamma_1} = \frac{\chi^2}{4(E - E_r)^2 + (\frac{\chi}{2})^2}$$

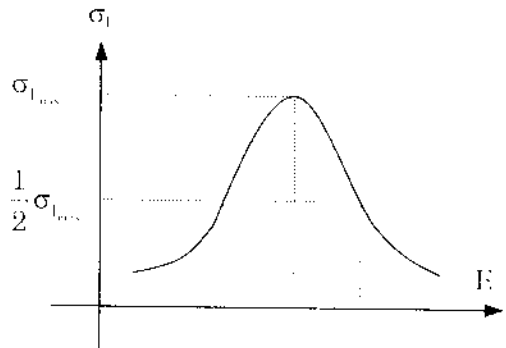
Thay biểu thức này vào (11.56), ta được:

$$\sigma_1 = \frac{\pi(2l+1)\beta^2 \chi^2}{(E - E_r)^2 + (\frac{\chi}{2})^2} \quad (11.68)$$

Trong đó $\beta^2 = \frac{1}{k^2}$.

(11.68) là công thức Breit - Wigner, nó biểu thị sự phụ thuộc của γ_1 vào giá trị cộng hưởng của năng lượng.

χ có nghĩa là: Nếu năng lượng E khác giá trị cộng hưởng một lượng $\frac{\chi}{2} = E - E_r$ thì tiết diện hiệu dụng có giá trị:



Hình 41

$$\sigma_1 = \frac{\pi(2l+1)\beta^2 \chi^2}{\chi^2} = \frac{2\pi(2l+1)}{k^2} = \frac{1}{2} (\sigma_1)_{\max} \quad (11.69)$$

bằng một nửa giá trị cực đại. Do đó người ta gọi χ là bề rộng cộng hưởng.

PHỤ LỤC

§1. SỐ PHỨC

1. Định nghĩa

Đại lượng $a + ib$ gọi là số phức, ở đây a và b là các số thực, $i = \sqrt{-1}$ là đơn vị ảo, a là phần thực, ib là phần ảo của số phức.

Số phức thường được biểu diễn bằng đồ thị. Trục hoành biểu diễn phần thực -- trục thực, trục tung biểu diễn phần ảo -- trục ảo.

Gọi độ lớn của số phức là r . φ là góc giữa trục hoành và vectơ $\vec{r}$, ta có thể biểu diễn số phức dưới dạng công thức lượng giác:

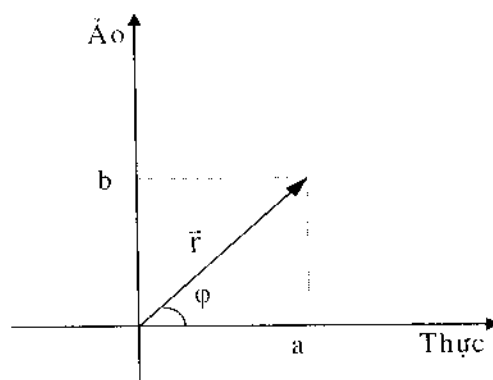
$$r(\cos\varphi + i\sin\varphi)$$

Dùng công thức Euler:

$$\cos\varphi + i\sin\varphi = e^{i\varphi}$$

ta có: $r(\cos\varphi + i\sin\varphi) = re^{i\varphi}$

Từ hình vẽ ta thấy: $r = \sqrt{a^2 + b^2}$; $\operatorname{tg}\varphi = \frac{b}{a}$



2. Các phép tính cơ bản về số phức

a) Cộng: $(a + ib) + (c + id) = (a + c) + i(b + d)$

Nghĩa là cộng phần thực với nhau và cộng phần ảo với nhau.

b) Nhân: $(r_1 e^{i\varphi_1})(r_2 e^{i\varphi_2}) = r_1 r_2 e^{i(\varphi_1 + \varphi_2)}$

c) Chú ý:

- $a + ib = c + id$, nếu $a = c$ và $b = d$, nghĩa là phần thực phải bằng nhau và phần ảo cũng phải bằng nhau.

- $a + ib = 0$, nếu $a = 0$ và $b = 0$.
- Số liên hợp phức:
 Z^* là liên hợp phức của $Z = a + ib$, khi $Z^* = a - ib$ nghĩa là $a^* = a$ và $(ib)^* = -ib$, nói cách khác để có Z^* ta phải đổi dấu cho i .

§2. MỘT SỐ KHÁI NIỆM VỀ LÝ THUYẾT TRƯỜNG

1. Đại lượng vô hướng và đại lượng vectơ

Trong vật lý các đại lượng như nhiệt độ, thời gian, năng lượng,... chỉ biểu diễn bằng các con số là đủ. Ngược lại các đại lượng như vận tốc, gia tốc, lực,... phải biểu diễn bằng các vectơ (độ lớn, phương chiều, điểm đặt).

2. Trường vô hướng và trường vectơ

Trường được biểu diễn bằng các đại lượng vô hướng là trường vô hướng như trường nhiệt độ, trường thế năng,... trường được biểu diễn bằng các đại lượng vectơ là trường vectơ như trường lực, trường vận tốc,...

3. Các đại lượng đặc trưng cho trường

Cho trường vectơ $\vec{A}$ mà các thành phần của $\vec{A}$ chỉ phụ thuộc vào tọa độ (không phụ thuộc vào thời gian), do đó có thể viết:

$$\vec{A} = \begin{cases} A_x(x, y, z) \\ A_y(x, y, z) \\ A_z(x, y, z) \end{cases}$$

– Để đặc trưng cho độ phân tán của trường vectơ $\vec{A}$ người ta đưa vào đại lượng:

$$\text{div}\vec{A} = \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z}$$

Chú ý rằng $\vec{A}$ là đại lượng vectơ, nhưng $\text{div}\vec{A}$ là đại lượng vô hướng, $\text{div}\vec{A}$ càng lớn thì độ phân tán càng lớn và ngược lại, khi:

$$\operatorname{div} \vec{A} = 0 \Rightarrow \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z} = 0$$

thì độ phân tán của trường bằng 0.

Để đặc trưng cho độ xoáy của trường vectơ $\vec{A}$, người ta dùng đại lượng:

$$\operatorname{rot} \vec{A} = \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right) \vec{i} + \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \vec{j} + \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) \vec{k}$$

($\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ là các vectơ đơn vị trên các trục tọa độ x, y, z).

Đôi khi để dễ nhớ người ta dùng kí hiệu:

$$\operatorname{rot} \vec{A} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ A_x & A_y & A_z \end{vmatrix}$$

- Trong trường vô hướng, để đặc trưng cho sự biến thiên của một đại lượng, ví dụ $U = U(x, y, z)$ người ta đưa vào đại lượng:

$$\operatorname{grad} U = \frac{\partial U}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial U}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial U}{\partial z} \vec{k}$$

- Toán tử Nabla $\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}$

-- Toán tử Laplace:

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Trong hệ tọa độ cầu:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\text{ng}}$$

Trong đó $\Delta_{\text{ng}} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$

-- Chú ý: để ý đến toán tử ∇ ta thấy:

$$\operatorname{div} \vec{A} = \nabla \cdot \vec{A} \quad (\text{nhân vô hướng})$$

$$\text{grad}U = \nabla U$$

$$\text{rot } \vec{A} = [\nabla \times \vec{A}] \quad (\text{nhân hữu hướng})$$

$$\nabla(U_1 \cdot U_2) = U_1 \nabla U_2 + U_2 \nabla U_1$$

$$\text{div}(\alpha \vec{A}) = \alpha \text{div } \vec{A} + \vec{A} \text{ grad} \alpha = \alpha \nabla \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \nabla \alpha$$

$$\text{div}(\vec{A} \times \vec{B}) = \vec{B} \text{ rot } \vec{A} - \vec{A} \text{ rot } \vec{B}$$

$$\text{rot grad}U = 0$$

$$\text{div rot } \vec{A} = 0$$

$$\text{div grad}U = \Delta U$$

§3. KHÔNG GIAN VECTƠ n CHIỀU

1. Không gian vectơ 3 chiều (V)

Trong hệ tọa độ Descartes cho 3 vectơ đơn vị trên 3 trục tọa độ là $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$. Mỗi điểm M trong không gian này đều được biểu diễn bằng một vectơ $\vec{r} = a_{11}\vec{e}_1 + a_{12}\vec{e}_2 + a_{13}\vec{e}_3$, không gian này có các tính chất sau:

– *Cộng*:

$$\vec{a} + \vec{b} + \vec{c} \in V$$

$$\vec{a} + \vec{b} = \vec{b} + \vec{a} \quad (\text{tính chất giao hoán})$$

$$\vec{a} + (\vec{b} + \vec{c}) = (\vec{a} + \vec{b}) + \vec{c} \quad (\text{tính chất kết hợp})$$

– *Nhân*:

$$\vec{a}(\vec{b} + \vec{c}) = \vec{a}\vec{b} + \vec{a}\vec{c}$$

$$\lambda(\mu\vec{a}) = (\lambda\mu)\vec{a} \quad (\text{tính chất kết hợp})$$

$$\lambda(\vec{a} + \vec{b}) = \lambda\vec{a} + \lambda\vec{b} \quad (\text{tính chất phân bố})$$

$$(\lambda + \mu)\vec{a} = \lambda\vec{a} + \mu\vec{a} \quad ; \quad \lambda \text{ và } \mu \text{ là các hệ số}$$

Các phép cộng và phép nhân trên đây đều có tính chất đóng, nghĩa là vectơ của chúng cũng nằm trong không gian này. Nếu không gian vectơ có được thêm định nghĩa tích vô hướng của hai vectơ là một con số, nói riêng,

và có định nghĩa tích vô hướng của một vectơ với chính nó thì được gọi là không gian Euclide hay không gian metric. Không gian 3 chiều thông thường này là một không gian metric với định nghĩa tích vô hướng:

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z$$

2. Không gian vectơ n chiều

Có thể mở rộng khái niệm không gian 3 chiều cho không gian n chiều. Nếu có một đại lượng được đặc trưng bằng n con số $a_{11}, a_{12}, \dots, a_{1n}$ thì đại lượng đó gọi là "vectơ" n chiều. Tập hợp tất cả các vectơ n chiều thành "không gian" n chiều. Phép cộng vectơ và phép nhân vectơ với một số thoả mãn các tính chất sau:

a. Phép cộng

Cho $\vec{x} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}; \quad \vec{y} = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$

$$\text{thì} \quad \vec{x} + \vec{y} = \{x_1 + y_1, x_2 + y_2, \dots, x_n + y_n\} \quad (3.1)$$

Phép cộng này phải có tính chất giao hoán và tính chất kết hợp.

b. Phép nhân với một số

$$\lambda \vec{x} = \{\lambda x_1, \lambda x_2, \dots, \lambda x_n\} \quad (3.2)$$

Phép nhân này phải có tính chất kết hợp và tính chất phân bố. Cả hai phép tính trên phải có tính chất đóng.

Mặt khác trong không gian n chiều phải tồn tại các vectơ zero (0), vectơ đơn vị (1), và vectơ ngược ($-\vec{x}$), thoả mãn các hệ thức:

$$\vec{x} + 0 = \vec{x}$$

$$1 \cdot \vec{x} = \vec{x}$$

$$\vec{x} + (-\vec{x}) = 0$$

c. Chú thích

Tích vô hướng của hai vectơ có thể định nghĩa theo nhiều cách. Sau đây sẽ trình bày 2 cách thường gặp:

+ Nếu 2 vectơ $\vec{x}, \vec{y}$ có các thành phần tương ứng là x_1, x_2, x_3 và y_1, y_2, y_3 , thì $(\vec{x}, \vec{y}) = (\vec{y}, \vec{x}) = (x_1 y_1 + x_2 y_2 + x_3 y_3)$.

+ Nếu x, y là các hàm của biến số t liên tục trong khoảng (a, b) thì ta có một không gian vô số chiều (vì t nhận vô số giá trị). Trong trường hợp này tích vô hướng được định nghĩa như sau:

$$(x(t), y(t)) = \int_a^b x^*(t)y(t)dt \quad (3.3)$$

Có thể thử lại rằng định nghĩa này hoàn toàn thoả mãn đòi hỏi của tích vô hướng trong không gian n chiều.

$$(x, y) = (y, x)$$

$$((x + y), z) = (x, z) + (y, z)$$

$$(\lambda x, y) = \lambda(x, y)$$

$$(x, x) \geq 0 \quad ; \quad (x, x) = 0 \Leftrightarrow x = 0$$

Một không gian (hữu hạn hoặc vô hạn chiều) trong đó biểu thức (3.3) được thoả mãn gọi là không gian Unita hay không gian Hilbert.

d. Độ dài D của một vectơ và góc φ giữa hai vectơ trong không gian hàm

Cho không gian hàm trong đó định nghĩa tích vô hướng (3.3) được thoả mãn, thì:

$$\cos \varphi = \frac{(x, y)}{|x||y|} = \frac{\int_a^b x^*(t)y(t)dt}{\sqrt{\int_a^b |x(t)|^2 dt \int_a^b |y(t)|^2 dt}}$$

Hàm $x(t)$ được gọi là chuẩn hoá thì $|x| = 1$, nghĩa là khi $\int_a^b |x(t)|^2 dt = 1$

Chuẩn hoá một hàm $x(t)$ tức là chuyển hàm $x(t)$ có biểu thức:

$$\int_a^b x^*(t)x(t)dt = \lambda \neq 1$$

sang hàm $y(t)$ thoả mãn

$$\int_a^b y^*(t)y(t)dt = 1$$

Từ đó suy ra: muốn chuẩn hoá một hàm x chỉ cần chia x cho $|x|$.

Hệ các hàm $e_1, e_2, \dots, e_n$ được gọi là hệ trực chuẩn khi $(e_i, e_j) = \delta_{ij}$ (δ_{ij} hàm Kronecker).

3. Vài định lý quan trọng (không chứng minh)

- *Định lý 1:* Trong không gian n chiều chỉ tồn tại nhiều nhất n vectơ độc lập tuyến tính với nhau $e_1, e_2, \dots, e_n$, nghĩa là:

$$\sum_{i=1}^n k_i e_i = 0$$

chỉ khi tất cả các hệ số k_i đều bằng không.

- *Định lý 2:* Mọi vectơ n chiều đều có thể phân tích được thành một và chỉ một tổ hợp tuyến tính của n vectơ độc lập tuyến tính $e_1, e_2, \dots, e_n$.

$$\underset{\text{vectơ } \mathbf{x}}{\mathbf{x}} = \sum_{i=1}^n k_i e_i$$

- *Định lý 3:* Trong một không gian metric n chiều bao giờ cũng tạo được một hệ vectơ trực chuẩn.

- *Định lý 4:* Hệ các vectơ trực giao là một hệ vectơ độc lập tuyến tính (ngược lại chưa chắc đã đúng).

Hệ các vectơ độc lập tuyến tính dùng để khai triển các vectơ khác gọi là hệ các vectơ cơ sở.

Từ các định lý trên rút ra: trong không gian metric bao giờ cũng có thể tìm được một hệ vectơ trực chuẩn làm hệ cơ sở. Khi ấy:

$$\mathbf{x} = x_1 e_1 + x_2 e_2 + \dots + x_n e_n$$

$$\mathbf{y} = y_1 e_1 + y_2 e_2 + \dots + y_n e_n$$

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \dots + x_n y_n$$

$$|\mathbf{x}| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}$$

§4. HÀM ĐẶC BIỆT

1. Phương trình và đa thức Hermite

Phương trình Hermite có dạng:

$$y''(\xi) - 2\xi y'(\xi) + 2ny(\xi) = 0$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

Nghiệm của phương trình này:

$$y(\xi) = H_n(\xi) = (-1)^n e^{-\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{\xi^2})$$

gọi là đa thức Hermite bậc n với $n = 0$ thì $H_0 = 1$;

$$n = 1 \text{ thì } H_1 = 2\xi ; \dots$$

Áp dụng công thức truy chứng:

$$H_n(\xi) = 2\xi H_{n-1} - (n-1)H_{n-2}$$

ta có thể tính được các số hạng tiếp theo $H_2 = 4\xi^2 - 2$

$$H_3 = 8\xi^3 - 12\xi$$

... ..

Đa thức Hermite có tính chất sau:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} [H_n(\xi)]^2 d\xi = 2^n n! \sqrt{\pi}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_{n'}(\xi) d\xi = 0 \quad \text{với } n \neq n'$$

2. Phương trình và đa thức Legendre

Phương trình Legendre có dạng:

$$(1 - \xi^2) y'' - 2\xi y' + l(l+1)y = 0$$

Khi biểu thị $\xi = \cos\theta$; $1 - \xi^2 = \sin^2\theta$; $d\xi = d(\cos\theta)$.

Phương trình trên trở thành:

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{dy}{d\theta} \right) + l(l+1)y = 0$$

Điều kiện hữu hạn của y trong khoảng $-1 \leq \xi \leq 1$ dẫn đến điều kiện $l = 0, 1, 2, \dots$

Đa thức Legendre là nghiệm của phương trình Legendre, có dạng:

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} [(\xi^2 - 1)^l]$$

Nếu thay thành phần $l(l+1)y$ bằng biểu thức $\left\{l(l+1) - \frac{m^2}{1-\xi^2}\right\}y$ ta có phương trình Legendre mở rộng:

$$(1-\xi^2)y'' - 2\xi y' + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-\xi^2}\right]y = 0$$

hay
$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d}{d\theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-\xi^2} \right] y = 0$$

Nghiệm của phương trình Legendre mở rộng là đa thức Legendre mở rộng.

$$P_l^m(\xi) = (1-\xi^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{d\xi^m} P_l(\xi)$$

Đa thức Legendre chỉ tồn tại với điều kiện $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

$$\text{với } -1 \leq \xi < 1$$

Một số phân tử đa thức Legendre.

l	m	$P_l^m(\xi)$
0	0	$P_0^0(\xi) = 1$
1	0	$P_1^0(\xi) = \xi$
1	1	$P_1^1(\xi) = (1-\xi^2)^{\frac{1}{2}}$

Những đa thức Legendre trên chưa được chuẩn hoá. Còn các hàm:

$$\theta_{lm}(\theta) = \pm \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2^l(l+m)!}} P_l^m(\xi)$$

(Với dấu + nếu $m \leq 0$ và dấu $(-1)^m$ nếu $m > 0$) hợp thành họ hàm trực chuẩn, đầy đủ.

3. Phương trình và đa thức Laguerre

Đa thức Laguerre bậc k có dạng:

$$L_k(\xi) = e^{\xi} \frac{d^k}{d\xi^k} (\xi^k e^{-\xi})$$

Đạo hàm cấp α của đa thức trên gọi là đa thức Laguerre mở rộng

$$L_k^{\alpha}(\xi) = \frac{d^{\alpha}}{d\xi^{\alpha}} L_k(\xi) = \frac{d^{\alpha}}{d\xi^{\alpha}} \left[e^{\xi} \frac{d^k}{d\xi^k} (\xi^k e^{-\xi}) \right]$$

Vì $\alpha \leq k$ nên nếu $k = 0, 1, 2, \dots$ thì $\alpha = 0, 1, 2, \dots, k$. Đa thức trên là nghiệm của phương trình Laguerre

$$\xi f'' + (\alpha + 1 - \xi) f' + (k - \alpha) f = 0.$$

Đa thức Laguerre có tính chất:

$$\int_0^{\infty} L_k^{\alpha}(\xi) L_k^{\alpha}(\xi) \xi^{\alpha} e^{-\xi} d\xi = \frac{(k!)^{\alpha}}{(k + \alpha)!} \delta_{kk}.$$

Do đó các hàm $\sqrt{\frac{(k - \alpha)!}{(k!)^3}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} L_k^{\alpha}(\xi)$ hợp thành họ hàm trực chuẩn trong khoảng $(0, \infty)$. Sau đây là vài phần tử đa thức Laguerre:

$$L_0^0 = 1 \qquad L_2^0 = \xi^2 - 4\xi + 2$$

$$L_1^0 = -\xi + 1 \qquad L_2^1 = 2\xi - 4$$

$$L_1^1 = 1 \qquad L_2^2 = 2$$

4. Hàm Delta Dirac suy rộng

Hàm này do Dirac đưa vào để miêu tả những khái niệm vật lý trừu tượng, ví dụ như mật độ vật chất điểm, hay mật độ điện tích điểm. Các giá trị của nó không phải được xác định theo các giá trị của đối số như các hàm thông thường, mà bằng các biểu thức định nghĩa sau:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{khi } x \neq 0 \\ \infty & \text{khi } x = 0 \end{cases}$$

$$\int_a^b \delta(x) dx = 1 \qquad (\text{tại } x = 0) \text{ với } a < 0 < b$$

Từ định nghĩa trên ta thấy đồ thị của hàm Delta không được xác định, tuy vậy ta có thể biểu diễn nó bằng một đường cong bất kì có chiều cao vô cùng lớn và chiều rộng vô cùng hẹp, sao cho diện tích giới hạn bởi đường cong và trục hoành bằng đơn vị.

Hàm $\delta(x)$ có tính chất cơ bản sau:

$$\int_a^b f(x)\delta(x)dx = f(0) \quad \text{tại} \quad a < 0 < b$$

Với $f(x)$ là hàm liên tục bất kì của x . Như vậy muốn lấy tích phân của tích $f(x)\delta(x)$ ta chỉ cần đổi biến số của hàm $f(x)$ bằng số 0.

Nếu đổi số của hàm Delta là $x - d$, nghĩa là tịnh tiến gốc hệ toạ độ đi một đoạn $x = d$, ta có:

$$\delta(x - d) = \begin{cases} 0 & \text{khi } x \neq d \\ \infty & \text{khi } x = d \end{cases}$$

$$\int_a^b \delta(x - d)dx = 1 \quad \text{với} \quad a < d < b$$

Và nó cũng có tính chất cơ bản sau:

$$\int_a^b f(x)\delta(x - d)dx = f(d)$$

Hàm Delta còn có một số tính chất khác:

$$\delta(-x) = \delta(x) \quad ; \quad \delta(cx) = \frac{1}{|c|} \delta(x)$$

§5. GIẢI PHƯƠNG TRÌNH DAO ĐỘNG TỬ ĐIỀU HOÀ

Phương trình Schrodinger đối với dao động tử điều hoà có dạng:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \Psi = 0 \quad (5.1)$$

$$\text{Đặt: } \xi = \sqrt{\alpha} x \quad ; \quad \alpha = \frac{m\omega}{\hbar} \quad ; \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

$$\text{ta có: } \frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\Psi = 0 \quad (5.1')$$

Nghiệm của phương trình (5.1') phải thoả mãn điều kiện của hàm sóng trong khoảng $(-\infty < \xi < \infty)$. Chuyển động ở đây không bị giới hạn bởi bức tường nào cả, do đó đòi hỏi tự nhiên đối với dao động tử điều hoà là hàm sóng phải giới nội và phương trình (5.1') chỉ cho nghiệm thoả mãn điều kiện này trong trường hợp λ lấy các giá trị hoàn toàn xác định.

Để giải thích tính chất trên ta nhận xét dạng tiệm cận của $\Psi(\xi)$ khi $\xi \gg \lambda$. Từ (5.1') ta có:

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} - \xi^2\Psi = 0 \quad (5.2)$$

Nghiệm của phương trình (5.2) có dạng:

$$\Psi(\xi) = A\xi^\beta e^{\pm \frac{\xi^2}{2}}$$

Trong đó A là hằng số, β là một số giới nội bất kì.

Để đảm bảo điều kiện giới nội với các giá trị ξ lớn, ta chọn nghiệm:

$$e^{-\frac{\xi^2}{2}} \text{ (vì } e^{+\frac{\xi^2}{2}} \rightarrow \infty \text{ khi } \xi \rightarrow \infty).$$

Như vậy nghiệm của (5.2) là :

$$\Psi(\xi) = AH(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad (5.3)$$

$H(\xi)$ là hàm chưa biết, nó mang tính chất như hàm ξ^β khi $\xi \rightarrow \infty$. Thay nghiệm (5.3) vào phương trình (5.1'), ta được:

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\lambda - 1)H = 0 \quad (5.4)$$

Chừng nào mà điểm $\xi = 0$ không phải là điểm đặc biệt của phương trình (5.4) thì ta có thể tìm nghiệm của nó dưới dạng cấp luỹ thừa:

$$H(\xi) = a_n \xi^n + a_{n+1} \xi^{n+1} + a_{n+2} \xi^{n+2} + \dots = \sum_{k=n}^{\infty} a_k \xi^k \quad (5.5)$$

Để đảm bảo tính giới nội của nghiệm, ta chọn luỹ thừa n sao cho $H(\xi)$ không tiến đến ∞ ở điểm nào cả.

Lấy đạo hàm $H(\xi)$:

$$\frac{dH}{d\xi} = n a_n \xi^{n-1} + (n+1)a_{n+1}\xi^n + (n+2)a_{n+2}\xi^{n+1} + \dots$$

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} = n(n-1) a_n \xi^{n-2} + (n+1)na_{n+1}\xi^{n-1} + (n+2)(n+1)a_{n+2}\xi^n + \dots$$

Thay các đạo hàm trên vào (5.4) và sau khi biến đổi, ta được:

$$n(n-1) a_n \xi^{n-2} + (n+1)na_{n+1}\xi^{n-1} + [(n+2)(n+1)a_{n+2} - (2n+1-\lambda)a_n]\xi^n \equiv 0 \quad (5.6)$$

Để (5.6) đồng nhất bằng không thì các hệ số của ξ lũy thừa đều phải bằng không. Vậy từ (5.6) ta rút ra:

$$\text{– Đối với số hạng thứ nhất} \quad n(n-1) = 0 \Rightarrow \begin{cases} n=0 \\ n=1 \end{cases}$$

$$\text{– Đối với số hạng thứ hai} \quad n(n+1) = 0 \Rightarrow \begin{cases} n=0 \\ n=-1 \end{cases}$$

Nghiệm $n = -1$ không thích hợp vì bắt đầu từ ξ^{-1} thì cấp số sẽ tiến đến ∞ khi $\xi \rightarrow 0$.

– Đối với số hạng thứ ba

$$(n+2)(n+1)a_{n+2} = (2n+1-\lambda)a_n \Rightarrow a_n = \frac{(n+2)(n+1)}{2n+1-\lambda} a_{n+2} \quad (5.7)$$

Công thức (5.7) cho phép lần lượt tính được tất cả các số hạng khác theo một số hạng đã cho.

Vì cấp số có thể bắt đầu từ lũy thừa $n=0$ và $n=1$, do đó có thể tách (5.5) thành 2 cấp số: một cấp gồm toàn các số hạng chẵn và một cấp gồm toàn các số hạng lẻ:

$$a_0 + a_2\xi^2 + a_4\xi^4 + \dots \quad (5.8)$$

$$a_1\xi^1 + a_3\xi^3 + a_5\xi^5 + \dots \quad (5.9)$$

Nghiên cứu tính chất của các cấp số (5.8), ta sẽ chứng tỏ rằng với ξ đủ lớn thì (5.8) cũng sẽ thể hiện các tính chất như hàm e^{ξ^2} . So sánh (5.8) với hàm e^{ξ^2} ,

$$\text{Ta biết } e^{\xi^2} = 1 + \frac{\xi^2}{1!} + \frac{\xi^4}{2!} + \frac{\xi^6}{3!} + \dots$$

$$\text{Nên } e^{\xi^2} = 1 + \frac{\xi^2}{1!} + \frac{\xi^4}{2!} + \frac{\xi^6}{3!} + \dots + \frac{\xi^v}{\left(\frac{v}{2}\right)!} + \frac{\xi^{v+2}}{\left(\frac{v}{2}+1\right)!} + \dots$$

Khi ξ đủ lớn thì các số hạng đầu không quan trọng so với các số hạng có số mũ bậc cao. Đặt các hệ số của ξ^v và ξ^{v+2} là b_v và b_{v+2} , ta có:

$$\frac{b_{v+2}}{b_v} = \frac{\left(\frac{v}{2}\right)!}{\left(\frac{v}{2}+1\right)!} = \frac{1}{\frac{v}{2}+1}$$

Khi ξ đủ lớn thì có thể bỏ số 1 ở mẫu số, do đó:

$$\frac{b_{v+2}}{b_v} \approx \frac{2}{v}$$

Mặt khác khi n đủ lớn thì từ công thức (5.7) ta có:

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} \approx \frac{2}{n}$$

Cho $v = n$, ta được $\frac{b_{n+2}}{a_{n+2}} = \frac{b_n}{a_n} = \dots = \text{const}$

Nghĩa là các số hạng bậc cao của cấp số đang xét chỉ khác các số hạng bậc cao của hàm số e^{ξ^2} một hằng số nào đó. Điều đó chứng tỏ với ξ lớn thì $H(\xi)$ sẽ tăng lên như hàm e^{ξ^2} . Không thể chọn $H(\xi)$ như là cấp số vì nó không thoả mãn điều kiện giới nội. Song ta sẽ thu được nghiệm thoả mãn đòi hỏi giới nội (nghĩa là $\Psi(\xi) = AH(\xi)e^{\frac{\xi^2}{2}}$ sẽ giới nội khi $\xi \rightarrow \infty$) nếu cấp số (5.5) dừng lại ở một số hạng nào đó, tức cấp số quy về một đa thức. Giả sử $a_{n+2} = 0$, $a_n \neq 0$ thì tất cả các số hạng đứng sau a_{n+2} đều bằng không. Khi đó $H(\xi)$ quy về một đa thức bậc n . Vậy theo (5.7) ta suy ra $2n+1 = \lambda$ với $n = 0, 1, 2, \dots$ (đpcm)

§6. GIẢI PHƯƠNG TRÌNH BÁN KÍNH (CHUYỂN ĐỘNG TRONG TRƯỜNG COULOMB)

Từ phương trình (6.27) (trong chương 6)

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[\frac{2Z}{\rho} - 2\varepsilon - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0 \quad (6.1)$$

$$\text{Ở đây } \varepsilon = \frac{-E}{2|E_0|}; \quad E_0 = \frac{-me^4}{2\hbar^2} \approx -13,53(\text{eV})$$

$$\rho = \frac{r}{r_0}; \quad r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0,53 \text{ \AA}$$

Phương trình này phải cho nghiệm thoả mãn điều kiện giới nội của hàm sóng trong toàn miền biến thiên của biến số. Khi $\rho \rightarrow \infty$ thì R có dạng tiệm cận và (6.1) biến thành:

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} - 2\varepsilon R = 0 \quad (6.2)$$

Nghiệm của (6.2) có dạng $R \sim e^{-\beta\rho}$ ($\beta = \sqrt{2\varepsilon}$). Ta chọn nghiệm $e^{-\beta\rho}$ vì nghiệm dấu "+" không thoả mãn điều kiện giới nội.

Khi $\rho \rightarrow 0$ thì hai yếu tố đầu trong số hạng thứ 3 của phương trình (6.1) không quan trọng so với số hạng cuối, nên từ (6.1) ta có:

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R = 0 \quad (6.3)$$

Nghiệm của (6.3) có dạng $R \sim \rho^\gamma$, γ là số mũ chưa biết. Thay nghiệm này vào (6.3) tìm được phương trình:

$$\gamma(\gamma+1) = l(l+1)$$

Phương trình này cho 2 nghiệm $\gamma = l$ và $\gamma = -(l+1)$. Nghiệm $\gamma = -(l+1)$ không thoả mãn điều kiện giới nội của hàm sóng vì khi $\rho \rightarrow 0$ thì $R = \rho^{-(l+1)} \rightarrow \infty$. Vậy ta lấy nghiệm $R = \rho^l$.

Tóm lại nghiệm của phương trình (6.1) có dạng:

$$R(\rho) = C\rho^l e^{-\beta\rho} V(\rho) \quad (6.4)$$

Trong đó C là hằng số nào đó, $V(\rho)$ là hàm chưa biết. Thay $V(\rho)$ và đạo hàm của nó vào (6.1), ta được:

$$\rho \frac{d^2 V}{d\rho^2} + \frac{dV}{d\rho} (1 - \beta\rho + 1) + 2V(Z - \beta - \beta l) = 0 \quad (6.5)$$

Đưa vào biến số mới $\xi = 2\beta\rho$ thì (6.5) chuyển thành:

$$\xi \frac{d^2 V}{d\xi^2} + \frac{dV}{d\xi} (2l + 2 - \xi) + V\left(\frac{Z}{\beta} - 1 - 1\right) = 0 \quad (6.6)$$

Nghiệm cần tìm phải thoả mãn đòi hỏi giới nội của hàm sóng khi $\xi \rightarrow 0$ và $\xi \rightarrow \infty$. Người ta tìm nghiệm của (6.6) dưới dạng chuỗi:

$$V(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k \quad (6.7)$$

Thay $V(\xi)$ và đạo hàm của nó vào (6.6) rồi tập hợp các số hạng của ξ lũy thừa cùng bậc, ta được:

$$\sum_k \xi^k \left[(k+1)(2l+2+k)a_{k+1} + \left(\frac{Z}{\beta} - 1 - 1 - k\right)a_k \right] = 0 \quad (6.8)$$

Đẳng thức này sẽ được thoả mãn với các giá trị tuỳ ý của ξ nếu tập hợp các hệ số của ξ^k bằng không, từ đó ta suy ra công thức truy toán:

$$a_{k+1} = \frac{k+1+1-\frac{Z}{\beta}}{(k+1)(2l+2+k)} a_k \quad (6.9)$$

Có thể chứng minh rằng khi $\xi \rightarrow \infty$ thì cấp số (6.7) sẽ tăng lên vô hạn như hàm $e^{\frac{1}{2}\xi}$ (như bài toán dao động tử điều hoà). Do đó để đảm bảo điều kiện giới nội thì cấp số (6.7) phải dừng lại ở một số hạng nào đó, nghĩa là cấp số quy về một đa thức, giả sử là đa thức bậc $n_r = k_{\max}$. Từ đó, theo (6.9) suy ra:

$$a_{n_r} \neq 0 \text{ và } a_{n_r-1}, a_{n_r-2}, \dots \text{ đều bằng không.}$$

Điều kiện để $a_{n_r-1} = 0$ là:

$$n_r + 1 + 1 = \frac{Z}{\beta} = n \quad (6.10)$$

ở đây	$n = 1, 2, 3, \dots$ là số lượng tử chính
	$n_r = 0, 1, 2, \dots$ là số lượng tử bán kính
	$l = 0, 1, 2, \dots$ là số lượng tử quỹ đạo
Ta thấy	$n \geq (l + 1)$ và $n > n_r$
Vì	$n = \frac{Z}{\beta}$ và $\beta = \sqrt{2\varepsilon}$,
suy ra	$\varepsilon = \frac{Z^2}{2n^2} \quad (\text{đpcm})$

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. A.A.Xokolov, I.M.Ternov. *Kvantovai mekhanika i Atomnaia Fizika, Izdat. Proveshenie*, Moskva, 1971.
2. A.N.Matvêev. *Cơ học lượng tử và cấu trúc nguyên tử* (tập I, II). NXB Giáo dục, Hà Nội, 1975, 1980.
3. A.S. Đavıdov. *Cơ học lượng tử* (tập I). NXB Đại học và THCN, Hà Nội, 1972.
4. Đ.I. Blokhinsev. *Osnovy Kvantovoi mekhaniki, Vysaia Skola*, Moskva, 1961.
5. E.V. Sponski. *Atomnaia Fizika (tập I, II), Izdat, Fizmat, Literaturu*. Moskva, 1963.
6. Nguyễn Xuân Hãn. *Cơ học lượng tử*. NXB ĐHQG Hà Nội, 1998.
7. Phan Đình Kiển. *Giáo trình cơ học lượng tử*. Trường ĐHSP Thái Nguyên, 1999.
9. Phạm Quý Tư, Đỗ Đình Thanh. *Cơ học lượng tử*. NXB ĐHQG Hà Nội, 2003.
8. Đặng Quang Khang. *Cơ học lượng tử*. NXB Khoa học và Kỹ thuật, Hà Nội, 1996.
10. V.G.Levir, Iu.A.Vdovin, V.A.Miamlin. *Kurc Teoreticheckoi Fiziki* (tập II). Izdat – Nauka, Moskva, 1971.

Chịu trách nhiệm xuất bản:

Giám đốc ĐINH NGỌC BẢO

Tổng biên tập LÊ A

Biên tập nội dung:

VŨ THANH HÀ

ĐÀO THỊ LỆ THỦY

Kỹ thuật vi tính:

ĐÀO DUYỄN

Trình bày bìa:

VIỆT QUANG

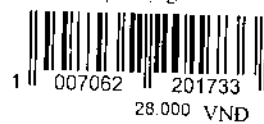
CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

In 1000 cuốn, khổ 17 × 24cm, tại Xí nghiệp in Thái Nguyên.

Giấy phép xuất bản số: 5-994/XB-QĐXB, kí ngày 19-7-2004.

In xong và nộp lưu chiểu tháng 1 năm 2005.

Tl 33 cơ học lượng tử



1 007062 201733

28.000 VND



Giá: 28.000đ