

www.mientayvn.com

Dịch tiếng anh chuyên ngành khoa học tự nhiên và kỹ thuật.

Dịch các bài giảng trong chương trình học liệu mở của học viện MIT, Yale.

Tìm và dịch tài liệu phục vụ cho sinh viên làm seminar, luận văn.

Tại sao mọi thứ đều miễn phí và chuyên nghiệp ???

Trao i tr c tuy n t i:

www.mientayvn.com/chat_box_li.html

MỞ ĐẦU

MỞ ĐẦU

Học phần cơ học lượng tử nâng cao là môn học bắt buộc đối với học viên cao học chuyên ngành Phương pháp Giảng dạy Vật lý và chuyên ngành Vật lý Lý thuyết-Vật lý Toán, nó nhằm bổ sung và nâng cao một số kiến thức cơ học lượng tử như các phương pháp tính gần đúng trong cơ học lượng tử, lý thuyết tán xạ lượng tử, cơ học lượng tử tương đối tính,... Các kiến thức này là cơ sở để học viên tiếp thu các kiến thức về Vật lý thống kê, Vật lý chất rắn, Cơ sở lý thuyết trường lượng tử,...

Với mục tiêu như trên, nội dung của môn học được xây dựng trong 4 chương. Chương I khái quát lại các cơ sở của cơ học lượng tử (cơ sở toán học, các tiên đề của cơ học lượng tử, nguyên lý bất định Heisenberg, phương trình Schrödinger, sự biến đổi theo thời gian của giá trị trung bình các đại lượng vật lý,...). Chương II trình bày các phương pháp gần đúng để giải phương trình Schrödinger thường được sử dụng trong cơ học lượng tử. Chương III trình bày lý thuyết tán xạ lượng tử. Chương IV trình bày khái quát cơ học lượng tử tương đối tính, bao gồm một số phương trình cơ bản (Phương trình Klein-Gordon, phương trình Dirac, phương trình Pauli,...), một số khái niệm cơ bản (Mật độ xác suất tương đối tính và mật độ dòng xác suất tương đối tính, spin và mômen từ của hạt vi mô,...). Ngoài ra, các học viên cao học Vật lý Lý thuyết -Vật lý Toán còn có 15 tiết để khảo sát sâu hơn về cấu trúc các trạng thái nguyên tử, lý thuyết lượng tử về bức xạ, hiệu ứng Zeemann dị thường, các trạng thái năng lượng âm, tính bất biến của phương trình Dirac.

Để giúp học viên nắm chắc các kiến thức của môn học, số thời gian dành cho học viên rèn luyện các kỹ năng vận dụng và giải các bài tập, xêmine chiếm 1/4 thời lượng của môn học.

Mục lục

1	Cơ sở của cơ học lượng tử	4
1.1	Cơ sở toán học của cơ học lượng tử	4
1.1.1	Toán tử:	4
1.1.2	Các phép tính trên toán tử	5
1.1.3	Hàm riêng, trị riêng và phương trình trị riêng của toán tử	6
1.1.4	Toán tử tự liên hợp tuyến tính (toán tử hermitic) . . .	6
1.1.5	Các tính chất của toán tử hermitic	8
1.2	Các tiên đề của cơ học lượng tử	9
1.2.1	Tiên đề 1: Trạng thái và thông tin	9
1.2.2	Tiên đề 2: Các đại lượng động lực	9
1.2.3	Tiên đề 3: Phép đo các đại lượng động lực	10
1.2.4	Giá trị trung bình của biến số động lực	11
1.2.5	Tính hệ số phân tích c_i	11
1.3	Sự đo đồng thời hai đại lượng vật lý	12
1.3.1	Sự đo chính xác đồng thời hai đại lượng vật lý	12
1.3.2	Phép đo hai đại lượng động lực không xác định đồng thời. Nguyên lý bất định Heisenberg.	13
1.4	Phương trình Schrödinger	15
1.4.1	Phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian	15
1.4.2	Mật độ dòng xác suất. Sự bảo toàn số hạt	16
1.4.3	Phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian. Trạng thái dừng.	17
1.5	Sự biến đổi theo thời gian của các đại lượng động lực	19
1.5.1	Đạo hàm của toán tử động lực theo thời gian	19
2	Một số phương pháp gần đúng trong cơ học lượng tử	22
2.1	Nhiều loạn dừng trong trường hợp không suy biến	23
2.2	Lý thuyết nhiễu loạn dừng trong trường hợp có suy biến . . .	26

2.2.1	Lý thuyết nhiễu loạn khi có hai mức gần nhau	26
2.2.2	Lý thuyết nhiễu loạn dừng khi có suy biến:	31
2.3	Hiệu ứng Stark trong nguyên tử Hydro	35
2.4	Nhiễu loạn phụ thuộc thời gian	39
2.5	Sự chuyển dời lượng tử của hệ vi mô sang các trạng thái mới dưới ảnh hưởng của nhiễu loạn	42
2.6	Nguyên tử Heli	44
2.7	Phương pháp trường tự hợp Hartree-Fok	48
2.7.1	Nguyên lý biến phân	48
2.7.2	Phương pháp trường tự hợp Hartree-Fok	52
3	Lý thuyết tán xạ lượng tử	57
3.1	Biên độ tán xạ và tiết diện tán xạ	57
3.1.1	Tiết diện tán xạ	57
3.1.2	Biên độ tán xạ	59
3.1.3	Tán xạ đàn hồi của các hạt không có spin	60
3.2	Tán xạ đàn hồi trong phép gần đúng Born	65
3.3	Phương pháp sóng riêng phần	68
4	Cơ học lượng tử tương đối tính	74
4.1	Phương trình Klein-Gordon (K-G)	75
4.2	Phương trình Dirac	76
4.3	Mật độ xác suất và mật độ dòng xác suất trong lý thuyết Dirac	81
4.4	Nghiệm của phương trình Dirac đối với hạt chuyển động tự do	83
4.5	Spin của hạt được mô tả bằng phương trình Dirac	85
4.6	Chuyển từ phương trình Dirac sang phương trình Pauli. Mô-men từ của hạt.	87

Chương 1

Cơ sở của cơ học lượng tử

1.1 Cơ sở toán học của cơ học lượng tử

1.1.1 Toán tử:

a) Định nghĩa: Toán tử là một phép toán tác dụng vào một hàm này thì biến đổi thành một hàm khác.

Ta gọi \hat{A} là một toán tử nếu

$$\hat{A}\psi(x) = \phi(x). \quad (1.1)$$

Ví dụ: Các toán tử :

+ Phép nhân với x^2

$$\hat{A}\psi(x) = x^2\psi(x),$$

trong trường hợp này \hat{A} phụ thuộc biến số x .

+ Phép lấy đạo hàm với biến số x :

$$\hat{A}\psi(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}$$

+ Phép nhân với một số phức C :

$$\hat{A}\psi(x) = C\psi(x),$$

ở đây, \hat{A} không phụ thuộc vào biến x và phép lấy đạo hàm theo x . Đặc biệt nếu:

$$C = 0 \quad : \hat{A}\psi(x) = 0, \quad \hat{A} \text{ là toán tử không,}$$

$$C = 1 \quad : \hat{A}\psi(x) = \psi(x), \quad \hat{A} \text{ là toán tử đơn vị.}$$

+ Phép lấy liên hiệp phức:

$$\hat{A}\psi(x) = \psi^*(x).$$

b) Toán tử tuyến tính: Toán tử \hat{A} được gọi là toán tử tuyến tính nếu nó thoả mãn tính chất sau:

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2. \quad (1.2)$$

Trong hệ thức trên, ψ_1 và ψ_2 là hai hàm bất kỳ, c_1 và c_2 là hai hằng số bất kỳ.

Ví dụ: $\hat{A} = (d/dx)$ là toán tử tuyến tính vì

$$\frac{d}{dx}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\frac{d\psi_1}{dx} + c_2\frac{d\psi_2}{dx}.$$

Còn toán tử lấy liên hiệp phức không phải là toán tử tuyến tính vì

$$\begin{aligned} \hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) &= (c_1\psi_1 + c_2\psi_2)^* = c_1^*\psi_1^* + c_2^*\psi_2^* = c_1^*\hat{A}\psi_1 + c_2^*\hat{A}\psi_2 \\ &\neq c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2. \end{aligned}$$

1.1.2 Các phép tính trên toán tử

Cho ba toán tử $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$. ta định nghĩa các phép tính toán tử sau:

a) Tổng hai toán tử: \hat{S} được gọi là tổng của hai toán tử \hat{A}, \hat{B} , ký hiệu là

$$\hat{S} \equiv \hat{A} + \hat{B} \quad \text{nếu} \quad \forall \psi(x), \hat{S}\psi(x) = \hat{A}\psi(x) + \hat{B}\psi(x). \quad (1.3)$$

b) Hiệu hai toán tử: \hat{D} được gọi là hiệu hai toán tử \hat{A}, \hat{B} , ký hiệu

$$\hat{D} \equiv \hat{A} - \hat{B} \quad \text{nếu} \quad \forall \psi(x), \hat{D}\psi(x) = \hat{A}\psi(x) - \hat{B}\psi(x). \quad (1.4)$$

c) Tích hai toán tử: $\hat{P} \equiv \hat{A}\hat{B}$ là tích của hai toán tử \hat{A} và \hat{B} nếu

$$\hat{P}\psi(x) = (\hat{A}\hat{B})\psi(x) = \hat{A}(\hat{B}\psi(x)). \quad (1.5)$$

Tích của hai toán tử nói chung là không giao hoán, nghĩa là $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Chẳng hạn, cho

$$\hat{A} = \frac{d}{dx}, \quad \hat{B} = x$$

thì ta có

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

còn

$$\hat{B}\hat{A}\psi(x) = x\frac{d\psi(x)}{dx} \neq \hat{A}\hat{B}\psi(x) = \psi(x) + x\frac{d\psi(x)}{dx},$$

rõ ràng $\hat{B}\hat{A} \neq \hat{A}\hat{B}$, nên \hat{A}, \hat{B} không giao hoán nhau.

Nếu $\hat{A} = x^2, \hat{B} = x$ thì

$$\hat{A}\hat{B}\psi(x) = x^3\psi(x) = \hat{B}\hat{A}\psi(x)$$

hai toán tử \hat{A}, \hat{B} giao hoán nhau.

d) Giao hoán tử của hai toán tử \hat{A} và \hat{B} được định nghĩa là $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Nếu \hat{A} và \hat{B} giao hoán thì $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, do đó giao hoán tử của chúng bằng không, nghĩa là $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Nếu hai toán tử không giao hoán thì $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \neq 0$ hay $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$.

1.1.3 Hàm riêng, trị riêng và phương trình trị riêng của toán tử

Xét một toán tử \hat{A} , khi cho \hat{A} tác dụng lên một hàm $\psi(x)$ nào đó, ta có thể thu được chính hàm đó nhân với một hằng số:

$$\hat{A}\psi(x) = a\psi(x). \quad (1.6)$$

(1.6) là một phương trình, dạng của $\psi(x)$ có thể thu được từ việc giải phương trình trên.

Ta bảo $\psi(x)$ là hàm riêng với trị riêng a của toán tử \hat{A} . Và việc giải phương trình (1.6) có thể cho ta biết các hàm riêng và trị riêng của toán tử \hat{A} . Nếu có s hàm riêng có cùng một trị riêng a , thì ta bảo toán tử \hat{A} có trị riêng suy biến bậc s . Các trị riêng có thể biến thiên gián đoạn hoặc liên tục.

Trong cơ học lượng tử, hàm riêng phải thoả mãn các điều kiện chuẩn sau:

- Hàm $\psi(x)$ phải tồn tại, xác định trên toàn miền biến thiên của các biến độc lập.
- Trong miền tồn tại, hàm $\psi(x)$ và đạo hàm bậc nhất của nó $d\psi(x)/dx$ phải hữu hạn, liên tục (trừ một số điểm đặc biệt).
- Hàm $\psi(x)$ phải xác định đơn trị

1.1.4 Toán tử tự liên hợp tuyến tính (toán tử hermitic)

Toán tử tuyến tính \hat{A}^+ được gọi là toán tử liên hợp tuyến tính với toán tử tuyến tính \hat{A} nếu:

$$\forall \psi_1(x), \psi_2(x), \int_V \psi_1^*(x) \hat{A} \psi_2(x) dx = \int_V \left(\hat{A}^+ \psi_1(x) \right)^* \psi_2(x) dx. \quad (1.7)$$

Nếu $\hat{A}^+ = \hat{A}$ thì ta bảo \hat{A} là toán tử tự liên hợp tuyến tính, hay toán tử hermitic, nghĩa là:

$$\int_V \psi_1^*(x) \hat{A} \psi_2(x) dx = \int_V \left(\hat{A} \psi_1(x) \right)^* \psi_2(x) dx. \quad (1.8)$$

Nếu ta đưa ra ký hiệu mới về tích vô hướng hai hàm sóng

$$\langle \psi_1(x) | \psi_2(x) \rangle = \int_V \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx, \quad (1.9)$$

theo đó (1.8) được viết lại như sau:

$$\langle \psi_1(x) | \hat{A} \psi_2(x) \rangle = \langle \hat{A} \psi_1(x) | \psi_2(x) \rangle.$$

Ví dụ 1: $\hat{A} = (d/dx)$ có phải là toán tử hermitic không?

Muốn biết, ta tính

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{A} \varphi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{d\varphi}{dx} dx.$$

Đặt $u = \psi^*$, $dv = (d\varphi/dx).dx$, thì

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{A} \varphi dx = \psi^* \varphi \Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi \frac{d\psi^*}{dx} dx,$$

vì các hàm $\psi(x), \varphi(x) \rightarrow 0$ khi $x \rightarrow \pm\infty$ nên $\psi^* \varphi \Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty} = 0$,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{A} \varphi dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi \frac{d\psi^*}{dx} dx \neq \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^* dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\hat{A} \psi \right)^* \varphi dx.$$

Vậy $\hat{A} = (d/dx)$ không phải là toán tử hermitic.

Ví dụ 2: $\hat{A} = i(d/dx)$ có phải là toán tử hermitic không?

Ta có:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{A} \varphi dx = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi \frac{d\psi^*}{dx} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi \left(-i \frac{d\psi^*}{dx} \right) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi \left(i \frac{d\psi}{dx} \right)^* dx,$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{A} \varphi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\hat{A} \psi \right)^* \varphi dx.$$

Vậy $\hat{A} = i(d/dx)$ là toán tử hermitic.

1.1.5 Các tính chất của toán tử hermitic

a) Trị riêng của toán tử hermitic là số thực.

Giả thiết toán tử hermitic \hat{A} có trị riêng gián đoạn với phương trình trị riêng

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n.$$

Ta có: $\langle\psi_n|\hat{A}\psi_n\rangle = \langle\hat{A}\psi_n|\psi_n\rangle$ vì \hat{A} hermitic, nghĩa là:

$$a_n\langle\psi_n|\psi_n\rangle = a_n^*\langle\psi_n|\psi_n\rangle \implies (a_n - a_n^*)\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 0.$$

Vì $\langle\psi_n|\psi_n\rangle \neq 0$ nên $a_n = a_n^*$: a_n là số thực.

b) Hàm riêng tương ứng với hai trị riêng phân biệt thì trực giao với nhau.

Thực vậy, theo định nghĩa của toán tử hermitic thì:

$$\langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle = \langle\hat{A}\psi_1|\psi_2\rangle \implies a_2\langle\psi_1|\psi_2\rangle = a_1\langle\psi_1|\psi_2\rangle, \implies (a_2 - a_1)\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0,$$

vì $a_2 \neq a_1$ nên $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$. Vậy:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0 : \quad \psi_1, \psi_2 \text{ trực giao với nhau.}$$

Tóm lại, nếu các hàm riêng của toán tử hermitic \hat{A} được chuẩn hoá thì ta có:

$$\text{Phổ trị riêng gián đoạn :} \quad \langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn}, \quad (1.10)$$

$$\text{Phổ trị riêng liên tục :} \quad \langle\psi_{a'}|\psi_a\rangle = \delta(a' - a). \quad (1.11)$$

Trong đó, $\delta_{mn}, \delta(a' - a)$ là các hàm Dirac.

c) Các hàm riêng của toán tử hermitic lập thành một hệ hàm cơ sở trực giao và đủ trong không gian Hilbert các hàm sóng, nghĩa là với một hàm sóng bất kỳ $\psi(x)$ trong không gian Hilbert, ta có:

$$\text{Đối với phổ trị riêng gián đoạn :} \quad \psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x). \quad (1.12)$$

$$\text{Đối với phổ trị riêng liên tục :} \quad \psi(x) = \int_a c_a \psi_a(x) da. \quad (1.13)$$

1.2 Các tiên đề của cơ học lượng tử

Trong cơ học lượng tử, hạt không được hình dung như là một chất điểm chuyển động theo một quỹ đạo xác định mà nó được hình dung như là một bó sóng định xứ trong một miền của không gian tại một thời điểm và bó sóng thay đổi theo thời gian. Tại một thời điểm ta chỉ có thể nói về xác suất để tìm thấy hạt trong một phần tử thể tích của không gian, hay nói khác đi là xác suất để tọa độ của hạt có giá trị nằm trong khoảng nào đó. Nói chung về các biến số động lực khác cũng vậy, ta chỉ có thể nói về xác suất để một biến số động lực có giá trị nằm trong khoảng nào đó chứ không thể nói về giá trị xác định của biến số động lực tại một thời điểm như trong cơ học cổ điển.

Vì có sự khác biệt nói trên nên trong cơ học lượng tử biến số động lực không phải được mô tả bằng một số như trong cơ học cổ điển. Chúng ta phải tìm một cách mô tả khác thể hiện được những đặc tính của các quy luật lượng tử. Những nghiên cứu về toán tử cho thấy có thể dùng công cụ toán học này để mô tả biến số động lực trong cơ học lượng tử. Chúng ta thừa nhận một số giả thiết về nội dung cách mô tả như những tiên đề. Những tiên đề ấy không có mâu thuẫn nhau và cho các kết quả phù hợp với thực nghiệm.

1.2.1 Tiên đề 1: Trạng thái và thông tin

" *Trạng thái vật lý của một hệ lượng tử thì tương ứng với một hàm sóng chuẩn hoá.*"

Ta ký hiệu $\psi(x, t)$ là hàm sóng của hệ lượng tử ở thời điểm t và tại vị trí tọa độ x (hay ứng với biến động lực x).

Hàm sóng được chuẩn hoá khi

$$\langle \psi(x, t) | \psi(x, t) \rangle = \int_V \psi(x, t)^* \psi(x, t) dx = 1. \quad (1.14)$$

Như vậy, $\psi(x, t)$ và $c\psi(x, t)$ cùng chung một trạng thái nếu $c^*c = |c|^2 = 1$.

1.2.2 Tiên đề 2: Các đại lượng động lực

" *Tương ứng với một đại lượng động lực A trong cơ học lượng tử là một toán tử hermitic \hat{A} .*"

Vì giá trị bằng số của biến động lực là thực nên trị riêng của toán tử tương ứng với biến động lực đó phải thực, do đó toán tử tương ứng với biến động lực phải hermitic. Toán tử \hat{A} hermitic nên có một hệ đủ các vectơ riêng trực giao chuẩn hoá $\{\psi_i(x, t)\}$ tương ứng với phổ các trị riêng thực $\{a_i\}$, $i = 1, 2, \dots, n$. Theo đó, một trạng thái bất kỳ của hệ lượng tử sẽ được khai triển theo các hàm riêng như sau:

$$\psi(x, t) = \sum_{i=1}^n c_i \psi_i(x, t). \quad (1.15)$$

1.2.3 Tiên đề 3: Phép đo các đại lượng động lực

Nếu hệ lượng tử ở trạng thái biểu diễn bởi hàm sóng $\psi(x)$ thì xác suất để khi đo biến động lực A thu được giá trị a_i sẽ là $|c_i|^2 = p_i$. Rõ ràng

$$\sum_{i=1}^n p_i = \sum_{i=1}^n |c_i|^2 = 1 \quad (1.16)$$

được suy từ tính chất trực giao, chuẩn hoá của các hàm riêng.

Như vậy phép đo làm nhiễu loạn trạng thái. Nếu $\psi(x) = \psi_i(x)$, ta có

$$\hat{A}\psi(x) = \hat{A}\psi_i(x) = a_i\psi_i(x) \quad \text{với xác suất} \quad |c_i|^2 = p_i = 1.$$

Chú ý rằng theo tiên đề 3 thì

(i) Không thể tiên đoán chính xác kết quả phép đo một đại lượng động lực của hệ vi mô có trạng thái $\psi(x)$ hoàn toàn xác định.

(ii) Nếu tiến hành hai phép đo riêng biệt nhưng giống nhau trên cùng một hệ có trạng thái ban đầu trước mỗi lần đo là $\psi(x)$ hoàn toàn giống nhau thì kết quả hai lần đo này không nhất thiết phải trùng nhau.

Ta chấp nhận “*tính không tiên đoán được*” và tính “*không đồng nhất*” của quá trình đo như là một thuộc tính vốn có của tự nhiên.

Trong trường hợp phổ trị riêng liên tục thì

$$\psi(x) = \int_a c(a)\psi_a(x)da \quad (1.17)$$

và xác suất $dW(a)$ để đại lượng A có giá trị trong khoảng từ a đến $a + da$ là

$$dW(a) = |c(a)|^2 da. \quad (1.18)$$

1.2.4 Giá trị trung bình của biến số động lực

Xét biến số động lực A có toán tử hermitic tương ứng \hat{A} , trị trung bình \bar{A} của nó ở trạng thái $\psi(x)$ ứng với trường hợp phổ trị riêng gián đoạn $\{a_i\}$

$$\bar{A} = \sum_{i=1}^n p_i a_i = \sum_{i=1}^n a_i |c_i|^2 = \int_V \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx \quad (1.19)$$

vì

$$\begin{aligned} \int_V \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx &= \int_V \sum_i \sum_j c_i^* \psi_i^*(x) \hat{A} c_j \psi_j(x) dx \\ &= \sum_i \sum_j c_i^* c_j \int_V \psi_i^*(x) \hat{A} \psi_j(x) dx \\ &= \sum_i \sum_j c_i^* c_j a_j \int_V \psi_i^*(x) \psi_j(x) dx \\ &= \sum_i \sum_j c_i^* c_j a_j \delta_{ij} \\ &= \sum_i |c_i|^2 a_i. \end{aligned}$$

Trường hợp phổ trị riêng liên tục, ta có

$$\bar{A} = \int_a adW(a) = \int_a |c(a)|^2 a da$$

1.2.5 Tính hệ số phân tích c_i

Theo tiên đề 3, muốn tính xác suất để đo A được giá trị a_i thì ta phải xác định cho được hệ số phân tích c_i . Muốn vậy, ta nhân lượng liên hiệp phức của hàm riêng $\psi_i(x)$ là $\psi_i^*(x)$ với hàm sóng $\psi(x)$ rồi lấy tích phân theo biến số x , ta được

$$\int_V \psi_i^*(x) \psi(x) dx = \sum_k \int_V \psi_i^*(x) c_k \psi_k(x) dx = \sum_k c_k \delta_{ik} = c_i, \quad (1.20)$$

giá trị này của c_i hoàn toàn xác định với sai kém hằng số nhân.

1.3 Sự đo đồng thời hai đại lượng vật lý

1.3.1 Sự đo chính xác đồng thời hai đại lượng vật lý

Xét hai biến số động lực L và M được biểu diễn bởi hai toán tử \hat{L} và \hat{M} . Hệ ở trạng thái được biểu diễn bởi hàm sóng ψ mà ở đây để cho đỡ rườm rà ta hiểu ngầm là hàm theo biến số x . Chúng ta sẽ xét trong điều kiện nào hai biến động lực có thể đo được chính xác đồng thời. Theo tiên đề 3, muốn cho biến động lực L có giá trị xác định thì $\psi = \psi_{L,k}$ là hàm riêng của \hat{L} ứng với trị riêng L_k . Nghĩa là

$$\hat{L}\psi = \hat{L}\psi_{L,k} = L_k\psi_{L,k}.$$

Ta đo đồng thời đại lượng M với L , tức là lúc hệ ở trạng thái $\psi = \psi_{L,k}$. Muốn cho M cũng có giá trị xác định M_k thì ψ phải là hàm riêng của \hat{M} , nghĩa là $\psi = \psi_{M,k}$. Theo đó

$$\hat{M}\psi = \hat{M}\psi_{M,k} = M_k\psi_{M,k}.$$

Như vậy, hai toán tử \hat{L} và \hat{M} phải có chung hàm riêng:

$$\psi = \psi_{L,k} = \psi_{M,k}.$$

Đây chính là điều kiện để đồng thời đo được chính xác hai đại lượng động lực L và M . Và ta có thể rút ra định lý sau:

“Điều kiện ắt có và đủ để hai đại lượng động lực đo được đồng thời là toán tử tương ứng của chúng giao hoán với nhau.”

Chúng ta sẽ chứng minh định lý này sau đây.

a) Điều kiện ắt có: Nếu \hat{L} , \hat{M} có chung hàm riêng ψ_k thì hai toán tử \hat{L} , \hat{M} giao hoán được với nhau.

Ta có

$$\hat{L}\hat{M}\psi_k = \hat{L}(\hat{M}\psi_k) = M_k\hat{L}\psi_k = M_kL_k\psi_k,$$

$$\hat{M}\hat{L}\psi_k = \hat{M}(\hat{L}\psi_k) = L_k\hat{M}\psi_k = L_kM_k\psi_k.$$

Suy ra

$$\hat{L}\hat{M}\psi_k = \hat{M}\hat{L}\psi_k,$$

hay

$$(\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L})\psi_k = 0 \implies \hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = 0 \implies \hat{L}\hat{M} = \hat{M}\hat{L}.$$

Rõ ràng \hat{L} và \hat{M} giao hoán với nhau.

a) Điều kiện đủ: Nếu hai toán tử giao hoán thì chúng có chung hàm riêng.

Gọi φ là hàm riêng của \hat{L} , nghĩa là

$$\hat{L}\varphi = L\varphi,$$

$$(\hat{M}\hat{L})\varphi = \hat{M}(\hat{L}\varphi) = \hat{M}(L\varphi) = L(\hat{M}\varphi).$$

Vì \hat{M} và \hat{L} giao hoán nên

$$(\hat{M}\hat{L})\varphi = (\hat{L}\hat{M})\varphi = L(\hat{M}\varphi).$$

Rõ ràng $\psi \equiv \hat{M}\varphi$ là một hàm riêng của toán tử \hat{L} với trị riêng L . Như vậy, ψ và φ đều là hàm riêng của \hat{L} với cùng trị riêng L . Khi không có suy biến thì chúng trùng nhau, nhưng vì hàm riêng của các toán tử hermitic được xác định sai kém nhau một hằng số nhân nên

$$\psi = \text{hằng số} \cdot \varphi,$$

hay $\hat{M}\varphi = \text{hằng số} \cdot \varphi = M \cdot \varphi$, nghĩa là φ cũng là hàm riêng của toán tử \hat{M} .

1.3.2 Phép đo hai đại lượng động lực không xác định đồng thời. Nguyên lý bất định Heisenberg.

Trong trường hợp tổng quát nếu hai toán tử \hat{L} , \hat{M} theo thứ tự biểu diễn hai đại lượng động lực L , M không giao hoán được với nhau thì không thể đo được chính xác đồng thời L và M . Bây giờ ta xét xem nếu đo đồng thời hai biến động lực ấy thì độ chính xác đạt đến mức nào.

Do \hat{L} và \hat{M} là những toán tử hermitic không giao hoán được với nhau nên

$$[\hat{L}, \hat{M}] = i\hat{P}, \quad (1.21)$$

trong đó \hat{P} là một toán tử hermitic, $\hat{P} \neq 0$.

Gọi \bar{L} và \bar{M} là trị trung bình của L và M ở trạng thái $\psi(x)$. Xét độ lệch

$$\Delta L = L - \bar{L}; \quad \Delta M = M - \bar{M} \quad (1.22)$$

Những đại lượng này theo thứ tự được biểu diễn bởi các toán tử hermitic

$$\widehat{\Delta L} = \hat{L} - \bar{L}; \quad \widehat{\Delta M} = \hat{M} - \bar{M} \quad (1.23)$$

Ta có giao hoán tử

$$\left[\widehat{\Delta L}, \widehat{\Delta M}\right] = \left[\widehat{L} - \overline{L}, \widehat{M} - \overline{M}\right] = \left[\widehat{L}, \widehat{M}\right] = i\widehat{P}. \quad (1.24)$$

Xét tích phân:

$$I(\alpha) = \int_V \left| \left(\alpha \widehat{\Delta L} - i \widehat{\Delta M} \right) \varphi \right|^2 dx \geq 0 \quad (1.25)$$

trong đó α là một thông số thực, tích phân lấy trong toàn bộ miền biến thiên V của x .

$$\begin{aligned} I(\alpha) &= \int_V \left[\left(\alpha \widehat{\Delta L} - i \widehat{\Delta M} \right) \varphi \right]^* \left(\alpha \widehat{\Delta L} - i \widehat{\Delta M} \right) \varphi dx \\ &= \int_V \varphi^* \left(\alpha \widehat{\Delta L} - i \widehat{\Delta M} \right)^+ \left(\alpha \widehat{\Delta L} - i \widehat{\Delta M} \right) \varphi dx \end{aligned}$$

vì tính chất hermitic, $\widehat{\Delta L} = \widehat{\Delta L}^+$, $\widehat{\Delta M} = \widehat{\Delta M}^+$, do đó $\left(\alpha \widehat{\Delta L} - i \widehat{\Delta M} \right)^+ = \alpha \widehat{\Delta L} + i \widehat{\Delta M}$, nên

$$\begin{aligned} I(\alpha) &= \int_V \varphi^* \left(\alpha \widehat{\Delta L} + i \widehat{\Delta M} \right) \left(\alpha \widehat{\Delta L} - i \widehat{\Delta M} \right) \varphi dx \\ I(\alpha) &= \int_V \varphi^* \left[\alpha^2 \widehat{\Delta L}^2 - i\alpha \left(\widehat{\Delta L} \widehat{\Delta M} - \widehat{\Delta M} \widehat{\Delta L} \right) + \widehat{\Delta M}^2 \right] \varphi dx \\ I(\alpha) &= \int_V \varphi^* \left(\alpha^2 \widehat{\Delta L}^2 - i\alpha \left[\widehat{\Delta L}, \widehat{\Delta M} \right] + \widehat{\Delta M}^2 \right) \varphi dx \end{aligned}$$

theo (1.24), thì

$$I(\alpha) = \int_V \varphi^* \left(\alpha^2 \widehat{\Delta L}^2 + \alpha \widehat{P} + \widehat{\Delta M}^2 \right) \varphi dx, \quad \text{suy ra}$$

$$I(\alpha) = \alpha^2 \overline{\Delta L^2} + \alpha \overline{P} + \overline{\Delta M^2} \geq 0.$$

Muốn cho $I(\alpha) \geq 0$ thì tam thức bậc hai theo α trên phải có biệt thức

$$\Delta = \overline{P}^2 - 4 \left(\overline{\Delta L^2} \right) \left(\overline{\Delta M^2} \right) \leq 0, \quad \text{nghĩa là}$$

$$\left(\overline{\Delta L^2} \right) \left(\overline{\Delta M^2} \right) \geq \frac{\overline{P}^2}{4} \quad \text{hay} \quad \left(\overline{\Delta L^2} \right) \left(\overline{\Delta M^2} \right) \geq \frac{\left[\left[\widehat{L}, \widehat{M} \right] \right]^2}{4}. \quad (1.26)$$

Đây là công thức cho độ bất định khi đo đồng thời hai biến động lực L và M , nó được gọi là hệ thức bất định Heisenberg. Đặt

$$\overline{\Delta L} = \sqrt{\overline{\Delta L^2}}, \overline{\Delta M} = \sqrt{\overline{\Delta M^2}}, \quad (1.27)$$

hệ thức bất định có thể viết dưới dạng khác

$$\overline{\Delta L} \cdot \overline{\Delta M} \geq \frac{|\overline{P}|}{2} \quad \text{hay} \quad , \overline{\Delta L} \cdot \overline{\Delta M} \geq \frac{|\overline{[\hat{L}, \hat{M}]}}{2}. \quad (1.28)$$

Ví dụ: Nếu chọn $\hat{L} = \hat{x} = x$: toán tử toạ độ,

$$\hat{M} = \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} : \quad \text{toán tử xung lượng theo phương } x.$$

thì

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar,$$

suy ra hệ thức bất định Heisenberg cho toạ độ và xung lượng

$$\overline{\Delta x} \cdot \overline{\Delta p_x} \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (1.29)$$

Như vậy ta không thể đồng thời đo chính xác toạ độ và xung lượng của một hạt vi mô. Sai số mắc phải khi đo tuân theo hệ thức bất định Heisenberg (1.29).

Ý nghĩa vật lý: Việc không đo được chính xác đồng thời toạ độ và xung lượng của hạt vi mô chứng tỏ rằng nó lưỡng tính sóng hạt. Hạt vi mô không có quỹ đạo xác định. Đó là một thực tế khách quan do bản chất của sự vật chứ không phải vì khả năng hiểu biết sự vật của ta bị hạn chế hoặc máy đo kém chính xác. Và hệ thức bất định là biểu thức toán học của lưỡng tính sóng hạt của hạt vi mô.

1.4 Phương trình Schrödinger

1.4.1 Phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian

Trong cơ học lượng tử, do lưỡng tính sóng hạt của các đối tượng vi mô nên trạng thái của hạt được đặc trưng bởi hàm sóng $\psi(\vec{r}, t)$. Vì vậy, cần có phương trình mô tả diễn biến của hàm trạng thái theo thời gian. Phương

trình này được Schrödinger đưa ra năm 1926 và được gọi là phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t), \quad (1.30)$$

trong đó \hat{H} là Hamiltonian của hệ

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}, t) \quad (1.31)$$

Đây là phương trình vi phân hạng hai theo không gian và hạng nhất theo thời gian. Về nguyên tắc để tìm nghiệm của phương trình, ta phải biết được hàm sóng tại thời điểm t_0 (điều kiện đầu) và biết được hai điều kiện biên liên quan đến tọa độ $\left(\psi(x_0, t_0) = \psi_0, \quad \text{và} \quad \frac{d\psi(x, t)}{dx} \Big|_{x=x_0} = \psi'_0 \right)$.

1.4.2 Mật độ dòng xác suất. Sự bảo toàn số hạt

Để đơn giản, ta sẽ viết tắt ψ, ψ^* theo thứ tự thay cho $\psi(\vec{r}, t), \psi^*(\vec{r}, t)$. Từ phương trình (1.30), ta suy ra phương trình liên hiệp phức của nó

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \hat{H} \psi^* \quad \left(\hat{H} = \hat{H}^+ \right). \quad (1.32)$$

Nhân ψ^* cho hai vế của (1.30) về phía trái và nhân ψ cho hai vế của (1.32) cũng về phía trái rồi trừ cho nhau vế theo vế, ta được

$$i\hbar \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right] = \psi^* \hat{H} \psi - \psi \hat{H} \psi^*. \quad (1.33)$$

Thay $\hat{H} = -(\hbar^2/2m) \nabla^2 + \hat{U}$ và lưu ý $(\partial/\partial t)(\psi^* \psi) = \psi^*(\partial\psi/\partial t) + \psi(\partial\psi^*/\partial t)$, ta có

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi \psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*), \quad (1.34)$$

mà

$$\nabla (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \nabla \psi^* \nabla \psi + \psi^* \nabla^2 \psi - \nabla \psi \nabla \psi^* - \psi \nabla^2 \psi^*,$$

nên ta có thể viết lại (1.34) như sau

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi \psi^*) + \frac{i\hbar}{2m} \nabla (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) = 0. \quad (1.35)$$

Đặt

$$\rho \equiv \psi^* \psi = |\psi|^2 \quad (1.36)$$

là mật độ xác suất tìm thấy hạt ở toạ độ \vec{r} tại thời điểm t . Và

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \quad (1.37)$$

là vectơ mật độ dòng xác suất. Độ lớn của $\vec{j}(\vec{r}, t)$ có ý nghĩa như là dòng hạt trung bình qua một đơn vị diện tích đặt vuông góc với phương chuyển động trong một đơn vị thời gian.

Theo đó phương trình (1.35) có dạng của phương trình liên tục mô tả định luật bảo toàn số hạt vi mô:

$$\nabla \cdot \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (1.38)$$

1.4.3 Phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian. Trạng thái dừng.

Ta xét một hạt vi mô chuyển động trong trường thế $\hat{U}(\vec{r})$ không biến thiên theo thời gian và do đó có năng lượng không thay đổi theo thời gian. Gọi E là giá trị năng lượng của hạt và ta ký hiệu $\psi_E(\vec{r})$ là hàm sóng ứng với trạng thái có năng lượng E . Ta có thể viết phương trình trị riêng của năng lượng như sau

$$\hat{H}\psi_E(\vec{r}) = E\psi_E(\vec{r}) \quad (1.39)$$

với $\hat{H} = (-\hbar^2/2m)\nabla^2 + \hat{U}(\vec{r})$ nên ta có thể viết (1.39) dưới dạng khác:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{U}(\vec{r}) \right) \psi_E(\vec{r}) = E\psi_E(\vec{r}) \quad (1.40)$$

Trong trường hợp này hàm sóng $\psi_E(\vec{r}, t) = \psi_E(\vec{r}) \cdot f(t)$ được viết dưới dạng phân ly biến số. Theo đó, phương trình Schrödinger (1.30), với lưu ý \hat{H} không phụ thuộc tường minh vào thời gian t , được viết lại

$$\psi_E(\vec{r}) i\hbar \frac{\partial f}{\partial t} = f(t) \hat{H} \psi_E(\vec{r}) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{i\hbar \frac{\partial f}{\partial t}}{f(t)} = \frac{\hat{H} \psi_E(\vec{r})}{\psi_E(\vec{r})} = E,$$

Như vậy, ta có hai phương trình độc lập

$$i\hbar \frac{\partial f}{\partial t} = E \cdot f(t), \quad (1.41)$$

$$\hat{H} \psi_E(\vec{r}) = E \cdot \psi_E(\vec{r}). \quad (1.42)$$

Phương trình (1.41) cho ta nghiệm

$$f(t) = Ce^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \quad (1.43)$$

Còn (1.42) chính là phương trình cho ta hàm riêng và trị riêng của toán tử năng lượng. Giả sử năng lượng của hệ có giá trị gián đoạn $E_n, n = 0, 1, 2, \dots$, lúc đó ta viết lại (1.42) như sau

$$\hat{H}\psi_n(\vec{r}) = E_n \cdot \psi_n(\vec{r}). \quad (1.44)$$

trong đó $\psi_n(\vec{r})$ là viết tắt của $\psi_{E_n}(\vec{r})$. Như vậy, nghiệm riêng đầy đủ của hạt vi mô ứng với trạng thái dừng có năng lượng hoàn toàn xác định E_n là

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}. \quad (1.45)$$

Nghiệm tổng quát của phương trình Schrödinger ở trạng thái dừng trong trường hợp phổ gián đoạn

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \psi_n(\vec{r}) = \sum_n C_n(t) \psi_n(\vec{r}), \quad \text{với} \quad C_n(t) \equiv c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}. \quad (1.46)$$

Trường hợp phổ trị riêng liên tục, hàm sóng có dạng

$$\psi(\vec{r}, t) = \int c_E e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi_E(\vec{r}) dE = \int C_E(t) \psi_E(\vec{r}) dE, \quad \text{với} \quad C_E(t) \equiv c_E e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \quad (1.47)$$

Các hệ số c_n, c_E có thể được xác định từ điều kiện đầu.

Nói tóm lại, một hệ lượng tử ở trạng thái dừng có các tính chất sau:

a) Hàm sóng phụ thuộc thời gian của trạng thái dừng xác định đơn trị bởi giá trị năng lượng của trạng thái đó.

b) Ở trạng thái dừng, mật độ xác suất và mật độ dòng xác suất không phụ thuộc vào thời gian.

c) Ở trạng thái dừng, trị trung bình của một đại lượng động lực có toán tử tương ứng không phụ thuộc rõ rệt vào thời gian thì không đổi theo thời gian.

d) Xác suất đo giá trị của một đại lượng động lực ở trạng thái dừng không phụ thuộc thời gian.

Nghiệm của phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian có các tính chất cơ bản sau:

a) Hàm $\psi(\vec{r}, t)$ phải đơn trị.

b) Hàm $\psi(\vec{r}, t)$ phải liên tục. Trong trường hợp thế năng $U(\vec{r})$ gián đoạn thì hàm sóng $\psi(\vec{r}, t)$ và đạo hàm của nó vẫn liên tục tại những điểm gián đoạn đó. Tuy nhiên, ở những miền mà thế năng $U \rightarrow \infty$ thì hàm sóng và đạo hàm của nó gián đoạn.

c) Nếu thế năng U không tiến đến vô cùng thì hàm sóng $\psi(\vec{r})$ phải hữu hạn trong toàn bộ không gian. Điều này cũng được thoả mãn trong trường hợp $U \rightarrow \infty$ tại một điểm nào đó nhưng không quá nhanh ($U \sim \frac{1}{r^s}, s \leq 2$).

1.5 Sự biến đổi theo thời gian của các đại lượng động lực

1.5.1 Đạo hàm của toán tử động lực theo thời gian

Ta có trị trung bình của một đại lượng động lực L ở trạng thái $\psi(x)$

$$\bar{L} = \int \psi^*(x) \hat{L} \psi(x) dx, \quad (1.48)$$

trong đó x bao gồm tất cả các biến số khả dĩ và $\psi(x)$ đã được chuẩn hoá. Toán tử \hat{L} có thể phụ thuộc thời gian nên \bar{L} cũng có thể phụ thuộc thời gian. Ta tính đạo hàm của trị trung bình \bar{L} theo thời gian

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \int \psi^*(x) \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \psi(x) dx + \int \frac{\partial \psi^*(x)}{\partial t} \hat{L} \psi(x) dx + \int \psi^*(x) \hat{L} \frac{\partial \psi(x)}{\partial t} dx. \quad (1.49)$$

Lưu ý rằng, theo phương trình Schrödinger (1.30), ta có

$$\frac{\partial \psi(x)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi(x) \quad \text{và} \quad \frac{\partial \psi^*(x)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi^*(x), \quad (1.50)$$

do đó phương trình (1.49) có thể viết lại

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

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \int \psi^*(x) \left\{ \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}] \right\} \psi(x) dx. \quad (1.51)$$

Ta định nghĩa đạo hàm toán tử \hat{L} theo thời gian $d\hat{L}/dt$ là toán tử được xác định sao cho

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \overline{\left(\frac{dL}{dt} \right)} = \int \psi^*(x) \left(\frac{d\hat{L}}{dt} \right) \psi(x) dx. \quad (1.52)$$

Đổi chiếu (1.52) với (1.51), ta thu được công thức của đạo hàm toán tử theo thời gian, được gọi là phương trình Heisenberg:

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}]. \quad (1.53)$$

Trong cơ học cổ điển, tích phân chuyển động là một đại lượng không thay đổi trong quá trình chuyển động. Trong cơ học lượng tử cũng có tích phân chuyển động, đó là khi $(d\hat{L}/dt) = 0$, đại lượng L không thay đổi theo thời gian và là tích phân chuyển động. Dựa vào phương trình Heisenberg (1.53), nếu L là tích phân chuyển động thì

$$\frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}] = 0. \quad (1.54)$$

Trường hợp đặc biệt đáng chú ý: khi \hat{L} không phụ thuộc tường minh vào thời gian, ta có $(\partial \hat{L} / \partial t) = 0$, phương trình (1.54) trở thành

$$[\hat{H}, \hat{L}] = 0, \quad (1.55)$$

nghĩa là khi toán tử \hat{L} không phụ thuộc rõ rệt vào thời gian và giao hoán với toán tử năng lượng \hat{H} thì đại lượng động lực L tương ứng là tích phân chuyển động.

Theo (1.52), nếu L là tích phân chuyển động thì $(d\bar{L}/dt) = 0$ hay $\bar{L} = const.$: trị trung bình của tích phân chuyển động không phụ thuộc thời gian.

Ta có thể chứng minh xác suất $p(L_n, t)$ để tích phân chuyển động L có giá trị bằng L_n không phụ thuộc vào thời gian. Thực vậy, \hat{L}, \hat{H} giao hoán với nhau nên chúng có hàm riêng chung $\psi_n(x)$

$$\hat{L}\psi_n(x) = L_n\psi_n(x) \quad \text{và} \quad \hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x),$$

$$\psi(x, t) = \sum_n C_n(t) \psi_n(x), \quad \text{trong đó} \quad C_n(t) = c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} = C_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}.$$

Theo tiên đề 3 của cơ học lượng tử

$$p(L_n, t) = |C_n(t)|^2 = |C_n(0)|^2 = \text{const.}$$

Đây là điều phải chứng minh.

Chương 2

Một số phương pháp gần đúng trong cơ học lượng tử

Bài toán trong cơ học lượng tử là giải phương trình Schrödinger

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad \Leftrightarrow \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}, t) \right) \psi = E\psi$$

để tìm nghiệm E và ψ . Nghiệm chính xác của phương trình chỉ có thể tìm được trong một số tương đối nhỏ các trường hợp đơn giản nhất. Sự phức tạp của việc giải phương trình phụ thuộc vào dạng của thế năng và số chiều không gian trong bài toán cần giải. Phần lớn các bài toán của cơ học lượng tử dẫn tới những phương trình rất phức tạp về dạng toán học, và không thể giải được chính xác. Do đó phải ứng dụng những phương pháp gần đúng để giải bài toán, nghĩa là phải tìm một cách giải gần đúng các hàm riêng và trị riêng của nó. Gần đây, do có xuất hiện máy tính điện tử nên các phương pháp giải gần đúng bằng số các bài toán cơ học lượng tử có tầm rất quan trọng.

Trong chương này, chúng ta sẽ khảo sát một phương pháp gần đúng thường được dùng trong cơ học lượng tử, đó là lý thuyết nhiễu loạn. Thuật ngữ “*nhiễu loạn*” được vay mượn trong thiên văn học để chỉ ảnh hưởng của một hành tinh này lên quỹ đạo của một hành tinh khác. Nội dung của phương pháp nhiễu loạn lần lượt được khảo sát như sau.

Giả sử Hamiltonian của hệ vi mô đang xét có dạng

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (2.1)$$

trong đó \hat{V} là toán tử hiệu chỉnh nhỏ (toán tử nhiễu loạn) cho toán tử “*không nhiễu loạn*” \hat{H}_0 . Điều kiện để coi \hat{V} là “*nhỏ*” so với \hat{H}_0 sẽ nói sau. Để xác định, ta xét trường hợp phổ gián đoạn. Giả thiết bài toán tìm hàm riêng $\psi_n^{(0)}$,

trị riêng $E_n^{(0)}$ của toán tử không nhiễu loạn \hat{H}_0 từ phương trình

$$\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)} \quad (2.2)$$

đã được giải chính xác. Bây giờ cần phải tìm nghiệm gần đúng của phương trình

$$\hat{H} \psi = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \psi = E \psi, \quad (2.3)$$

nghĩa là phải tìm các biểu thức gần đúng cho các hàm riêng ψ_n và các trị riêng E_n của toán tử \hat{H} .

2.1 Nhiễu loạn dừng trong trường hợp không suy biến

Trong tiết này, giả thiết tất cả các trị riêng của \hat{H} là không suy biến, chúng ta tìm nghiệm của (2.3) dưới dạng khai triển theo các hàm riêng trực giao chuẩn hoá của toán tử \hat{H}_0

$$\psi = \sum_k C_k \psi_k^{(0)}. \quad (2.4)$$

Thay (2.4) vào (2.3), có xét đến (2.2), ta thu được

$$\sum_k C_k \left(E_k^{(0)} + \hat{V} \right) \psi_k^{(0)} = \sum_k C_k E \psi_k^{(0)}.$$

Nhân hai vế của đẳng thức mới tìm được với $\psi_m^{(0)*}$ và lấy tích phân theo toàn miền của các biến độc lập, đồng thời xét đến tính trực giao chuẩn hoá của các hàm $\psi_k^{(0)}$, thì ta được

$$C_m \left(E - E_m^{(0)} \right) = \sum_k V_{mk} C_k, \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (2.5)$$

trong đó

$$V_{mk} = \int_V \psi_m^{(0)*}(x) \hat{V} \psi_k^{(0)}(x) dx \quad (2.6)$$

là phần tử ma trận của toán tử nhiễu loạn được tính theo các hàm sóng của bài toán không nhiễu loạn. Hệ phương trình (2.5) hoàn toàn tương đương với phương trình (2.3). Nó chính là phương trình Schrödinger trong biểu diễn năng lượng. Bây giờ, ta sử dụng giả thiết coi toán tử \hat{V} là nhỏ theo nghĩa là các mức năng lượng và hàm sóng trong bài toán nhiễu loạn sẽ gần với các giá

trị tương ứng của bài toán không nhiễu loạn. Vì thế, ta sẽ tìm chúng dưới dạng chuỗi với tham số bé $\epsilon \ll 1$.

$$E_n = E_n^{(0)} + \epsilon E_n^{(1)} + \epsilon^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (2.7)$$

$$C_m = C_m^{(0)} + \epsilon C_m^{(1)} + \epsilon^2 C_m^{(2)} + \dots \quad (2.8)$$

$$\text{và } V_{mn} = \epsilon v_{mn}, \quad \hat{V} = \epsilon \hat{v} \quad (2.9)$$

Chúng ta tìm hiệu chỉnh cho mức năng lượng thứ n và hàm sóng tương ứng của bài toán nhiễu loạn. Ta xét gần đúng cấp không, tức là không nhiễu loạn ($\hat{V} = 0$), ta có $\hat{H} = \hat{H}_0$ và $\epsilon = 0$, hàm sóng $\psi_n = \psi_n^{(0)}$, nghĩa là

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} = \sum_k C_k^{(0)} \psi_k^{(0)} = \psi_n^{(0)} \implies C_k^{(0)} = \delta_{kn} \quad (2.10)$$

$$\text{và } E = E_n = E_n^{(0)}, \quad \text{do đó } E_n = E_n^{(0)} + \epsilon E_n^{(1)} + \epsilon^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (2.11)$$

Thay (2.10) và (2.11) vào (2.5) với lưu ý $E = E_n$, ta có

$$\begin{aligned} (\delta_{mn} + \epsilon C_m^{(1)} + \epsilon^2 C_m^{(2)} + \dots) (E_n^{(0)} - E_m^{(0)} + \epsilon E_n^{(1)} + \epsilon^2 E_n^{(2)} + \dots) = \\ \sum_k \epsilon v_{mk} (\delta_{kn} + \epsilon C_k^{(1)} + \epsilon^2 C_k^{(2)} + \dots), \end{aligned} \quad (2.12)$$

Hay

$$\begin{aligned} \delta_{mn} (E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) + \epsilon \left[\delta_{mn} E_n^{(1)} + C_m^{(1)} (E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) - v_{mn} \right] \\ + \epsilon^2 \left[\delta_{mn} E_n^{(2)} + C_m^{(1)} E_n^{(1)} + C_m^{(2)} (E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) - \sum_k v_{mk} C_k^{(1)} \right] + \dots = 0. \end{aligned}$$

Suy ra, ta có các phương trình

$$\delta_{mn} E_n^{(1)} + C_m^{(1)} (E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) - v_{mn} = 0, \quad (2.13)$$

$$\delta_{mn} E_n^{(2)} + C_m^{(1)} E_n^{(1)} + C_m^{(2)} (E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) - \sum_k v_{mk} C_k^{(1)} = 0. \quad (2.14)$$

Phương trình (2.13) cho

$$\text{Khi } m = n, \quad \text{ta thu được } E_n^{(1)} = v_{nn}, \quad (2.15)$$

$$\text{Khi } m \neq n, \quad \text{ta thu được } C_m^{(1)} = \frac{v_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (2.16)$$

Phương trình (2.14) cho ta khi $m = n$

$$E_n^{(2)} = C_n^{(1)} \left(v_{nn} - E_n^{(1)} \right) + \sum_{k \neq n} v_{nk} C_k^{(1)} = \sum_{k \neq n} v_{nk} C_k^{(1)} \quad \text{vì theo (2.15) } v_{nn} = E_n^{(1)}.$$

Vận dụng (2.15) và (2.16), ta suy ra

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{v_{nk} v_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} = \sum_{k \neq n} \frac{|v_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \quad (2.17)$$

Còn khi $m \neq n$, (2.14) cho

$$C_m^{(2)} \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right) = -C_m^{(1)} E_n^{(1)} + \sum_k v_{mk} C_k^{(1)}.$$

Lưu ý (2.15) và (2.16), ta thu được

$$C_m^{(2)} = -\frac{v_{nn} v_{mn}}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)^2} + \frac{C_n^{(1)} v_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \sum_{k \neq n} \frac{v_{mk} v_{kn}}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right) \left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right)}.$$

Bây giờ ta tìm giá trị của $C_n^{(1)}$ và $C_n^{(2)}$. Chúng có thể thu được từ điều kiện chuẩn hoá có xét đến (2.4)

$$\int_V \psi^*(x) \psi(x) dx = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \sum_k |C_k|^2 = 1. \quad (2.18)$$

Thay khai triển (2.7) và (2.8) vào (2.18), ta thu được

$$\begin{aligned} \sum_k |\delta_{kn} + \epsilon C_k^{(1)} + \epsilon^2 C_k^{(2)}|^2 &= 1. \\ \sum_k \left(\delta_{kn} + \epsilon C_k^{(1)*} + \epsilon^2 C_k^{(2)*} \right) \left(\delta_{kn} + \epsilon C_k^{(1)} + \epsilon^2 C_k^{(2)} \right) &= 1. \\ \sum_k \left\{ \delta_{kn} + \epsilon \delta_{kn} \left(C_k^{(1)*} + C_k^{(1)} \right) + \epsilon^2 \left[\delta_{kn} \left(C_k^{(2)*} + C_k^{(2)} \right) + |C_k^{(1)}|^2 \right] \right\} &= 1. \end{aligned}$$

Cân bằng các đại lượng cùng cấp độ bé ở vế trái và vế phải sẽ rút ra được

$$C_n^{(1)*} + C_n^{(1)} = 0 \quad \text{và} \quad C_n^{(2)*} + C_n^{(2)} + \sum_k |C_k^{(1)}|^2 = 0. \quad (2.19)$$

Từ các hệ thức (2.19), suy ra các phần tử ảo của các hệ số khai triển $C_n^{(1)}, C_n^{(2)}$ là các đại lượng tùy ý. Do đó, không hạn chế tính tổng quát, ta có thể chọn chúng là thực và có giá trị

$$C_n^{(1)} = 0 \quad \text{và} \quad C_n^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_k |C_k^{(1)}|^2 = -\frac{1}{2} \sum_{k \neq n} \frac{|v_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2}. \quad (2.20)$$

Theo đó giá trị của $C_m^{(2)}$ trở thành

$$C_m^{(2)} = -\frac{v_{nn}v_{mn}}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2} + \sum_{k \neq n} \frac{v_{mk}v_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})}. \quad (2.21)$$

Như vậy năng lượng của hệ nhiễu loạn được viết đến mức độ chính xác cấp hai là

$$E_n = E_n^{(0)} + \epsilon v_{nn} + \epsilon^2 \sum_{k \neq n} \frac{|v_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \quad (2.22)$$

dựa vào (2.9), ta có

$$E_n = E_n^{(0)} + V_{nn} + \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \quad (2.23)$$

Còn hàm sóng nếu viết đến mức độ chính xác cấp một sẽ là

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_{k \neq n} \frac{\epsilon v_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_k^{(0)} = \psi_n^{(0)} + \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_k^{(0)}. \quad (2.24)$$

Biểu thức (2.24) cho thấy rằng số hạng hiệu chỉnh cấp một thật sự bé nếu $(|V_{kn}|/|E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|) \ll 1$, nghĩa là điều kiện về “toán tử \hat{V} nhỏ” là

$$|V_{kn}| \ll |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|, \quad n \neq k. \quad (2.25)$$

2.2 Lý thuyết nhiễu loạn dừng trong trường hợp có suy biến

2.2.1 Lý thuyết nhiễu loạn khi có hai mức gần nhau

Từ các công thức (2.23) và (2.24), ta thấy rằng nếu trong số các trị riêng $E_n^{(0)}$ của \hat{H}_0 có hai mức năng lượng gần bằng nhau thì các hiệu chỉnh

cho hàm sóng và các mức năng lượng $E_n^{(0)}$ sẽ lớn và ta không dùng được các công thức đó. Tuy nhiên, nếu số các trị riêng gần nhau lân cận mức n của \hat{H}_0 không nhiều thì có thể thay đổi phương pháp tính sao cho cả trong trường hợp này vẫn có thể khử được sự xuất hiện các số hiệu chỉnh lớn. Chúng ta chỉ xét trong trường hợp đơn giản là có hai mức năng lượng gần nhau.

Giả sử \hat{H}_0 có hai trị riêng $E_1^{(0)}$ và $E_2^{(0)}$ gần nhau, tương ứng với các hàm riêng $\psi_1^{(0)}$ và $\psi_2^{(0)}$, còn tất cả các trị riêng khác ở xa chúng. Trong phép tính gần đúng cấp không, ta tìm nghiệm dưới dạng

$$\psi^{(0)} = a\psi_1^{(0)} + b\psi_2^{(0)} \quad (2.26)$$

Thay giá trị này của $\psi^{(0)}$ vào trong phương trình

$$\hat{H}\psi^{(0)} = E\psi^{(0)}, \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

chúng ta thu được

$$a\hat{H}\psi_1^{(0)} + b\hat{H}\psi_2^{(0)} = E(a\psi_1^{(0)} + b\psi_2^{(0)}). \quad (2.27)$$

Nhân (2.27) với $\psi_1^{(0)*}$ và lấy tích phân, ta được

$$aH_{11} + bH_{12} = aE; \quad H_{11} = \int_V \psi_1^{(0)*} \hat{H}\psi_1^{(0)} dx, \quad H_{12} = \int_V \psi_1^{(0)*} \hat{H}\psi_2^{(0)} dx \quad (2.28)$$

Tương tự với $\psi_2^{(0)*}$, ta được

$$aH_{21} + bH_{22} = bE; \quad H_{21} = \int_V \psi_2^{(0)*} \hat{H}\psi_1^{(0)} dx, \quad H_{22} = \int_V \psi_2^{(0)*} \hat{H}\psi_2^{(0)} dx. \quad (2.29)$$

Ta có:

$$H_{mn} = \int_V \psi_m^{(0)*} \hat{H}\psi_n^{(0)} dx = E_n^{(0)} \delta_{mn} + V_{mn}. \quad (2.30)$$

Hai phương trình (2.28) và (2.29) được biến đổi thành

$$\begin{cases} (H_{11} - E)a + H_{12}b = 0 \\ H_{21}a + (H_{22} - E)b = 0 \end{cases} \quad (2.31)$$

Để cho hệ phương trình có nghiệm không tầm thường ($a \neq 0, b \neq 0$), thì định thức của nó phải bằng không, nghĩa là

$$E^2 - (H_{11} + H_{22})E + H_{11}H_{22} - H_{12}H_{21} = 0. \quad (2.32)$$

Giải phương trình ta thu được các nghiệm

$$\begin{cases} E_1 = \frac{1}{2} \left[H_{11} + H_{22} + \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4|H_{12}|^2} \right] \\ E_2 = \frac{1}{2} \left[H_{11} + H_{22} - \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4|H_{12}|^2} \right], \end{cases} \quad (2.33)$$

trong đó ta lưu ý $H_{12} = H_{21}^*$ do \hat{H} là toán tử hermitic.

Ta xét hai biểu thức của (2.33) trong hai trường hợp giới hạn

1. Nếu $H_{11} - H_{22} \gg |H_{12}|$, thì theo (2.30) có nghĩa là

$$\left| \left(E_1^{(0)} + V_{11} \right) - \left(E_2^{(0)} + V_{22} \right) \right| \approx \left| E_1^{(0)} - E_2^{(0)} \right| \gg |V_{12}|.$$

Như vậy, điều kiện (2.25) được thoả mãn và lý thuyết nhiễu loạn trong tiết trước có thể ứng dụng được. Nếu trong phép gần đúng ta có thể bỏ qua $4|H_{12}|^2$ trong số hạng dưới căn số bậc hai ở (2.33), thì ta sẽ có giá trị gần đúng cấp một trong phép nhiễu loạn thông thường:

$$E_1 = H_{11} = E_1^{(0)} + V_{11}; \quad E_2 = H_{22} = E_2^{(0)} + V_{22}.$$

Trong phép gần đúng chính xác hơn, nghĩa là $\sqrt{1 + \epsilon} \approx 1 + \epsilon/2$, ta thu được

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{1}{2} \left[H_{11} + H_{22} + H_{11} - H_{22} + \frac{2|H_{12}|^2}{H_{11} - H_{22}} \right], \\ E_1 &= H_{11} + \frac{|H_{12}|^2}{H_{11} - H_{22}} = E_1^{(0)} + V_{11} + \frac{|V_{12}|^2}{E_1^{(1)} - E_2^{(1)}}. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Tương tự, ta có

$$E_2 = E_2^{(0)} + V_{22} - \frac{|V_{21}|^2}{E_1^{(1)} - E_2^{(1)}}, \quad (2.35)$$

trong đó $E_i^{(1)} = E_i^{(0)} + V_{ii}$, $i = 1, 2$.

2. Nếu $H_{11} - H_{22} \ll |H_{12}|$, trong trường hợp này, với độ chính xác đến các số hạng có độ bé cấp một

$$E_{1,2} = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \left\{ |H_{12}| + \frac{(H_{11} - H_{22})^2}{8|H_{12}|} \right\}. \quad (2.36)$$

Chúng ta nghiên cứu xem hiệu các giá trị năng lượng xác định bởi các công thức (2.33) và hiệu $H_{11} - H_{22}$ có quan hệ với nhau như thế nào. Muốn vậy, đặt:

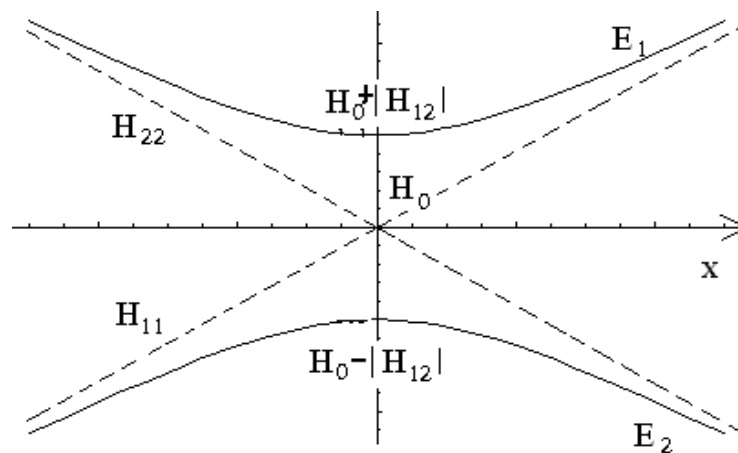
$$H_{11} = H_0 + \gamma x; \quad H_{22} = H_0 - \gamma x \quad (2.37)$$

Trong đó γ là một hệ số không đổi, x là biến độc lập. Theo đó:

$$H_{11} - H_{22} = 2\gamma x \quad \text{và} \quad H_{11} + H_{22} = 2H_0.$$

Tiến hành những phép thay thế tương ứng trong (2.33), kết quả thu được như sau:

$$\begin{cases} E_1 = H_0 + \sqrt{\gamma^2 x^2 + |H_{12}|^2} \\ E_2 = H_0 - \sqrt{\gamma^2 x^2 + |H_{12}|^2} \end{cases} \quad (2.38)$$



Hình 2.1

Trên hình vẽ 2.1 có biểu diễn các đồ thị của các hàm trong (2.38) (đường liền nét) và các hàm (2.37) (đường chấm chấm) ứng với một giá trị cố định nào đó của $|H_{12}|$. Hiệu các tung độ của các đường liền nét và các đường chấm chấm gần nhất cho ta hiệu chính cấp hai của các giá trị năng lượng. Để ý rằng, hiệu chính cấp hai bao giờ cũng làm tăng khoảng cách giữa các mức. Vì thế đôi khi người ta gọi là “*sự đẩy của các mức*”, được hiểu là làm tăng khoảng cách giữa các mức gần nhau, xuất hiện do có xét đến các số hạng bị bỏ qua trong Hamiltonian ở bài toán đã đơn giản hoá hơn. Trong hình 2.1, ta nhận thấy rằng ngay cả khi hiệu $H_{11} - H_{22} = 0$ thì

$$E_1 - E_2 = 2|H_{12}| = 2|V_{12}|.$$

Bây giờ ta tìm hàm sóng ψ tương ứng với các năng lượng E_1 và E_2 . Muốn vậy, cần xác định các hệ số a và b trong công thức (2.26). Từ (2.31), ta có

$$\frac{a}{b} = \frac{H_{12}}{E - H_{11}}$$

Thế các giá trị của E bằng E_1 và E_2 được xác định ở các biểu thức (2.33)

$$\left(\frac{a}{b}\right)_{1,2} = \frac{2H_{12}}{(H_{11} - H_{22}) \left\{ -1 \pm \sqrt{1 + \left[\frac{2H_{12}}{H_{11} - H_{22}} \right]^2} \right\}}, \quad (2.39)$$

các chỉ số 1 và 2 theo thứ tự ứng với dấu + và - đứng trước dấu căn. Đặt

$$\operatorname{tg}2\alpha = \frac{2H_{12}}{H_{11} - H_{22}}, \quad (2.40)$$

công thức (2.39) có dạng mới

$$\left(\frac{a}{b}\right)_{1,2} = \frac{\operatorname{tg}2\alpha}{-1 \pm \sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 2\alpha}}.$$

Từ đó rút ra

$$\left(\frac{a}{b}\right)_1 = \cot\alpha, \quad \left(\frac{a}{b}\right)_2 = -\operatorname{tg}\alpha. \quad (2.41)$$

Hệ thức chuẩn hoá cho hàm sóng ở (2.26) yêu cầu

$$a^2 + b^2 = 1, \quad (2.42)$$

hai phương trình (2.41) và (2.42) cho ta rút ra

$$a_1 = \cos\alpha, \quad b_1 = \sin\alpha; \quad a_2 = -\sin\alpha, \quad b_2 = \cos\alpha. \quad (2.43)$$

Thay các kết quả này vào công thức (2.26), ta thu được các hàm sóng chuẩn hoá tương ứng với các giá trị năng lượng E_1 và E_2 :

$$\begin{cases} \psi_1 &= \psi_1^{(0)} \cos\alpha + \psi_2^{(0)} \sin\alpha \\ \psi_2 &= -\psi_1^{(0)} \sin\alpha + \psi_2^{(0)} \cos\alpha. \end{cases} \quad (2.44)$$

Theo (2.40) khi bất đẳng thức $H_{11} - H_{22} \gg |H_{12}|$, được nghiệm đúng thì $\operatorname{tg}2\alpha \approx 0$, do đó

$$\psi_1 = \psi_1^{(0)}, \quad \text{còn} \quad \psi_2 = \psi_2^{(0)},$$

nghĩa là các hàm mới trùng với các hàm ban đầu. Khi bất đẳng thức $H_{11} - H_{22} \ll |H_{12}|$, được thoả mãn thì $\operatorname{tg}2\alpha \approx \infty$, nghĩa là $\alpha = \pi/4$, công thức (2.44) trở thành

$$\begin{cases} \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1^{(0)} + \psi_2^{(0)} \right) \\ \psi_2 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1^{(0)} - \psi_2^{(0)} \right). \end{cases}$$

Từ điều nói trên, suy ra rằng trong số các giá trị năng lượng $E_1, E_2, E_3^{(0)}, E_4^{(0)}, \dots$ sẽ không có các giá trị gần nhau. Do đó có thể dùng các giá trị này cùng các hàm tương ứng của chúng $\psi_1, \psi_2, \psi_3^{(0)}, \psi_4^{(0)}, \dots$ làm các đại lượng gần đúng cấp không khi cần tính các hàm sóng ψ theo công thức (2.24) trong phép tính gần đúng cấp một và các hiệu chỉnh cho năng lượng trong phép gần đúng cấp hai theo công thức (2.23).

Phương pháp này cũng có thể dùng được khi $E_1 = E_2$, nghĩa là khi có mức suy biến bậc hai với hai hàm $\psi_{11}^{(0)}$ và $\psi_{12}^{(0)}$. Tất cả các công thức này vẫn còn đúng, nếu hiểu $\psi_1^{(0)}$ là $\psi_{11}^{(0)}$ và $\psi_2^{(0)}$ là $\psi_{12}^{(0)}$.

2.2.2 Lý thuyết nhiễu loạn dừng khi có suy biến:

Để đơn giản, ta xét trực tiếp trường hợp suy biến bội hai. Cụ thể là một mức năng lượng E_n của hệ tương ứng với hai hàm sóng ψ_{n1} và ψ_{n2} độc lập tuyến tính với nhau. Ta có thể chọn sao cho ψ_{n1}, ψ_{n2} trực chuẩn. Với n xác định, ta giả thiết

$$\int_V \psi_{n\alpha}^* \psi_{n\beta} dx = \delta_{\alpha\beta}. \quad (2.45)$$

Gọi \hat{H} là Hamiltonian của hệ,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}. \quad (2.46)$$

Ta cần tìm trị riêng E và hàm riêng ψ của \hat{H} , nghĩa là phải tìm nghiệm của phương trình

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (2.47)$$

Do có suy biến bội hai nên phương trình (2.47) có thể viết

$$\begin{cases} \hat{H}_0\psi_{n1}^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_{n1}^{(0)} \\ \hat{H}_0\psi_{n2}^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_{n2}^{(0)}. \end{cases} \quad (2.48)$$

Ta tìm E và ψ với điều kiện trực chuẩn (2.45). Biểu diễn hàm ψ dưới dạng tổ hợp tuyến tính

$$\begin{cases} \psi = C_1\psi_{n1}^{(0)} + C_2\psi_{n2}^{(0)} \\ E = E_n^{(0)} + E^{(1)}. \end{cases} \quad (2.49)$$

Thay (2.49) vào (2.47) và vận dụng (2.46), (2.48), ta được

$$\left(\hat{H}_0 + \hat{V}\right) \left(C_1\psi_{n1}^{(0)} + C_2\psi_{n2}^{(0)}\right) = \left(E_n^{(0)} + E^{(1)}\right) \left(C_1\psi_{n1}^{(0)} + C_2\psi_{n2}^{(0)}\right),$$

$$C_1 \hat{V} \psi_{n_1}^{(0)} + C_2 \hat{V} \psi_{n_2}^{(0)} = C_1 E^{(1)} \psi_{n_1}^{(0)} + C_2 E^{(1)} \psi_{n_2}^{(0)}.$$

Nhân hai vế đẳng thức trên với $\psi_{n\alpha}^{(0)*}$, với $\alpha = 1, 2$, rồi lấy tích phân trên toàn miền giá trị của x , ta được

$$C_1 \int_V \psi_{n\alpha}^{(0)*} \hat{V} \psi_{n_1}^{(0)} dx + C_2 \int_V \psi_{n\alpha}^{(0)*} \hat{V} \psi_{n_2}^{(0)} dx = C_1 E^{(1)} \int_V \psi_{n\alpha}^{(0)*} \psi_{n_1}^{(0)} dx + C_2 E^{(1)} \int_V \psi_{n\alpha}^{(0)*} \psi_{n_2}^{(0)} dx$$

hay

$$V_{\alpha 1} C_1 + V_{\alpha 2} C_2 = C_1 E^{(1)} \delta_{\alpha 1} + C_2 E^{(1)} \delta_{\alpha 2}, \quad \alpha = 1, 2.$$

lưu ý rằng $V_{\alpha\beta} = \int_V \psi_{n\alpha}^{(0)*} \hat{V} \psi_{n\beta}^{(0)} dx$, ta suy ra

$$\begin{cases} (V_{11} - E^{(1)}) C_1 + V_{12} C_2 = 0 \\ V_{21} C_1 + (V_{22} - E^{(1)}) C_2 = 0. \end{cases} \quad (2.50)$$

Hệ phương trình (2.50) có nghiệm khác không khi định thức lập bởi các hệ số của các ẩn C_1, C_2 bằng không, nghĩa là

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

Khai triển định thức sẽ thu được một phương trình bậc hai theo $E^{(1)}$. Giải phương trình, ta được hai nghiệm

$$\begin{aligned} E_{1,2}^{(1)} &= \frac{1}{2} \left[V_{11} + V_{22} \pm \sqrt{(V_{11} + V_{22})^2 - 4(V_{11}V_{22} - V_{12}V_{21})} \right] \\ E_{1,2}^{(1)} &= \frac{1}{2} \left[V_{11} + V_{22} \pm \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2} \right]. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Tóm lại, đối với hệ không nhiễu loạn $\hat{H} = \hat{H}_0$, chỉ có một mức năng lượng $E_n^{(0)}$ cho hai hàm sóng $\psi_{n_1}^{(0)}$ và $\psi_{n_2}^{(0)}$. Khi hệ có nhiễu loạn $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, mức năng lượng của hệ tách thành hai mức

$$\begin{cases} E_{1n} = E_n^{(0)} + E_1^{(1)} \\ E_{2n} = E_n^{(0)} + E_2^{(1)} \end{cases} \quad (2.52)$$

Xét trường hợp đặc biệt khi $V_{11} = V_{22}$, $V_{12} = V_{21}$, thì

$$E_1^{(1)} = V_{11} + |V_{12}|; \quad E_2^{(1)} = V_{11} - |V_{12}|. \quad (2.53)$$

Ứng với hai giá trị $E_1^{(1)}$ và $E_2^{(1)}$ sẽ có hai cặp giá trị cho C_1 và C_2 .

a) Với $E_1^{(1)} = V_{11} + V_{12}$, hệ phương trình (2.50) trở thành

$$\begin{cases} -V_{12}C_1 + V_{12}C_2 = 0 \\ V_{12}C_1 - V_{12}C_2 = 0. \end{cases}$$

Kết hợp với điều kiện chuẩn hoá hàm sóng, ta suy ra

$$C_1 = C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

như vậy hàm sóng ứng với mức năng lượng $E_1^{(1)}$ là

$$\psi_{n1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{n1}^{(0)} + \psi_{n2}^{(0)} \right).$$

b) Với $E_2^{(1)} = V_{11} - V_{12}$, hệ phương trình (2.50) trở thành

$$\begin{cases} V_{12}C_1 + V_{12}C_2 = 0 \\ V_{12}C_1 + V_{12}C_2 = 0. \end{cases}$$

Trong trường hợp này ta tìm được

$$C_1 = -C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

hàm sóng tương ứng với mức năng lượng $E_2^{(1)}$ là

$$\psi_{n2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{n1}^{(0)} - \psi_{n2}^{(0)} \right).$$

Mức năng lượng không còn suy biến nữa. Như vậy nhiễu loạn đã làm mất suy biến.

Bây giờ ta xét lý thuyết nhiễu loạn khi có suy biến bội $n \geq 2$. Cụ thể là đặt vấn đề như sau: Cần tìm nghiệm của phương trình

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (2.54)$$

trong đó

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}; \quad \hat{H}_0\psi_p^{(0)} = E^{(0)}\psi_p^{(0)}, \quad p = 1, 2, \dots, n. \quad (2.55)$$

Một mức $E^{(0)}$ ứng với n hàm $\psi_p^{(0)}$. Giới hạn tìm các hiệu chỉnh năng lượng trong phép gần đúng cấp một và các hàm sóng trong phép gần đúng cấp không, nghĩa là

$$\left. \begin{aligned} E &= E^{(0)} + E^{(1)}, \\ \psi &= \sum_p C_p \psi_p^{(0)}. \end{aligned} \right\} \quad (2.56)$$

Thay (2.56) vào (2.54) và vận dụng (2.55), (2.56), ta viết được :

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 + \hat{V}) \sum_p C_p \psi_p^{(0)} &= (E^{(0)} + E^{(1)}) \sum_p C_p \psi_p^{(0)}, \text{ hay} \\ \sum_p C_p \hat{V} \psi_p^{(0)} &= E^{(1)} \sum_p C_p \psi_p^{(0)}, \end{aligned} \quad (2.57)$$

nhân hai vế của (2.57) với $\psi_m^{(0)*}$, rồi lấy tích phân trên toàn miền giá trị của biến x , ta được

$$\sum_{p=1}^n C_p (V_{mp} - E^{(1)} \delta_{mp}) = 0, \quad (2.58)$$

cho $m = 1, 2, \dots, n$, ta thu được hệ n phương trình dạng (2.58) với n ẩn số C_1, C_2, \dots, C_n . Muốn cho các nghiệm không tầm thường thì định thức lập bởi các hệ số của các ẩn đó phải bằng không

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} & V_{13} & \dots & V_{1n} \\ V_{21} & V_{22} - E^{(1)} & V_{23} & \dots & V_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ V_{n1} & V_{n2} & V_{n3} & \dots & V_{nn} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (2.59)$$

Khai triển định thức (2.59), ta có một phương trình bậc n của $E^{(1)}$. Phương trình trên gọi là phương trình thế kỷ (thuật ngữ mượn trong thiên văn học). Nó có n nghiệm thực. Nếu tất cả các nghiệm của phương trình thế kỷ đều khác nhau thì mức năng lượng $E^{(0)}$ bội n của bài toán suy biến sẽ tách thành n mức năng lượng khác nhau $E_p^{(0)}, p = 1, 2, \dots, n$

$$E_p = E^{(0)} + E_p^{(1)}, \quad (2.60)$$

mỗi mức E_p ứng với một hàm sóng

$$\psi_p = \sum_k C_k \psi_{pk}^{(0)}. \quad (2.61)$$

Trong trường hợp này suy biến bội n bị mất hoàn toàn.

Nếu một hay một số nghiệm của phương trình thế kỷ (2.59) là nghiệm bội s thì suy biến bội n bị mất một phần. Các hàm sóng ψ_{pk} với các nghiệm bội E_{pk} , $k = 1, 2, \dots, s$, của phương trình (2.59) không được xác định đơn trị bởi các phương trình. Tuy nhiên, bao giờ cũng có thể chọn chúng sao cho chúng được trực giao với nhau. Các hàm sóng ứng với các nghiệm khác nhau của phương trình (2.59) cũng trực giao với nhau. Trong phần này, ta nhận thấy rằng nhiễu loạn đã làm mất suy biến. Thông thường khi có nhiễu loạn, các trị riêng của toán tử \hat{H}_0 sẽ không suy biến hoặc độ bội suy biến giảm đi. Điều này có liên quan mật thiết đến tính đối xứng của Hamiltonian đối với một lớp xác định các phép biến đổi tọa độ của hệ. Thông thường, nhiễu loạn \hat{V} không có cùng tính đối xứng với \hat{H}_0 , do đó Hamiltonian tổng hợp $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ sẽ không có tính đối xứng như trước và mức năng lượng của nó sẽ không suy biến. Như vậy, nhiễu loạn đã làm mất sự suy biến.

2.3 Hiệu ứng Stark trong nguyên tử Hydro

Khi nguyên tử được đặt trong một điện trường thì các vạch quang phổ của nó sẽ bị tách ra. Hiện tượng này đã được Stark phát hiện vào năm 1913. Hiệu ứng Stark chỉ có thể giải thích bằng cơ học lượng tử. Trong phần này, ta giới hạn khảo sát ở hiệu ứng Stark bậc nhất, đặc trưng cho nguyên tử đồng dạng Hydro. Đối với các nguyên tử này, các mức năng lượng không những suy biến theo m mà còn suy biến theo ℓ nữa. Chính sự suy biến theo ℓ đã gây ra hiệu ứng Stark bậc nhất. Còn đối với các nguyên tử không phải đồng dạng Hydro, sự suy biến theo ℓ nói chung không có, do đó không quan sát được hiệu ứng Stark bậc nhất. Với mức năng lượng thứ nhất ($n = 1, \ell = 0$) không có suy biến nên không có sự tách mức, do đó ta sẽ xét sự tách mức năng lượng thứ hai của nguyên tử Hydro ($n = 2$).

Do điện trường ngoài \mathcal{E} trong các thí nghiệm vào khoảng $10^4 - 10^6 V/cm$, nhỏ hơn rất nhiều so với điện trường gây bởi hạt nhân $\mathcal{E}_{nh} = e/a^2 \approx 5 \cdot 10^9 V/cm$, trong đó a là bán kính quỹ đạo Bohr thứ nhất, nên ta có thể dùng lý thuyết nhiễu loạn để khảo sát hiệu ứng Stark. Ở đây, toán tử nhiễu loạn là toán tử thế năng của điện tử trong điện trường ngoài \hat{V}

$$\hat{V} = e\mathcal{E}z. \quad (2.62)$$

Ở trạng thái không nhiễu loạn, điện tử có mức năng lượng

$$E_2^{(0)} = -\frac{R\hbar}{4}, \quad (2.63)$$

trong đó R là hằng số Rydberg. Mức năng lượng này ($n = 2$) tương ứng với $n^2 = 4$, hàm sóng

$$\psi_1^{(0)} = \psi_{200} = R_{20}(r)Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_{20}(r), \quad (2.64)$$

$$\psi_2^{(0)} = \psi_{210} = R_{21}(r)Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}R_{21}(r)\cos\theta, \quad (2.65)$$

$$\psi_3^{(0)} = \psi_{211} = R_{21}(r)Y_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}R_{21}(r)\sin\theta e^{i\varphi}, \quad (2.66)$$

$$\psi_4^{(0)} = \psi_{21-1} = R_{21}(r)Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}R_{21}(r)\sin\theta e^{-i\varphi}. \quad (2.67)$$

Thay các biến bằng tọa độ Descartes, các hàm sóng có dạng

$$\psi_1^{(0)} = f_1(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_{20}(r), \quad (2.68)$$

$$\psi_2^{(0)} = z f_2(r); \quad f_2(r) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{R_{21}(r)}{r}, \quad (2.69)$$

Do

$$r\sin\theta\exp(i\varphi) = \sqrt{x^2 + y^2}\exp(i\varphi) = x + iy;$$

$$r\sin\theta\exp(-i\varphi) = \sqrt{x^2 + y^2}\exp(-i\varphi) = x - iy$$

nên

$$\psi_3^{(0)} = f_2(r)\frac{x + iy}{\sqrt{2}}, \quad (2.70)$$

$$\psi_4^{(0)} = f_2(r)\frac{x - iy}{\sqrt{2}}. \quad (2.71)$$

Hàm sóng tổng quát nhất ứng với mức năng lượng $E_2^{(0)}$ là

$$\psi = \sum_{k=1}^4 C_k \psi_k^{(0)}. \quad (2.72)$$

Trong trường hợp này, độ bội suy biến là 4 nên để xác định các hệ số C_k và các hiệu chỉnh bậc nhất $E_2^{(1)}$ cho mức năng lượng E_2 của trạng thái nhiễu loạn, ta áp dụng (2.58) để tìm được hệ 4 phương trình sau:

$$\left. \begin{aligned} (V_{11} - E_2^{(1)}) C_1 + V_{12} C_2 + V_{13} C_3 + V_{14} C_4 &= 0 \\ V_{21} C_1 + (V_{22} - E_2^{(1)}) C_2 + V_{23} C_3 + V_{24} C_4 &= 0 \\ V_{31} C_1 + V_{32} C_2 + (V_{33} - E_2^{(1)}) C_3 + V_{34} C_4 &= 0 \\ V_{41} C_1 + V_{42} C_2 + V_{43} C_3 + (V_{44} - E_2^{(1)}) C_4 &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.73)$$

trong đó

$$V_{ij} = \int_V \psi_i^{(0)*} \hat{V} \psi_j^{(0)} dV = e\mathcal{E} \int_V \psi_i^{(0)*} z \psi_j^{(0)} dV. \quad (2.74)$$

Chỉ các phần tử ma trận $V_{12} = V_{21}$ là khác không vì chúng là các hàm chẵn của cả ba tọa độ x, y, z

$$V_{12} = V_{21} = e\mathcal{E} \int_V f_1(r) f_2(r) z^2 dV, \quad (2.75)$$

còn các phần tử ma trận V khác đều triệt tiêu vì biểu thức dưới dấu tích phân của chúng đều là hàm lẻ đối với ba tọa độ x, y và z .

Thay vào (2.75) các hàm $f_1(r), f_2(r)$ lấy từ (2.68) và (2.69) với lưu ý rằng

$$\left. \begin{aligned} R_{20}(r) &= \frac{1}{\sqrt{2a^3}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) \exp\left(\frac{-r}{2a}\right), \\ R_{21}(r) &= \frac{1}{\sqrt{6a^3}} \left(\frac{r}{2a}\right) \exp\left(\frac{-r}{2a}\right). \end{aligned} \right\} \quad (2.76)$$

Ta tính tích phân (2.75) trong tọa độ cầu với $dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$,

$$V_{12} = \frac{e\mathcal{E}}{8\pi a^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \exp\left(\frac{-r}{2a}\right) \left(1 - \frac{r}{2a}\right) \frac{\exp\left(\frac{-r}{2a}\right) r}{r} \frac{r}{2a} z^2 r^2 \sin \theta d\theta dr d\varphi,$$

mà

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} z^2 \sin \theta d\theta d\varphi = r^2 \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \cos^2 \theta \sin \theta d\theta d\varphi = \frac{4\pi}{3} r^2.$$

Đưa vào biến mới $\xi = r/a$, ta thu được

$$V_{21} = V_{12} = \frac{e\mathcal{E}a}{12} \int_0^\infty \exp(-\xi) \left(1 - \frac{\xi}{2}\right) \xi^4 d\xi = -3e\mathcal{E}a. \quad (2.77)$$

Để cho các nghiệm C_1, C_2, C_3, C_4 không tầm thường thì định thức

$$\begin{vmatrix} E_2^{(1)} & 3ae\mathcal{E} & 0 & 0 \\ 3ae\mathcal{E} & E_2^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_2^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (2.78)$$

Khai triển định thức, ta thu được phương trình bậc bốn của $E_2^{(1)}$

$$E_2^{(1)2} \left(E_2^{(1)2} - 9a^2 e^2 \mathcal{E}^2 \right) = 0. \quad (2.79)$$

Và tìm được 4 nghiệm của phương trình (2.79)

$$E_{21}^{(1)} = -3ae\mathcal{E}; \quad E_{22}^{(1)} = 3ae\mathcal{E}; \quad E_{23}^{(1)} = E_{24}^{(1)} = 0. \quad (2.80)$$

Mỗi nghiệm tương ứng với một bộ hoàn toàn xác định của các hệ số

$$\left. \begin{array}{l} E_{21}^{(1)} \leftrightarrow C_{11} = C_{21}, \quad C_{31} = C_{41} = 0, \\ E_{22}^{(1)} \leftrightarrow C_{12} = -C_{22}, \quad C_{32} = C_{42} = 0, \\ E_{23}^{(1)} \leftrightarrow C_{13} = C_{23} = 0, \quad C_{33} \neq 0; \quad C_{43} \neq 0, \\ E_{24}^{(1)} \leftrightarrow C_{14} = C_{24} = 0, \quad C_{34} \neq 0; \quad C_{44} \neq 0. \end{array} \right\} \quad (2.81)$$

Như vậy ứng với mức năng lượng

$$E_{21} = E_2^{(0)} + E_{21}^{(1)} = E_2^{(0)} - 3ae\mathcal{E} \quad (2.82)$$

ta có hàm sóng trong phép gần đúng cấp không

$$\psi_1 = C_{11}\psi_1^{(0)} + C_{21}\psi_2^{(0)} = C_{11}(\psi_{200} + \psi_{210}). \quad (2.83)$$

Điều kiện chuẩn hoá hàm sóng cho

$$\int_V \psi_1^* \psi_1 dV = 1,$$

ta tìm được $C_{11} = 1/\sqrt{2}$, vậy

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{200} + \psi_{210}). \tag{2.84}$$

Tương tự mức năng lượng

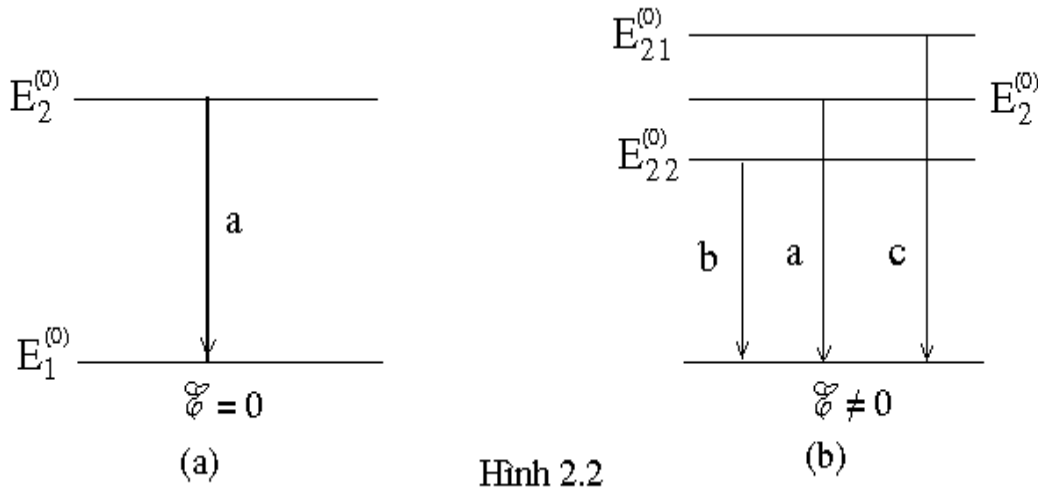
$$E_{22} = E_2^{(0)} + E_{22}^{(1)} = E_2^{(0)} + 3ae\mathcal{E} \tag{2.85}$$

tương ứng với hàm sóng trong phép gần đúng cấp không

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{200} - \psi_{210}). \tag{2.86}$$

Các mức năng lượng $E_{23} = E_{24} = E_2^{(0)}$ tương ứng với trạng thái $\psi_3 = \psi_{211}$ ($m = 1$), hay $\psi_4 = \psi_{21-1}$ ($m = -1$), hay tổ hợp tuyến tính của chúng vì $C_{13} = C_{23} = C_{14} = C_{24} = 0$. Còn C_{33}, C_{34}, C_{43} và C_{44} vẫn chưa xác định.

Như vậy sự suy biến bị khử một phần, vì mức năng lượng ban đầu $E_2^{(0)}$ chỉ tách thành ba mức khác nhau. Sơ đồ minh hoạ được trình bày ở hình 2.2.



2.4 Nhiễu loạn phụ thuộc thời gian

Xét một hệ có năng lượng phụ thuộc thời gian. Ta ký hiệu toán tử nhiễu loạn là một hàm của thời gian $\hat{V}(t)$. Hamiltonian của hệ trong trường hợp này có dạng

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t). \tag{2.87}$$

Trong trường hợp này, năng lượng của hệ không bảo toàn, do đó không có các trạng thái dừng.

Phương trình Schrödinger của hệ có dạng

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}_0 \psi(x, t) + \hat{V}(t) \psi(x, t). \quad (2.88)$$

Ta sẽ giải phương trình bằng phương pháp biến thiên hằng số do Dirac đưa ra năm 1926. Gọi

$$\psi_n^{(0)}(x, t) = \psi_n^{(0)}(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t} \quad (2.89)$$

là các hàm sóng ở trạng thái dừng đã biết của hệ không nhiễu loạn. Các hàm này thoả mãn phương trình không nhiễu loạn

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n^{(0)}(x, t)}{\partial t} = \hat{H}_0 \psi_n^{(0)}(x, t) = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}(x, t). \quad (2.90)$$

Giả sử có một nhiễu loạn nhỏ $\hat{V}(t)$ tác dụng lên hệ. Hàm sóng cần tìm $\psi(x, t)$ của hệ nhiễu loạn thoả mãn phương trình (2.88). Dạng tổng quát của hàm sóng

$$\psi(x, t) = \sum_k C_k(t) \psi_k^{(0)}(x, t). \quad (2.91)$$

Vì các hàm sóng $\psi_k^{(0)}(x, t)$ tạo thành một hệ đủ các hàm riêng của toán tử hermitic \hat{H}_0 , nên một khai triển như trên bao giờ cũng thực hiện được. Các hệ số khai triển $C_k(t)$ chỉ phụ thuộc thời gian và không phụ thuộc tọa độ.

Thay (2.91) vào (2.88) và chú ý đến (2.90), ta có

$$i\hbar \sum_k \psi_k^{(0)}(x, t) \frac{dC_k(t)}{dt} = \sum_k C_k(t) \hat{V}(t) \psi_k^{(0)}(x, t).$$

Nhân bên trái hai vế với $\psi_m^{(0)*}(x, t)$ rồi lấy tích phân theo tọa độ, ta được

$$i\hbar \frac{dC_m(t)}{dt} = \sum_k V_{mk}(t) C_k(t), \quad (2.92)$$

trong đó

$$V_{mk}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})t} \int_V \psi_m^{(0)*}(x) \hat{V}(t) \psi_k^{(0)}(x) dx = e^{i\omega_{mk}t} v_{mk}(t),$$

$$\omega_{mk} = \frac{1}{\hbar} (E_m^{(0)} - E_k^{(0)}); \quad v_{mk}(t) = \int_V \psi_m^{(0)*}(x) \hat{V}(t) \psi_k^{(0)}(x) dx, \quad (2.93)$$

với $V_{mk}(t)$ là các phần tử nhiễu loạn bao gồm cả thừa số thời gian.

Hệ phương trình (2.92) là hệ phương trình chính xác. Nó tương đương với phương trình (2.88), vì tập hợp các hệ số $C_k(t)$ xác định hoàn toàn hàm sóng $\psi(x, t)$. Tuy nhiên, giải phương trình (2.92) không đơn giản hơn giải phương trình xuất phát (2.88). Để đơn giản hoá phương trình (2.92), ta cần dùng tính chất nhiễu loạn $\hat{V}(t)$ là nhỏ. Giả thiết rằng ban đầu khi $t \leq 0$, hệ ở trạng thái riêng $\psi_n^{(0)}$, theo đó

$$C_k(0) = \delta_{kn}. \quad (2.94)$$

Bắt đầu từ $t = 0$, hệ chịu tác dụng của một nhiễu loạn nhỏ, do đó hàm sóng $\psi_n^{(0)}$ của trạng thái ban đầu phụ thuộc ít vào thời gian. Vì thế, các hệ số $C_k(t)$ tại thời điểm $t > 0$ được tìm dưới dạng

$$C_k(t) = \delta_{kn} + C_k^{(1)}(t) + C_k^{(2)}(t) + \dots \quad (2.95)$$

Hiệu chính $C_k^{(1)}(t)$ có cùng cấp độ bé với phần tử nhiễu loạn $V_{mk}(t)$ (hay $v_{mk}(t)$), $C_k^{(2)}(t)$ là bậc hai đối với phần tử nhiễu loạn,.... Thay khai triển (2.95) vào (2.92), ta tìm được các phương trình cùng bậc nhiễu loạn:

- Bậc nhất

$$i\hbar \frac{dC_m^{(1)}(t)}{dt} = \sum_k v_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t} \delta_{nk} = v_{mn}(t) e^{i\omega_{mnt}}, \quad (2.96)$$

khi đó ta đã bỏ qua tất cả các số hạng có cấp độ bé cấp hai và cao hơn của nhiễu loạn. Lấy tích phân (2.96), ta được

$$C_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t v_{mn}(t) e^{i\omega_{mnt}} dt. \quad (2.97)$$

- Bậc hai:

$$i\hbar \frac{dC_m^{(2)}(t)}{dt} = \sum_k v_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t} C_k^{(1)}. \quad (2.98)$$

Giải phương trình này bằng cách thế kết quả ở (2.97) vào vế phải của phương trình (2.98), ta thu được $C_m^{(2)}(t)$. Tiếp tục lặp lại cho phương trình nhiễu loạn bậc 3, bậc 4,...

Khi nhiễu loạn $\hat{V}(t)$ đủ nhỏ thì ta có thể giới hạn ở phép tính gần đúng bậc nhất.

2.5 Sự chuyển dời lượng tử của hệ vi mô sang các trạng thái mới dưới ảnh hưởng của nhiễu loạn

Một trong những bài toán quan trọng nhất của cơ học lượng tử là việc tính xác suất chuyển dời của hệ từ trạng thái lượng tử này sang trạng thái lượng tử khác. Giả sử có một hệ ở trạng thái năng lượng xác định $E_n^{(0)}$ và được mô tả bởi một hàm sóng xác định $\psi_n^{(0)}$. Nếu khi $t \leq 0$, hệ chịu tác dụng của một nhiễu loạn $\hat{V}(t)$, thì tại thời điểm $t > 0$, hệ sẽ nằm trong một trạng thái mới mô tả bởi hàm sóng

$$\psi(x, t) = \sum_k C_k(t) \psi_k^{(0)}.$$

Điều này có nghĩa là tại thời điểm $t > 0$ hệ có thể ở một trạng thái bất kỳ nào đó trong số các trạng thái dừng khả dĩ của nó. Theo các quy luật tổng quát của cơ học lượng tử, xác suất tìm thấy hệ trong trạng thái lượng tử m được xác định bằng $|C_m|^2$. Vì tại $t = 0$ hệ ở trạng thái dừng n nên $|C_m(t)|^2$ xác định xác suất chuyển dời của hệ từ trạng thái n sang trạng thái m trong khoảng thời gian t , $w_{mn}(t) = |C_m(t)|^2 \equiv |C_{mn}(t)|^2$. Ở đây chỉ số thứ hai ký hiệu trạng thái đầu.

Như vậy nhiễu loạn là nguyên nhân gây ra sự dời chuyển của hệ từ một trạng thái lượng tử này sang một trạng thái khác. Nét đặc trưng của quá trình này không có sự tương tự trong vật lý cổ điển. Đó là nhiễu loạn đã gây ra sự dời chuyển từ một trạng thái dừng với năng lượng xác định sang một trạng thái mới, trong đó năng lượng không có giá trị xác định. Trạng thái cuối của hệ được mô tả bởi hàm sóng $\psi(x, t)$ và là một trạng thái xác định (theo định nghĩa của cơ học lượng tử).

Sự dời chuyển này không được thực hiện bằng bước nhảy mà diễn ra theo thời gian. Từ (2.97), ta dễ dàng tính được xác suất dời chuyển của hệ từ trạng thái dừng $\psi_n^{(0)}(x)$ sang trạng thái dừng $\psi_m^{(0)}(x)$, ($m \neq n$) trong khoảng thời gian từ $0 \rightarrow t$ có nhiễu loạn tác động trong gần đúng bậc nhất

$$w_{mn}(t) = |C_{mn}^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t v_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} dt \right|^2 \quad (2.99)$$

Lưu ý rằng (2.99) chỉ đúng khi $v_{mn}(t)$, t đủ nhỏ để hiệu chính $C_{mn}^{(1)}$ nhỏ so với đơn vị.

a) Ta xét trường hợp đặc biệt khi nhiễu loạn không phụ thuộc thời

gian, nghĩa là $\hat{V}(t) = \hat{V}(0)$, theo đó $v_{mn}(t) = v_{mn}(0)$, nên

$$C_{mn}^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} v_{mn}(0) \int_0^t e^{i\omega_{mn}t} dt = -v_{mn}(0) \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})t} - 1}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (2.100)$$

$$w_{mn}(t) = |C_{mn}^{(1)}(t)|^2 = 4|v_{mn}(0)|^2 \frac{\sin^2 \left[\frac{t}{2\hbar} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \right]}{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})^2} \quad (2.101)$$

Nếu tìm xác suất chuyển từ trạng thái ban đầu n đến tất cả các trạng thái khác thì ta lấy tổng mọi giá trị của m

$$w_n(t) = \sum_m w_{mn}(t) = \sum_m |C_{mn}^{(1)}(t)|^2 = 4 \sum_m |v_{mn}(0)|^2 \frac{\sin^2 \left[\frac{t}{2\hbar} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \right]}{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})^2}. \quad (2.102)$$

Nếu các trạng thái cuối có phổ liên tục thì dấu tổng thay bằng dấu tích phân theo biến vi phân $\rho(E_m^{(0)}) dE_m^{(0)}$

$$w_n(t) = 4|v_{mn}(0)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \left[\frac{t}{2\hbar} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \right]}{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})^2} \rho(E_m^{(0)}) dE_m^{(0)}, \quad (2.103)$$

trong đó $\rho(E_m^{(0)})$ là hàm mật độ trạng thái trong khoảng năng lượng $E_m^{(0)} \rightarrow E_m^{(0)} + dE_m^{(0)}$. Khi tính tích phân, ta xem $|v_{mn}(0)|^2$ và $\rho(E_m^{(0)})$ không đổi và dùng công thức

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\alpha x)}{x^2} dx = \pi\alpha$$

thì sẽ thu được xác suất chuyển dời từ trạng thái n đến tất cả các trạng thái khác

$$w_n(t) = \frac{2\pi t}{\hbar} |v_{mn}(0)|^2 \rho(E_m^{(0)}). \quad (2.104)$$

b) Một trường hợp quan trọng khác là nhiễu loạn tuần hoàn đơn sắc:

$$\hat{V}(t) = \hat{V}_0 \exp(-i\omega t). \quad (2.105)$$

Xác suất chuyển dời lượng tử có dạng

$$w_{mn}(t) = |C_{mn}^{(1)}(t)|^2 = 4|v_{mn}(0)|^2 \frac{\sin^2 \left[\frac{t}{2\hbar} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)} - \hbar\omega) \right]}{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)} - \hbar\omega)^2}, \quad (2.106)$$

khi

$$\hbar\omega = E_m^{(0)} - E_n^{(0)} \quad (2.107)$$

thì xác suất có giá trị cực đại. Rõ ràng nếu năng lượng $\hbar\omega$ của năng lượng kích thích bằng hiệu hai mức năng lượng $E_m^{(0)} - E_n^{(0)}$ thì xác suất chuyển dời từ trạng thái n đến trạng thái m của hệ lượng tử có giá trị cực đại. Đó là tính chất cộng hưởng của sự kích thích bằng bức xạ. Việc khảo sát hàm

$$f_m(E_m^{(0)}, t) = \frac{\sin^2[\frac{t}{2\hbar}(E_m^{(0)} - E_n^{(0)} - \hbar\omega)]}{\left(\frac{1}{2\hbar}(E_m^{(0)} - E_n^{(0)} - \hbar\omega)\right)^2 \pi t}$$

cho ta điều kiện

$$\Delta E_m^{(0)} \approx \frac{\hbar}{t}$$

Lưu ý rằng từ yêu cầu độ bất định năng lượng của trạng thái cuối $\Delta E_m^{(0)}$ phải nhỏ so với năng lượng $\hbar\omega$ của trường kích thích, ta rút ra bất đẳng thức

$$t \gg \frac{1}{\omega}, \quad \left(\Delta E_m^{(0)} \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \right) \quad (2.108)$$

nghĩa là $\Delta E_m^{(0)} \ll \hbar\omega$ nếu thời gian tác động của nhiễu loạn lớn so với chu kỳ của nhiễu loạn.

Khi $t \rightarrow \infty$ thì dựa vào công thức

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \xi t}{\pi \xi^2 t} = \delta(\xi) : \text{hàm delta Dirac,}$$

với $\xi = (E_m^{(0)} - E_n^{(0)} - \hbar\omega)/(2\hbar)$ và lưu ý tính chất $\delta(ax) = \delta(x)/a$, ta suy ra

$$w_{mn}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |v_{mn}(0)|^2 t \delta(E_m^{(0)} - E_n^{(0)} - \hbar\omega). \quad (2.109)$$

Như vậy khi xét trong một thời gian dài thì chỉ có chuyển dời lượng tử nếu đối số của hàm delta Dirac bằng không, tức là năng lượng bức xạ kích thích $\hbar\omega$ đúng bằng hiệu hai mức năng lượng.

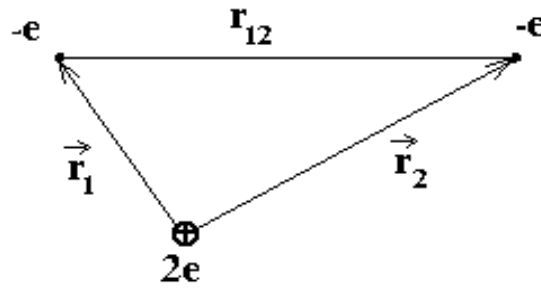
2.6 Nguyên tử Hêli

Nguyên tử Hêli gồm hạt nhân dương mang điện tích $+2e$ và hai điện tử chuyển động xung quanh hạt nhân. Chọn hệ quy chiếu có gốc tọa độ ở hạt

nhân Heli, do đó hạt nhân đứng yên trong hệ quy chiếu này. Ta viết được Hamiltonian của hệ hai điện tử dưới dạng

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi = E\psi, \quad (2.110)$$

trong đó r_1, r_2 theo thứ tự là khoảng cách giữa hạt nhân Heli với hai điện tử và r_{12} là khoảng cách giữa hai điện tử. Hai số hạng thứ ba, thứ tư mô tả thế năng tương tác giữa



Hình 2.3

hai điện tử với hạt nhân, số hạng cuối cùng mô tả năng lượng tương tác Coulomb giữa hai điện tử. Trong biểu thức của Hamiltonian nêu trên, ta đã bỏ qua một số hiệu ứng gây bởi mômen từ spin và mômen từ quỹ đạo của điện tử,... Do đó nghiệm của phương trình (2.110) cần được tìm dưới dạng tích của các hàm tọa độ $\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ và hàm spinơ $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$

$$\psi = \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2). \quad (2.111)$$

Để thu được các hàm sóng và năng lượng của trạng thái cơ bản của Heli trong phép gần đúng tạm gọi là thoả đáng, ta dùng phương pháp nhiễu loạn. Khi đó tương tác giữa hai điện tử e^2/r_{12} trong (2.110) được xem như một nhiễu loạn. Theo đó, trong phép gần đúng cấp không, phương trình (2.110) có dạng

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} \right) \psi^{(0)} = E^{(0)}\psi^{(0)}, \quad (2.112)$$

Bằng phương pháp phân ly biến số với sự bỏ qua tương tác giữa hai điện tử như trên, ta viết lại Hamiltonian của hệ

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2; \quad \hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{2e^2}{r_1}; \quad \hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_2}. \quad (2.113)$$

Gọi $\varphi_1(\vec{r}_1)$, $\varphi_2(\vec{r}_2)$ theo thứ tự là hàm sóng của chỉ điện tử 1, 2. Ta viết được

$$\varphi_1(\vec{r}_1) = \varphi(n, \ell, m, s_z)_1; \quad \varphi_2(\vec{r}_2) = \varphi(n, \ell, m, s_z)_2 \quad (2.114)$$

và

$$\hat{H}_1\varphi_1(\vec{r}_1) = E_1\varphi_1(\vec{r}_1); \quad \hat{H}_2\varphi_2(\vec{r}_2) = E_2\varphi_2(\vec{r}_2). \quad (2.115)$$

Hàm ψ và năng lượng E của hệ gồm cả hai hạt trong trường hạt nhân sẽ là

$$\psi = \varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2) = \varphi(n, \ell, m, s_z)_1\varphi(n, \ell, m, s_z)_2; \quad E = E_1 + E_2.$$

Thực vậy

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi &= (\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2) \\ &= \hat{H}_1\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2) + \hat{H}_2\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2) \\ &= E_1\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2) + E_2\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2) \\ &= (E_1 + E_2)\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2), \quad \text{rõ ràng} \\ \hat{H}\psi &= E\psi. \end{aligned}$$

Ta có thể ký hiệu tập hợp các số lượng tử $(n, \ell, m, s_z)_i \equiv n_i$, do đó $\varphi_i(\vec{r}_i) = \varphi_{n_i}(\vec{r}_i), \dots$ Tổng quát, trạng thái của cả hệ có tọa độ không gian là $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots$ sẽ là chồng chất các trạng thái trên

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{n_1, n_2} C(n_1, n_2)\varphi_{n_1}(\vec{r}_1)\varphi_{n_2}(\vec{r}_2). \quad (2.116)$$

là dạng tổng quát của hàm sóng của hệ tại một tọa độ không gian xác định.

Bây giờ nếu coi tương tác $\hat{V} = e^2/r_{12}$ giữa hai điện tử với nhau là nhiễu loạn thì

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \frac{e^2}{r_{12}} = \hat{H}_0 + \hat{V}. \quad (2.117)$$

Khi $\hat{V} = 0$, năng lượng của hệ là E_0 và ψ_0 là hàm sóng tương ứng khi không có nhiễu loạn.

Trong phép gần đúng cấp một của nhiễu loạn, mức năng lượng ở trạng thái cơ bản được cho bởi công thức

$$E = E_0 + E^{(1)} = E_n + E_m + E^{(1)}. \quad (2.118)$$

E_n, E_m là các mức năng lượng của điện tử 1 và điện tử 2 lần lượt ở trạng thái φ_n và φ_m được xác định bởi

$$\psi^{(0)} = \psi_1^{(0)} = \varphi_n(\vec{r}_1)\varphi_m(\vec{r}_2), \quad (2.119)$$

$$\psi^{(0)} = \psi_2^{(0)} = \varphi_n(\vec{r}_2)\varphi_m(\vec{r}_1). \quad (2.120)$$

Như vậy theo nguyên lý không phân biệt các hạt đồng nhất, $\psi_1^{(0)}$ và $\psi_2^{(0)}$ đều thoả mãn các phương trình

$$\hat{H}_0\psi_1^{(0)} = E_0\psi_1^{(0)}; \quad \hat{H}_0\psi_2^{(0)} = E_0\psi_2^{(0)}.$$

Đây là trường hợp suy biến cấp hai. Khi có toán tử nhiễu loạn $\hat{V} \neq 0$, ta có:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}. \quad (2.121)$$

Ta sẽ tìm hàm sóng ψ trong phép gần đúng cấp không và mức năng lượng trong phép gần đúng cấp một. Ta viết được

$$\psi = \sum_k C_k \psi_k^{(0)} = C_1 \psi_1^{(0)} + C_2 \psi_2^{(0)}, \quad E = E_0 + E^{(1)}. \quad (2.122)$$

Với lưu ý

$$V_{ij} = V_{ji} = \int \int \psi_i^{(0)*} \hat{V} \psi_j^{(0)} dV_i dV_j = \int \int \psi_i^{(0)*} \frac{e^2}{r_{12}} \psi_j^{(0)} dV_i dV_j,$$

theo đó:

$$V_{11} = V_{22}; \quad V_{12} = V_{21} = V_{12}^* = V_{21}^*. \quad (2.123)$$

ta tìm $E^{(1)}$ bằng cách cho định thức sau bằng không

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.124)$$

Vận dụng kết quả (2.123), ta suy ra hai nghiệm

$$E_1^{(1)} = V_{11} + V_{12}; \quad E_2^{(1)} = V_{11} - V_{12}.$$

Cuối cùng, suy ra năng lượng hệ

$$\left. \begin{aligned} E_1 &= E_0 + V_{11} + V_{12} \\ E_2 &= E_0 + V_{11} - V_{12} \end{aligned} \right\} \quad (2.125)$$

với $E_0 = E_n + E_m$. Đặt

$$V_{11} = V_{22} \equiv K; \quad V_{12} = V_{21} \equiv A, \text{ là các đại lượng thực.} \quad (2.126)$$

$$\epsilon_{1,2} = E_{1,2} - E_0 = K \pm A, \quad (2.127)$$

với $E = E_0 + E^{(1)}$, theo (2.50) ta có hệ phương trình

$$\left. \begin{aligned} (E_0 + V_{11} - E) C_1 + V_{12} C_2 &= 0 \\ V_{12} C_1 + (E_0 + V_{22} - E) C_2 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (2.128)$$

Từ đó suy ra

$$\left. \begin{aligned} (K - \epsilon) C_1 + A C_2 &= 0 \\ (K - \epsilon) C_2 + A C_1 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (2.129)$$

Thay $\epsilon = K + A$, ta thu được $C_1 = C_2 = 1/\sqrt{2}$.

Thay $\epsilon = K - A$, ta thu được $C_1 = -C_2 = 1/\sqrt{2}$.

Suy ra hàm sóng đối xứng

$$\psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1^{(0)} + \psi_2^{(0)} \right), \quad E_s = E_n + E_m + K + A, \quad (2.130)$$

hàm sóng phản xứng

$$\psi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1^{(0)} - \psi_2^{(0)} \right), \quad E_a = E_n + E_m + K - A. \quad (2.131)$$

Phương pháp này không cho độ chính xác cao, so với thực nghiệm thì vào khoảng 20%. Ta sẽ xét bài toán này theo phương pháp khác có độ chính xác cao hơn, đó là phương pháp trường tự hợp Hartree-Fok.

2.7 Phương pháp trường tự hợp Hartree-Fok

2.7.1 Nguyên lý biến phân

Phương trình Schrödinger dưới dạng tổng quát $\hat{H}\psi = E\psi$ có thể thu được từ nguyên lý biến phân

$$\delta \int \psi^* (\hat{H} - E) \psi dq = 0. \quad (2.132)$$

Thực vậy, trị trung bình của năng lượng ở trạng thái dừng ψ là

$$\bar{E} = \int \psi^* \hat{H} \psi dq \quad (2.133)$$

Với điều kiện chuẩn hoá cho hàm ψ là $\int \psi^* \psi dq = 1$, ta cần tìm các hàm ψ sao cho \overline{E} đạt cực trị. \overline{E} là một đại lượng phụ thuộc vào ψ và được gọi là phiếm hàm. Ta tìm cực trị của phiếm hàm này. Đây là một bài toán biến phân có điều kiện. Muốn vậy, ta dùng phương pháp thừa số bất định Lagrange. Nội dung phương pháp này sau: Giả sử cần tìm cực trị của phiếm hàm $f = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ với điều kiện $\varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n$. Lagrange đưa bài toán tìm cực trị f có điều kiện về bài toán tìm cực trị không có điều kiện của hàm $F = f + \sum_i \lambda_i \varphi_i$, trong đó λ_i được gọi là các thừa số bất định Lagrange. Ta tìm cực trị của các hàm F với biến x . Khi đó các điểm mà F đạt cực trị cũng là những điểm mà f đạt cực trị với điều kiện nào đó.

Hàm F đạt cực trị khi biến phân của nó $\delta F = 0$.

Chuyển bài toán (2.132) về bài toán cực trị của F

$$F = \int \psi^* \hat{H} \psi dq - E \left(\int \psi^* \psi dq - 1 \right). \quad (2.134)$$

Trong đó số hạng thứ nhất và thứ hai đóng vai trò của f và $\sum_i \lambda_i \varphi_i$, còn E là thừa số bất định Lagrange. Phép tính biến phân cho ta

$$\delta F = \delta \int \psi^* \hat{H} \psi dq - \delta E \int \psi^* \psi dq = \delta \int \psi^* (\hat{H} - E) \psi dq = 0. \quad (2.135)$$

Lấy biến phân ψ và ψ^* độc lập với nhau, ta được

$$\int \delta \psi^* (\hat{H} - E) \psi dq = 0, \quad (2.136)$$

$$\int \psi^* (\hat{H} - E) \delta \psi dq = 0 = \int \delta \psi (\hat{H} - E) \psi^* dq, \quad (2.137)$$

(2.137) với $\delta \psi$ lấy tùy ý là khác không, suy ra

$$(\hat{H} - E) \psi^* = 0; \quad \text{hay } \hat{H} \psi^* = E \psi^*, \quad (2.138)$$

(2.136) với $\delta \psi^*$ lấy tùy ý, nên suy ra

$$(\hat{H} - E) \psi = 0; \quad \text{hay } \hat{H} \psi = E \psi, \quad (2.139)$$

Tóm lại, bài toán biến phân (2.135) không có điều kiện tương ứng với bài toán biến phân có điều kiện

$$\delta \int \psi^* \hat{H} \psi dq = 0, \quad (2.140)$$

$$\int \psi^* \psi dq = 1. \tag{2.141}$$

Giá trị cực tiểu của (2.140) với điều kiện (2.141) là giá trị đầu tiên của năng lượng, tức là mức năng lượng cơ bản E_0 . Ta sẽ chứng minh phiếm hàm

$$I(\psi_0) = \int \psi_0^* \hat{H} \psi_0 dq = E_0$$

là trị riêng cực tiểu của \hat{H} . Thực vậy, khai triển ψ theo hệ hàm riêng đủ và trực chuẩn $\{\psi_n\}$ của \hat{H} :

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \psi_n$$

và dùng điều kiện (2.141), ta thu được

$$\int \psi^* \hat{H} \psi dq = \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 = E_0 = \min\{E_n\} \tag{2.142}$$

Như vậy, việc tính năng lượng E_0 trong trạng thái cơ bản quy về việc tính cực tiểu của phiếm hàm. Hàm sóng ψ thực hiện việc tính cực tiểu đó là hàm sóng ψ_0 ở trạng thái cơ bản.. Từ điều kiện cực tiểu (2.140), ta xét tiếp các đại lượng $\psi_1, E_1, \psi_2, E_2, \dots$. Các hàm sóng của các trạng thái dưng kích thích ψ_n tiếp sau không những chỉ thoả mãn điều kiện chuẩn hoá mà còn phải thoả mãn điều kiện trực giao

$$\int \psi^* \psi_n dq = 0. \tag{2.143}$$

Các hàm ψ_n này thực hiện các cực trị, chứ không phải cực tiểu. Ta cụ thể hoá điều kiện (2.143):

- Hàm ψ_1 buộc phải trực giao với ψ_0 ,
- Hàm ψ_2 buộc phải trực giao với ψ_0, ψ_1 ,
- Hàm ψ_3 buộc phải trực giao với ψ_0, ψ_1, ψ_2 ,
-,
- Hàm ψ_n buộc phải trực giao với $\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{n-1}$.

Như vậy biết được các hàm $\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{n-1}$ ta tìm tiếp các trạng thái ψ tiếp theo sau và buộc chúng phải thoả mãn

$$\int |\psi|^2 dq = 1, \quad \int \psi \psi_m dq = 0, \quad m = 0, 1, 2, \dots, n - 1.$$

Thực tế việc tính E_0 quy về việc tìm các hàm ψ , được gọi là các hàm thử. Các phương án cụ thể trong phương pháp biến phân này khác nhau ở cách chọn các hàm thử. Thông thường người ta chọn hàm thử phụ thuộc vào các thông số α, β, \dots . Tìm cực tiểu của phiếm hàm $J(\alpha, \beta, \dots)$

$$J(\alpha, \beta, \dots) = \int \psi^*(q, \alpha, \beta, \dots) \hat{H} \psi(q, \alpha, \beta, \dots) dq.$$

Để tìm α, β , ta tính

$$\frac{\partial J}{\partial \alpha} = \frac{\partial J}{\partial \beta} = \dots = 0$$

và thu được α_0, β_0, \dots . Ta tìm được hàm thử $E = J(\alpha_0, \beta_0, \dots)$ rất gần E_0 và hàm sóng $\psi_0(q, \alpha_0, \beta_0, \dots)$ rất gần với ψ_0 . Ta tiếp tục tìm E_1, ψ_1, E_2, ψ_2 khi đã biết E_0, ψ_0

$$E_1 = \min \int \psi_1^* \hat{H} \psi_1 dq,$$

với điều kiện $\int |\psi_1|^2 dq = 1, \int \psi_1^* \psi_0 dq = 0.$

$$E_2 = \min \int \psi_2^* \hat{H} \psi_2 dq,$$

với điều kiện $\int |\psi_2|^2 dq = 1, \int \psi_2^* \psi_1 dq = \int \psi_2^* \psi_0 dq = 0.$

Để cụ thể, ta xét thí dụ sau:

Dùng phương pháp biến phân để tìm trị riêng và hàm riêng của toán tử \hat{H} của dao động điều hoà một chiều

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2,$$

ta tìm hàm thử. Trước hết có nhận xét là hàm thử phải thoả mãn các điều kiện chuẩn, trong đó có điều kiện $\psi \rightarrow 0$ khi $x \rightarrow \pm\infty$.

Hàm sóng của trạng thái cơ bản không có nút (xem phần dao động điều hoà) có dạng

$$\psi(x, \alpha) = A \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha x^2\right)$$

Điều kiện $\int |\psi|^2 dq = 1$ cho ta $A = (\alpha/\pi)^{1/4}$, vậy

$$J(\alpha) = \int \psi^* \hat{H} \psi dx = \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2 \alpha}{m} + \frac{m\omega^2}{\alpha} \right).$$

$$\frac{\partial J(\alpha)}{\partial \alpha} = 0 \implies \alpha_0 = \frac{m\omega}{\hbar}$$

Trong trạng thái cơ bản $E_0 = J(\alpha_0) = (\hbar\omega)/2$ và hàm sóng

$$\psi_0 = \psi(x, \alpha_0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right).$$

Tìm tiếp E_1, ψ_1 . Hàm ψ_1 phải trực giao với ψ_0 . Chọn

$$\psi_1(x, \beta) = Bx \exp\left(-\frac{1}{2}\beta x^2\right),$$

trong đó $B^2 = (2/\sqrt{\pi})\beta^{3/2}$, do điều kiện chuẩn hoá $\int |\psi_1|^2 dx = 1$. Còn

$$J(\beta) = \int \psi_1^* \hat{H} \psi_1 dx,$$

với điều kiện cực tiểu

$$\frac{\partial J(\beta)}{\partial \beta} = 0 \implies \beta_0 = \frac{m\omega}{\hbar}.$$

Cuối cùng ta thu được

$$E_1 = J(\beta_0) = \frac{3}{2}\hbar\omega,$$

$$\psi_1 = \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/4} x \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right).$$

2.7.2 Phương pháp trường tự hợp Hartree-Fok

a) Phương pháp trường tự hợp Hartree:

Để nghiên cứu hệ nhiều điện tử, người ta dùng rộng rãi *phương pháp trường tự hợp*. Nội dung phương pháp này như sau: Trong phép gần đúng cấp không, tất cả các điện tử được coi như chuyển động độc lập với nhau trong trường hạt nhân. Dựa vào các hàm sóng trong phép gần đúng cấp không, ta tìm được mật độ điện tích và trường tĩnh điện trung bình gây ra bởi tất cả các điện tử.

Trong phép gần đúng tiếp theo, mỗi điện tử được coi như chuyển động trong trường hạt nhân và trường gây bởi các điện tử còn lại. Nghiệm của phương trình Schrödinger trong trường này cho ta hàm sóng trong phép gần đúng cấp một.

Để thu được phương trình Schrödinger trong trường tự hợp, người ta dùng phương pháp biến phân. Để cụ thể, ta xét nguyên tử Heli và giả thiết rằng mỗi điện tử đều ở trạng thái s . Ta cũng không yêu cầu phải đối xứng hoá hệ hàm sóng của hệ các điện tử. Trong phép gần đúng cấp không, cả hai điện tử được mô tả bằng các hàm sóng thực $\psi_1(\vec{r}_1)$ và $\psi_2(\vec{r}_2)$, còn hàm sóng của nguyên tử có dạng

$$\psi = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2). \quad (2.144)$$

Trong phép gần đúng (2.144), ta lấy biến phân các hàm ψ_1 và ψ_2 độc lập với nhau. Phép tính cho

$$\left. \begin{aligned} \int \delta\psi_1 \left[\int \psi_2 \left(\hat{H} - E \right) \psi_1 \psi_2 dV_2 \right] dV_1 &= 0, \\ \int \delta\psi_2 \left[\int \psi_1 \left(\hat{H} - E \right) \psi_1 \psi_2 dV_1 \right] dV_2 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (2.145)$$

Do tính tùy ý của các biến phân, ta suy ra

$$\left. \begin{aligned} \int \psi_2 \left(\hat{H} - E \right) \psi_1 \psi_2 dV_2 &= 0, \\ \int \psi_1 \left(\hat{H} - E \right) \psi_1 \psi_2 dV_1 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (2.146)$$

Thay \hat{H} từ (2.110), ta đi tới các phương trình sau, gọi là *phương trình tự hợp Hartree*

$$\left. \begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{2e^2}{r_1} + \left(\int \psi_2^2 \frac{e^2}{r_{12}} dV_2 \right) \right] \psi_1 &= E_1 \psi_1, \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_2} + \left(\int \psi_1^2 \frac{e^2}{r_{12}} dV_1 \right) \right] \psi_2 &= E_2 \psi_2, \end{aligned} \right\} \quad (2.147)$$

ở đây ta ký hiệu $E_1 = E - H_{22}$, $E_2 = E - H_{11}$ và

$$H_{ii} = \int \psi_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{2e^2}{r_i} \right) \psi_i dV_i, \quad i = 1, 2,$$

trong đó E là năng lượng toàn phần của hệ hai điện tử trong trường hạt nhân, E_1, E_2 là năng lượng của các điện tử riêng lẻ.

Các phương trình (2.147) chứng tỏ trong thế năng của mỗi điện tử có xuất hiện các số hạng bổ sung

$$g_1(\vec{r}_1) = \int \psi_2^2 \frac{e^2}{r_{12}} dV_2 = e \int \frac{\rho_2(\vec{r}_2)}{r_{12}} dV_2, \quad (2.148)$$

$$g_2(\vec{r}_2) = \int \psi_1^2 \frac{e^2}{r_{12}} dV_1 = e \int \frac{\rho_1(\vec{r}_1)}{r_{12}} dV_1, \quad (2.149)$$

trong đó $\rho_i = e|\psi_i|^2$, $i = 1, 2$ là mật độ điện tích gây ra bởi một điện tử tại điểm có tọa độ \vec{r}_i .

Năng lượng toàn phần của hệ bằng

$$E = \int \psi \hat{H} \psi dV,$$

$$E = \int \psi_1 \psi_2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi_1 \psi_2 dV_1 dV_2$$

$$E = E_1 + E_2 - \bar{G}. \quad (2.150)$$

Trong đó

$$\bar{G} = e^2 \int \frac{\psi_1^2 \psi_2^2}{r_{12}} dV_1 dV_2 = \int \frac{\rho_1 \rho_2}{r_{12}} dV_1 dV_2 \quad (2.151)$$

là năng lượng tương tác tĩnh điện giữa các điện tử. Từ (2.147), ta nhận thấy trong biểu thức của E_1, E_2 đều có mặt năng lượng tương tác giữa các điện tử, do đó trong tổng $E_1 + E_2$, năng lượng này được tính đến hai lần. Như vậy năng lượng E của hệ phải là $E_1 + E_2 - \bar{G}$. Nếu hệ gồm N điện tử, bằng lập luận tương tự, ta thu được phương trình tự hợp Hartree cho điện tử thứ i trong trạng thái lượng tử n_i :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + U(\vec{r}_i) + \sum_k e_i \int e_k \frac{|\psi_{nk}|^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_k|} dV_k \right] \psi_{n_i} = E_{n_i} \psi_{n_i}. \quad (2.152)$$

a) Phương pháp trường tự hợp Hartree-Fok

Phương pháp trường tự hợp có xét đến sự đối xứng hay phản xứng của hàm sóng được gọi là *phương pháp trường tự hợp Hartree-Fok*. Trong trường hợp đơn giản nhất của hệ hai điện tử, tất cả phép tính trên đều được chuyển dễ dàng cho hàm sóng đã đối xứng hoá

$$\psi_s(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(1)\psi_2(2) + \psi_2(1)\psi_1(2)], \quad (2.153)$$

$$\psi_a(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(1)\psi_2(2) - \psi_2(1)\psi_1(2)]. \quad (2.154)$$

Trong phép gần đúng cấp không, ở trạng thái cơ bản của nguyên tử Heli, hai điện tử ở trạng thái đồng dạng Hydro 1s. Trạng thái này được ký

hiệu ngắn gọn dưới dạng $(1s)^2$. Trong (...) có nêu trạng thái điện tử, còn số mũ nêu số các điện tử ở trong trạng thái đó. Một sự biểu diễn như thế được gọi là cấu hình điện tử. Trạng thái kích thích thứ nhất của nguyên tử Heli sẽ tương ứng với cấu hình $(1s)^1(2s)^1$. Các hàm sóng $\psi_s(1, 2)$ và $\psi_a(1, 2)$ thuộc về sơ đồ Young [2] và [1,1]. Hàm sóng toàn phần (tích của hàm tọa độ và hàm spin) phải là phản xứng, do đó hàm tọa độ đối xứng ψ_s phải ứng với trạng thái có các spin đối song (spin toàn phần bằng không), đó là các *para trạng thái*; còn hàm sóng tọa độ phản xứng ψ_a ứng với trạng thái spin có các spin song song (spin toàn phần bằng 1), do đó là các *ortho trạng thái*.

Trong phép gần đúng cấp không, các para và ortho trạng thái với cấu hình $(1s)^1(2s)^1$ có cùng năng lượng. Tuy nhiên, nếu xét đến tương tác giữa các điện tử, thì năng lượng của các trạng thái này sẽ khác nhau: năng lượng của para trạng thái ψ_{para} hơi lớn hơn năng lượng của ortho trạng thái ψ_{orth} . Có thể thấy được điều đó từ những nhận định định tính đơn giản: Từ dạng $\psi_{para}(1, 2)$ và $\psi_{orth}(1, 2)$, suy ra rằng khi hai điện tử có tọa độ trùng nhau thì hàm $\psi_{orth}(1, 2) = 0$ còn hàm $\psi_{para}(1, 2)$ cực đại. Như vậy trong trạng thái $\psi_{orth}(1, 2)$, các điện tử thường ở xa nhau hơn so với khi chúng ở trong trạng thái $\psi_{para}(1, 2)$. Do đó năng lượng đẩy Coulomb trung bình của các điện tử trong trạng thái $\psi_{orth}(1, 2)$ bé hơn năng lượng ở trong trạng thái $\psi_{para}(1, 2)$. Thế thì sự khác nhau về năng lượng của các trạng thái para và ortho của cấu hình $(1s)^1(2s)^1$ là hệ quả của sự tương giao trong chuyển động của các điện tử, xuất hiện từ các điều kiện về tính đối xứng của các hàm sóng đối với sự hoán vị các tọa độ không gian. Nếu không xét đến tính đối xứng của các hàm sóng, thì không có sự khác biệt năng lượng như trên.

Chọn hàm ψ_a (có spin toàn phần $S=1$) làm hàm thử sao cho hàm này là gần đúng tốt nhất với hàm thực. Dùng nguyên lý biến phân, ta xét

$$\min \int \psi^* \hat{H} \psi dV \quad \text{với} \quad \int \psi^* \psi dV = 1.$$

Bài toán rút về

$$\delta \int \int \psi^* (\hat{H} - E) \psi dV_1 dV_2 = 0,$$

$$\int \int \delta \psi^* (\hat{H} - E) \psi dV_1 dV_2 = 0,$$

Thay $\psi = \psi_a$ và \hat{H} bằng biểu thức trong (2.110) rồi lấy biến phân độc lập

$\delta\psi_1, \delta\psi_2$, ta thu được hai phương trình

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - E - \frac{2e^2}{r} + H_{22} + G_{22} \right) \psi_1(\vec{r}) - [H_{21} + G_{12}] \psi_2(\vec{r}) = 0, \quad (2.155)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - E - \frac{2e^2}{r} + H_{11} + G_{11} \right) \psi_2(\vec{r}) - [H_{12} + G_{12}] \psi_1(\vec{r}) = 0, \quad (2.156)$$

với

$$G_{ik}(\vec{r}_1) = \int \psi_i(\vec{r}_2) \psi_k(\vec{r}_2) \frac{e^2}{r_{12}} dV_2,$$

$$H_{ik} = \int \psi_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{2e^2}{r} \right) \psi_k dV.$$

các phương trình (2.155), (2.156) thu được bằng phương pháp trường tự hợp Hartree-Fok. So sánh chúng với các phương trình tự hợp Hartree (2.147), ta nhận thấy trong các phương trình Hartree-Fok có thêm các tích phân trao đổi, là các tích phân dạng G_{ik} . Phương pháp trường tự hợp được ứng dụng rộng rãi để tính hàm riêng và năng lượng của các nguyên tử phức tạp và cho kết quả rất phù hợp với thực nghiệm. Tuy nhiên, việc giải phương trình Hartree-Fok phải dùng phương pháp tính số và sử dụng máy tính.

Chương 3

Lý thuyết tán xạ lượng tử

Sự tán xạ là sự va chạm của các hạt. Đây là một quá trình rất cơ bản trong vật lý vi mô. Ở đây va chạm được hiểu là tương tác trong quá trình dịch chuyển đối với nhau. Ở trạng thái ban đầu hai hạt từ khoảng cách rất xa tiến lại gần nhau, trong quá trình ấy tương tác làm thay đổi trạng thái chuyển động của chúng. Sau quá trình, hai hạt lại chuyển động rời xa nhau ra cho tới lúc tương tác giữa chúng trở thành không đáng kể. Ta gọi trạng thái này là trạng thái cuối cùng của quá trình tán xạ. Nếu các hạt ở trạng thái cuối cùng chỉ khác với trạng thái đầu về xung lượng mà không có thay đổi về loại hạt cũng như trạng thái bên trong thì tán xạ gọi là *tán xạ đàn hồi*. Nếu có sự thay đổi về loại hạt hoặc về trạng thái bên trong thì tán xạ được gọi là *tán xạ không đàn hồi*.

Thông thường, để thuận tiện, thay cho diễn biến của quá trình tán xạ theo thời gian, người ta xét bài toán dừng tương đương với giả thiết cho rằng có một dòng liên tục các hạt bay từ vô cực đến tương tác với tâm tán xạ, sau đó biến thành một dòng các hạt tán xạ từ tâm bay ra mọi phía. Mật độ trong dòng phải đủ nhỏ để có thể bỏ qua tương tác giữa các hạt tới. Trong bài toán tán xạ dừng, nếu biết được trường lực tán xạ, ta sẽ tính được dòng các hạt tán xạ (tại khoảng cách vô cùng so với tâm tán xạ) như là hàm của dòng các hạt tới.

3.1 Biên độ tán xạ và tiết diện tán xạ

3.1.1 Tiết diện tán xạ

Sự tán xạ được đặc trưng bằng tiết diện tán xạ vi phân $d\sigma(\theta, \varphi)$

$$d\sigma(\theta, \varphi) = \frac{dN_{tx}(\theta, \varphi)}{j_t}, \quad (3.1)$$

trong đó $dN_{tx}(\theta, \varphi)$ là số các hạt tán xạ trong một đơn vị thời gian trong góc khối $d\Omega(\theta, \varphi)$ lấy theo phương (θ, φ) ; j_t là mật độ dòng các hạt tới. Ta chọn trục z theo phương chuyển động của các hạt tới (hình 3.1).

Gọi $j_{tx}(r, \theta, \varphi)$ là mật độ dòng các hạt tán xạ tại các khoảng cách r lớn so với tâm tán xạ, ta có:

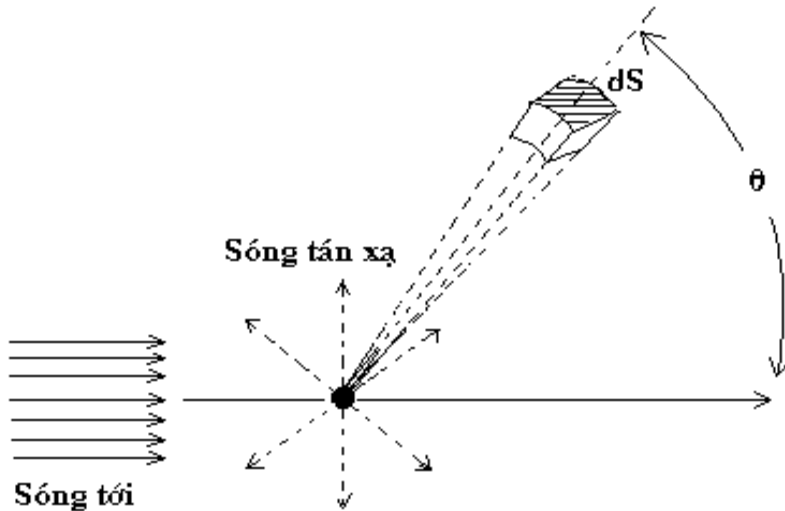
$$dN_{tx}(\theta, \varphi) = j_{tx}(r, \theta, \varphi)dS,$$

trong đó dS là diện tích vi cấp vuông góc với bán kính vectơ vạch từ tâm tán xạ dưới các góc (θ, φ) . Độ lớn của dS và phần tử góc khối tương ứng $d\Omega$ có mối liên hệ

$$dS = r^2 d\Omega. \quad (3.2)$$

Do đó, tiết diện tán xạ vi phân được xác định bằng công thức

$$d\sigma = \frac{j_{tx}}{j_t} dS = \frac{j_{tx}}{j_t} r^2 d\Omega. \quad (3.3)$$



Hình 3.1

Trong cơ học lượng tử, j_{tx} và j_t theo thứ tự được gọi là mật độ dòng xác suất tán xạ và mật độ dòng xác suất tới.

Từ (3.3), ta thu được đại lượng

$$\sigma = \frac{1}{j_t} \oint_{S_r} j_{tx}(r, \theta, \varphi) dS_r = \frac{\Phi_{tx}}{j_t}. \quad (3.4)$$

được gọi là *tiết diện tán xạ hiệu dụng toàn phần*. Trong đó, $ds_r = r^2 d\Omega$ là độ lớn của phần tử diện tích vi cấp tại khoảng cách r so với tâm tán xạ ứng với

góc khối $d\Omega$; $\Phi_{tx} = \oint j_{tx} dS_r$ là dòng hạt tán xạ qua một mặt kín bao quanh tâm tán xạ, mặt lấy tích phân được giả thiết ở cách tâm tán xạ, do đó có thể coi tại mỗi điểm của mặt này, các hạt tán xạ bay theo phương xuyên tâm.

Theo (3.4), tiết diện tán xạ hiệu dụng toàn phần là tỷ số giữa xác suất tán xạ toàn phần của hạt (trong một đơn vị thời gian) và mật độ dòng xác suất trong chùm hạt tới.

Khi tương tác giữa các hạt chỉ phụ thuộc vào khoảng cách giữa chúng, thì bài toán về chuyển động của hai hạt có thể quy về hai bài toán chuyển động một hạt: Một bài toán xét chuyển động của một hạt với khối lượng rút gọn $m^* = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ đối với tâm quán tính. Còn bài toán thứ hai xét chuyển động tự do của tâm quán tính. Nghiệm của bài toán thứ nhất cho ta góc tán xạ θ trong hệ tâm quán tính. Việc chuyển từ hệ tâm quán tính sang hệ phòng thí nghiệm được thực hiện bằng các công thức

$$\operatorname{tg}\theta_1 = \frac{m_2 \sin \theta}{m_1 + m_2 \cos \theta}, \quad \theta_2 = \frac{\pi - \theta}{2}, \quad (3.5)$$

trong đó θ_1 là góc tán xạ của hạt thứ nhất, θ_2 là góc giạt lùi của hạt thứ hai được xác định trong hệ phòng thí nghiệm, còn θ là góc lệch của hạt thứ nhất trong hệ tâm quán tính. Trong chương này, ta chỉ khảo sát sự tán xạ trong hệ tâm quán tính của các hạt va chạm.

3.1.2 Biên độ tán xạ

Chúng ta xét bài toán tán xạ dừng của hạt tán xạ tại tâm của trường lực. Chọn tâm tán xạ cố định tại gốc tọa độ. Trục z hướng theo phương của các dòng hạt tới.

Ở xa tâm lực, hạt tới chuyển động tự do, do đó năng lượng của hạt bao giờ cũng dương, có phổ liên tục do không bị lượng tử hoá, hàm sóng của hạt có dạng sóng phẳng

$$\psi_t = e^{ikz}. \quad (3.6)$$

Tương tác của hạt với tâm lực có thể được mô tả bằng hàm thế $\hat{U}(r)$, giả thiết rằng hàm này chỉ khác không trong một miền không gian hữu hạn có $r \leq a$, mà ta gọi là *miền tác dụng lực*. Trong miền này, hạt bị tán xạ, do đó hàm sóng của hạt thay đổi.

Tuy nhiên, sau đó hạt tán xạ lại bay ra xa khỏi tâm lực, nó lại chuyển động tự do. Vì dòng hạt tán xạ bao giờ cũng có phương đi qua tâm tán xạ, nên chuyển động của hạt tán xạ phải được mô tả bằng một sóng cầu phân

kỳ

$$\psi_{tx} = A(\theta, \varphi) \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r}, \quad (3.7)$$

trong đó r, θ, φ là các tọa độ cầu; $A(\theta, \varphi)$ được gọi là *biên độ tán xạ*, nói chung phụ thuộc vào góc θ, φ . Trong tán xạ đàn hồi, k có giá trị như nhau trong các biểu thức (3.6) và (3.7).

3.1.3 Tán xạ đàn hồi của các hạt không có spin

Ở trong miền tác dụng của lực chuyển động ($r \leq a$), hạt tán xạ tuân theo phương trình

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + \hat{U}(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (3.8)$$

trong đó m_0 là khối lượng của hạt tán xạ. Chia hai vế (3.8) cho $\hbar^2/(2m_0)$ và chuyển vế số hạng thứ nhất bên phải của phương trình, đặt

$$k^2 = \frac{2m_0 E}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2}, \quad (3.9)$$

ta suy ra dạng mới của (3.8)

$$(\nabla^2 + k^2) \psi(\vec{r}) = \frac{2m_0}{\hbar^2} \hat{U}(\vec{r})\psi(\vec{r}). \quad (3.10)$$

Nghiệm của phương trình (3.10) tại các khoảng cách xa so với tâm tán xạ ($r \gg a \Rightarrow \hat{U}(\vec{r}) = 0$), bằng tổng các hàm ψ_t và ψ_{tx}

$$\psi = e^{ikz} + A(\theta, \varphi) \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r}. \quad (3.11)$$

Trong biểu thức (3.11), số hạng thứ nhất bên phải được viết trong tọa độ Descartes, mô tả chuyển động của hạt tới; còn số hạng thứ hai được viết trong hệ tọa độ cầu mô tả chuyển động của các hạt tán xạ.

Mật độ dòng của các hạt tới

$$\vec{j}_t = \frac{\hbar}{2m_0 i} (\psi_t^* \nabla \psi_t - \psi_t \nabla \psi_t^*). \quad (3.12)$$

Do chỉ phụ thuộc vào z nên nếu gọi \vec{e}_z là vectơ đơn vị theo phương z , thì

$$\vec{j}_t = \frac{\hbar \vec{e}_z}{2m_0 i} \left(\psi_t^* \frac{\partial \psi_t}{\partial z} - \psi_t \frac{\partial \psi_t^*}{\partial z} \right) = \frac{\hbar \vec{k}}{m_0} = \vec{v}_0, \quad (3.13)$$

trong đó \vec{v}_0 là vận tốc hạt tới. Rõ ràng hàm sóng ψ_t được chuẩn hoá sao cho mật độ dòng các hạt tới về trị số bằng vận tốc của hạt tới ở vô cực.

Gradient trong hệ toạ độ cầu được xác định bằng công thức

$$\nabla\psi = \frac{\partial\psi}{\partial r}\vec{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\vec{e}_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\vec{e}_\varphi. \quad (3.14)$$

Ta chỉ xét thành phần xuyên tâm \vec{j}_r của dòng hạt tán xạ, nên

$$\vec{j}_r = \frac{\hbar}{2m_0i}(\psi_{tx}^*\nabla\psi_{tx} - \psi_{tx}\nabla\psi_{tx}^*) = \frac{\hbar\vec{e}_r}{2m_0i}\left(\psi_{tx}^*\frac{\partial\psi_{tx}}{\partial r} - \psi_{tx}\frac{\partial\psi_{tx}^*}{\partial r}\right). \quad (3.15)$$

Thay $\psi_{tx} = A(\theta, \varphi)e^{i\vec{k}\vec{r}}/r$, ta thu được

$$\vec{j}_r = \frac{\hbar\vec{k}}{m_0r^2}|A(\theta, \varphi)|^2. \quad (3.16)$$

Thế kết quả tính được ở (3.13) và (3.16) vào (3.3), ta thu được biểu thức cho tiết diện tán xạ vi phân

$$d\sigma(\theta, \varphi) = |A(\theta, \varphi)|^2 \frac{dS}{r^2} = |A(\theta, \varphi)|^2 d\Omega. \quad (3.17)$$

Như vậy việc xác định tiết diện tán xạ vi phân quy về việc tìm biên độ tán xạ. Việc tính biên độ tán xạ thường được tiến hành như sau: Tìm nghiệm của phương trình Schrödinger cho chuyển động của hạt trong trường của tâm tán xạ. Tại các khoảng cách xa tâm, nghiệm có dạng (3.11). Khi đó hệ số của nhân tử $\exp(i\vec{k}\vec{r})/r$ cho ta biên độ tán xạ cần tìm.

Dựa vào phương pháp hàm Green, có thể viết nghiệm của phương trình (3.10) dưới dạng

$$\psi = \psi_0 + \int G(\vec{r}, \vec{r}') \frac{2m_0}{\hbar^2} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3r', \quad (3.18)$$

trong đó $G(\vec{r}, \vec{r}')$ là hàm Green mà ta sẽ xác định sau, còn ψ_0 là nghiệm của phương trình không có vế sau

$$\left(\nabla^2 + \vec{k}^2\right)\psi_0 = 0,$$

nghiệm của phương trình này có dạng sóng phẳng $\exp(i\vec{k}\vec{r}) = \exp(ikz)$. Đặt $F(\vec{r}) = (2m_0U/\hbar^2)\psi(\vec{r})$, phương trình (3.10) trở thành

$$\left(\nabla^2 + \vec{k}^2\right)\psi(\vec{r}) = F(\vec{r}), \quad (3.19)$$

Đặt

$$\psi(\vec{r}) = \int_{V_{\vec{q}}} A_{\vec{q}} \varphi_{\vec{q}} d^3q, \quad (3.20)$$

trong đó

$$\varphi_{\vec{q}}(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}}}{(2\pi)^{3/2}}. \quad (3.21)$$

Coi \vec{q} là một vectơ nào đó với các thành phần q_x, q_y, q_z còn $d^3q = dq_x dq_y dq_z$.

Hệ hàm $\varphi_{\vec{q}}(\vec{r})$ là một hệ hàm trực chuẩn, nghĩa là

$$\int \varphi_{\vec{q}'}^*(\vec{r}) \varphi_{\vec{q}}(\vec{r}) d^3r = \delta(\vec{q}' - \vec{q}). \quad (3.22)$$

Để tìm $A_{\vec{q}}$, ta thay (3.21) vào vế trái của (3.19)

$$\left(\nabla^2 + \vec{k}^2\right) \int A_{\vec{q}} \varphi_{\vec{q}} d^3q = \int \left[\nabla^2 (A_{\vec{q}} \varphi_{\vec{q}}(\vec{r})) + k^2 A_{\vec{q}} \varphi_{\vec{q}}(\vec{r})\right] d^3q. \quad (3.23)$$

Dùng (3.19) và chú ý rằng dòng tán xạ xuyên tâm nên

$$\nabla^2 (e^{i\vec{q}\vec{r}}) = \frac{\partial^2}{\partial r^2} e^{i\vec{q}\vec{r}} = -q^2 e^{i\vec{q}\vec{r}},$$

toán tử $\nabla^2 = (\partial^2)/(\partial r^2)$ không tác dụng lên $A_{\vec{q}}(\theta, \varphi)$, ta viết lại (3.23)

$$\left(\nabla^2 + \vec{k}^2\right) \int A_{\vec{q}} \varphi_{\vec{q}} d^3q = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \left(\nabla^2 + \vec{k}^2\right) A_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} d^3q. \quad (3.24)$$

Theo đó phương trình (3.19) trở thành

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int A_{\vec{q}} (k^2 - q^2) e^{i\vec{q}\vec{r}} d^3q = F(\vec{r}). \quad (3.25)$$

Nhân hai vế (3.25) với $\psi_{\vec{q}'}^*(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(-i\vec{q}'\vec{r})$ rồi lấy tích phân theo d^3r trên toàn vùng giá trị của \vec{r} , ta được

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi)^3} \int A_{\vec{q}} (k^2 - q^2) e^{i(\vec{q}-\vec{q}')\vec{r}} d^3q d^3r &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int F(\vec{r}) e^{-i\vec{q}'\vec{r}} d^3r, \\ \frac{1}{(2\pi)^3} \int A_{\vec{q}} (k^2 - q^2) e^{i(\vec{q}-\vec{q}')\vec{r}} d^3q d^3r &= \int A_{\vec{q}} (k^2 - q^2) \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\vec{q}-\vec{q}')\vec{r}} d^3r \right) d^3q, \\ &= \int A_{\vec{q}} (k^2 - q^2) \delta(\vec{q} - \vec{q}') d^3q, \end{aligned}$$

$$= A_{\vec{q}} (k^2 - q^2),$$

Theo đó (3.25) trở thành

$$A_{\vec{q}} (k^2 - q^2) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int F(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} d^3r,$$

hay

$$A_{\vec{q}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{k^2 - q^2} \int F(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} d^3r,$$

chuyển \vec{q}' thành \vec{q} ta có biểu thức cho biên độ tán xạ

$$A_{\vec{q}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{k^2 - q^2} \int F(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} d^3r \quad (3.26)$$

Thay kết quả tính được này vào (3.20) và lưu ý (3.21), ta có

$$\psi(\vec{r}) = \int \int \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{k^2 - q^2} F(\vec{r}') e^{-i\vec{q}\vec{r}'} \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}}}{(2\pi)^{3/2}} d^3q d^3r', \quad (3.27)$$

Lưu ý rằng \vec{r}' trong $\int \dots d^3r'$ là biến tích phân, còn \vec{r} trong $\psi(\vec{r})$ là tọa độ của hàm ψ . Từ (3.27), ta viết được

$$\psi(\vec{r}) = \int F(\vec{r}') \left[\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}')}}{k^2 - q^2} d^3q \right] d^3r'. \quad (3.28)$$

Đặt

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}')}}{k^2 - q^2} d^3q, \quad (3.29)$$

thì (3.28) có thể viết lại thành

$$\psi(\vec{r}) = \int F(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') d^3r'. \quad (3.30)$$

Bây giờ ta xét ý nghĩa hàm Green.

Dạng của $\psi(\vec{r})$ tùy thuộc vào dạng của số hạng $F(\vec{r}')$, còn hàm Green $G(\vec{r}, \vec{r}')$ là một hàm có thể tính được. Cụ thể nếu cho

$$F(\vec{r}') = \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}'),$$

thì

$$\psi(\vec{r}) = \int \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') d^3r' = G(\vec{r}, \vec{r}_0).$$

Như vậy, hàm Green $G(\vec{r}, \vec{r}_0)$ là nghiệm của phương trình

$$(\nabla^2 + k^2) \psi(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$$

Biểu thức của hàm Green theo (3.29) có dạng

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}')}}{k^2 - q^2} d^3q,$$

vectơ \vec{q} thể hiện ở biến tích phân, \vec{r}, \vec{r}' là hai bán kính vectơ tùy ý. Ta chọn thành phần \vec{q}_z trùng phương với $\vec{r} - \vec{r}'$, còn $d^3q = q^2 dq \sin \theta d\theta d\varphi$

$$\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}') = q|\vec{r} - \vec{r}'| \cos \theta = q\chi \cos \theta,$$

trong đó ta đặt $\chi = |\vec{r} - \vec{r}'|$. Do đó

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \int \int \frac{e^{iq\chi \cos \theta}}{k^2 - q^2} q^2 \sin \theta dq d\theta d\varphi = -\frac{e^{ik\chi}}{4\pi\chi},$$

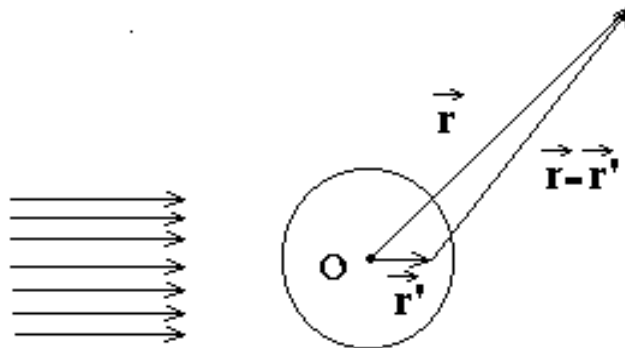
$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|}. \tag{3.31}$$

Vậy (3.30) bây giờ có thể viết

$$\psi_r(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int F(\vec{r}') \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3r'. \tag{3.32}$$

Đây là nghiệm riêng của phương trình Schrödinger có vế sau. Nghiệm tổng quát của phương trình là tổng của hai nghiệm

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} + \psi_r(\vec{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int F(\vec{r}') \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3r'. \tag{3.33}$$



Hình 3.2

Xét trường hợp miền tác dụng của lực là một hệ có kích thước nhỏ $|\vec{r}'| \ll |\vec{r}|$, tại miền đó $U(\vec{r}') \neq 0$, ngoài miền đó $U(\vec{r}') = 0$. Từ hình vẽ 3.2, ta có $|\vec{r} - \vec{r}'| = r - r' \cos \alpha$ vì

$$r' \cos \alpha = \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r} \quad \text{nên} \quad |\vec{r} - \vec{r}'| \approx r - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r}$$

Do đó

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} + \psi_r(\vec{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int F(\vec{r}') \frac{e^{ik(r - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r})}}{(r - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r})} d^3 r'. \quad (3.34)$$

Nếu ta xem $|\vec{r} - \vec{r}'| \approx r$ và gọi $\vec{n} = \vec{r}/r$, $\vec{k} \cdot (\vec{r}/r) = k\vec{n} = \vec{k}_r$ là vectơ sóng hướng theo phương bán kính vectơ, nó đặc trưng cho phương truyền sóng của sóng cầu phân kỳ. Vì tán xạ đàn hồi nên $|\vec{k}_n| = k$. Thay $F(\vec{r}') = (2m_0 U/\hbar^2)\psi(\vec{r}')$ và các khai triển trên vào (3.33), ta được

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} - \frac{e^{i\vec{k}_r \vec{r}}}{4\pi r} \int \frac{2m_0 U(\vec{r}')}{\hbar^2} \psi(\vec{r}') e^{-i\vec{k}_r \vec{r}'} d^3 r', \quad (3.35)$$

hay

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} + A(\theta, \varphi) \frac{e^{i\vec{k}_r \vec{r}}}{r}, \quad (3.36)$$

trong đó

$$A(\theta, \varphi) = -\frac{m_0}{2\pi\hbar^2} \int U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') e^{-i\vec{k}_r \vec{r}'} d^3 r'. \quad (3.37)$$

Về mặt lý thuyết, nếu biết được biên độ tán xạ $A(\theta, \varphi)$, ta sẽ tính được tiết diện tán xạ hiệu dụng. Mặt khác, trong $A(\theta, \varphi)$ có thể năng tương tác $U(\vec{r})$, do đó nếu biết được $U(\vec{r})$ ta sẽ tính được $A(\theta, \varphi)$ và tính được tiết diện vi phân $d\sigma$. Về mặt thực nghiệm, ta đo được $d\sigma$, nên tính được biên độ tán xạ $A(\theta, \varphi)$, từ đó tính được thế năng $U(\vec{r})$. Đó là phương pháp thực nghiệm để khảo sát những thế năng tương tác $U(\vec{r})$ chưa biết.

3.2 Tán xạ đàn hồi trong phép gần đúng Born

Tuy đã tìm được biểu thức tiệm cận của hàm sóng, nhưng vẫn chưa thu được dạng cụ thể của biên độ tán xạ. Thực vậy, theo công thức (3.37), biên độ tán xạ lại được biểu diễn qua hàm sóng $\psi(\vec{r})$. Việc giải chính xác phương trình Schrödinger và việc tìm $A(\theta, \varphi)$ trong phần lớn các bài toán

đều gặp khó khăn về mặt toán học. Do đó, trong lý thuyết nhiễu loạn người ta dùng rộng rãi các phương pháp gần đúng. Một trong những phép gần đúng quan trọng nhất là phương pháp gần đúng Born. Giả thiết cơ bản của phương pháp này là ở chỗ coi thế năng tương tác U của hạt tán xạ với tâm trường lực là nhỏ. Do đó có thể coi thế năng tương tác U như một nhiễu loạn nhỏ, theo đó chuyển động ban đầu của hạt ít thay đổi, phương trình tích phân (3.35) có thể giải được dễ dàng bằng phương pháp gần đúng liên tiếp.

Trong phép gần đúng cấp không, ta bỏ qua số hạng của hàm sóng có chứa thế năng:

$$\psi_0(\vec{r}) = e^{ikz} = e^{i\vec{k}_0\vec{r}}, \quad (3.38)$$

trong đó $\vec{k}_0 = k\vec{n}_0 = k\vec{e}_z$. Trong phép gần đúng cấp một, thay cho hàm sóng ở vế phải của (3.35), ta đưa vào hàm sóng ở cấp không $\psi_0(\vec{r})$. Nghĩa là:

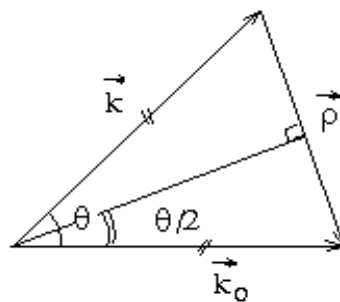
$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} - \frac{m_0 e^{i\vec{k}\vec{r}}}{2\pi\hbar^2 r} \int U(\vec{r}') e^{i(\vec{k}_0 - \vec{k})\vec{r}'} d^3r', \quad (3.39)$$

Trong phép gần đúng cấp một này, biên độ tán xạ bằng

$$A(\theta, \varphi) = -\frac{m_0}{2\pi\hbar^2} \int U(\vec{r}') e^{i\vec{\rho}\vec{r}'} d^3r', \quad (3.40)$$

trong đó ta ký hiệu

$$\vec{\rho} = \vec{k}_0 - \vec{k}. \quad (3.41)$$



Hình 3.3

Từ hình vẽ 3.3, môđun của vectơ va chạm $\vec{\rho}$ được xác định bằng hệ thức

$$\rho = k|\vec{n} - \vec{n}_0| = 2k \sin \frac{\theta}{2} = \frac{2m_0 v}{\hbar} \sin \frac{\theta}{2}. \quad (3.42)$$

Một cách tương ứng, vectơ $\vec{P} = \hbar\vec{\rho}$ được gọi là vectơ truyền xung lượng. Nếu thế năng không phụ thuộc vào các góc, nghĩa là $U = U(r)$ thì trong (3.40) có thể thực hiện phép lấy tích phân theo các góc

$$A(\theta, \varphi) = -\frac{m_0}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty U(r')r'^2 dr' \int_0^\pi e^{i\rho r' \cos\theta} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi,$$

$$A(\theta, \varphi) = -\frac{2m_0}{\hbar^2} \int_0^\infty U(r') \frac{\sin(\rho r')}{\rho r'} r'^2 dr'. \quad (3.43)$$

Trong phép gần đúng cấp một, biên độ tán xạ được xác định bằng thế năng lũy thừa một. Trường hợp đang xét có thế năng đối xứng cầu, biên độ tán xạ không phụ thuộc vào góc φ . Thay biểu thức (3.40) vào (3.17), ta có biểu thức của tiết diện tán xạ vi phân được gọi là công thức Born:

$$d\sigma = |A(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = \frac{m_0^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int_0^\infty U(r') e^{i\vec{\rho}\vec{r}'} d^3r' \right|^2 d\Omega$$

$$d\sigma = \frac{4m_0^2}{\hbar^4} \left| \int_0^\infty U(r') \frac{\sin(\rho r')}{\rho r'} r'^2 dr' \right|^2 d\Omega. \quad (3.44)$$

Công thức này được ứng dụng nhiều trong vật lý hạt nhân.

Trường hợp giá trị nhỏ của góc tán xạ thì

$$d\sigma = \frac{4m_0^2}{\hbar^4} \left| \int_0^\infty U(r') r'^2 dr' \right|^2 d\Omega \quad (3.45)$$

không phụ thuộc vào vận tốc hạt.

Tiếp tục các phép tính gần đúng kế tiếp, nghĩa là thay (3.39) vào vế phải của (3.35), ta có thể tìm được hàm sóng và biên độ tán xạ trong phép gần đúng cấp hai, được xác định bởi tích phân của bình phương thế năng tương tác. Một cách tương tự, ta có thể tìm được các hiệu chỉnh với các cấp tiếp theo.

Bây giờ, ta xét điều kiện để có thể ứng dụng được công thức Born. Thế năng tương tác của hạt tán xạ với trường tán xạ trong phép gần đúng Born được giả thiết là nhỏ và có thể xem như là một nhiễu loạn. Từ (3.10), ta có thể chứng minh được rằng thế năng $\hat{U}(\vec{r})$ được xem là nhiễu loạn nếu một trong hai điều kiện sau được thực hiện:

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{m_0 a^2} \quad (\text{với } ka \leq 1) \quad (3.46)$$

hay

$$|U| \ll \frac{\hbar v}{a} = \frac{\hbar^2}{m_0 a^2} ka \quad (\text{với } ka \gg 1), \quad (3.47)$$

trong đó a là bán kính tương tác của trường U , còn U có cấp độ lớn của trường trong miền tồn tại cơ bản của nó.

Biểu thức $\hbar^2/(m_0 a^2)$ về cấp độ lớn bằng độ sâu cực tiểu của giếng thế bán kính a , tại đó có xuất hiện mức năng lượng. Từ đó rút ra ý nghĩa đơn giản của điều kiện để có thể ứng dụng được phép gần đúng Born cho các hạt tán xạ chậm. Cụ thể từ điều kiện (3.46), suy ra rằng năng lượng tương tác trung bình phải nhỏ so với thế năng cực tiểu của hạt trong giếng thế, tại đó có hình thành trạng thái liên kết. Khi điều kiện (3.46) được thực hiện, phép gần đúng Born được ứng dụng cho tất cả các vận tốc.

3.3 Phương pháp sóng riêng phần

Ngoài lý thuyết gần đúng đã khảo sát, người ta còn phát triển một lý thuyết tán xạ chính xác gọi là *lý thuyết tán xạ pha* hay *lý thuyết tán xạ các sóng riêng phần*. Trong lý thuyết này, người ta không có một giả thiết nào cho thế năng tương tác U . Vì vậy, nó được ứng dụng với mọi giá trị năng lượng của các hạt tán xạ. Sơ đồ chung của lý thuyết tán xạ các sóng riêng phần không khác với sơ đồ đã mô tả trong các tiết trước. Hàm sóng của hạt tán xạ ở xa tâm có dạng

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} + A(\theta) \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r}, \quad (3.48)$$

do trường tán xạ đối xứng xuyên tâm theo phương z nên biên độ tán xạ không thể phụ thuộc vào góc φ . Cả hàm sóng ψ cũng không phụ thuộc vào φ . Tuy $U(\vec{r}) = U(r)$, nhưng nghiệm ψ của phương trình Schrödinger của hệ khác với nghiệm của hàm sóng trong trường xuyên tâm ở chỗ là ở đây chúng ta chỉ xét chuyển động vô hạn và các nghiệm phải thỏa mãn các điều kiện biên sao cho đáng điệu của nghiệm (với $r \rightarrow \infty$) phải được xác định bởi công thức (3.48).

Ta đã biết trong trường đối xứng xuyên tâm, nghiệm tổng quát của phương trình Schrödinger có dạng

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{\ell, m} b_{\ell m} R_{\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad (3.49)$$

trong đó $b_{\ell m}$ là các hệ số không đổi xác định bằng các điều kiện biên và điều kiện chuẩn hoá. Do không phụ thuộc vào góc φ nên hàm sóng chỉ còn lại các số hạng trong tổng có $m = 0$, nghĩa là chỉ có các hàm cầu

$$Y_{\ell 0}(\theta) = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi}} P_{\ell}(\cos \theta), \quad (3.50)$$

trong đó $P_{\ell}(x)$ là đa thức Legendre xác định bởi công thức

$$P_{\ell}(x) = \frac{1}{\ell! 2^{\ell}} \frac{d^{\ell}}{dx^{\ell}} [(x^2 - 1)^{\ell}]. \quad (3.51)$$

Do đó công thức (3.49) trở thành

$$\psi(r, \theta) = \sum_{\ell} b_{\ell} R_{\ell}(r) P_{\ell}(\cos \theta). \quad (3.52)$$

Mỗi số hạng trong tổng (3.52) được gọi là sóng riêng phần thứ ℓ . Như vậy, mọi nghiệm của phương trình (3.10) trong trường hợp này có thể được biểu diễn dưới dạng chồng chất các hàm sóng của phổ liên tục (chuyển động vô hạn), tương ứng với chuyển động trong trường đã cho của các hạt có năng lượng $(\hbar^2 k^2)/(2m_0)$ với các giá trị ℓ khác nhau của mômen quỹ đạo có hình chiếu $m = 0$.

Dạng tiệm cận của $\psi(r, \theta)$ khi $r \rightarrow \infty$ là

$$\psi(r \rightarrow \infty, \theta) \approx \sum_{\ell=0}^{\infty} b_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) \frac{a_{\ell} \sin(kr + \delta_{\ell} - \pi\ell/2)}{r}.$$

Đưa ký hiệu $b_{\ell} a_{\ell} = C_{\ell}/k$, công thức trên trở thành

$$\psi(r \rightarrow \infty, \theta) \approx \sum_{\ell=0}^{\infty} C_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) \frac{\sin(kr + \delta_{\ell} - \pi\ell/2)}{kr}. \quad (3.53)$$

Khai triển hàm $\exp(ikz)$ trong (3.48) theo các đa thức Legendre, ta có

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} f_{\ell}(r) P_{\ell}(\cos \theta). \quad (3.54)$$

Để tính được $f_{\ell}(r)$, ta đổi biến số $x = \cos \theta$, (3.54) trở thành

$$e^{ikz} = e^{ikrx} = \sum_{\ell=0}^{\infty} f_{\ell}(r) P_{\ell}(x). \quad (3.55)$$

Nhân $P_{\ell'}(x)$ với (3.55) rồi lấy tích phân theo x , ta có

$$\int_{-1}^1 e^{ikrx} P_{\ell'}(x) dx = \sum_{\ell=0}^{\infty} f_{\ell}(r) \int_{-1}^1 P_{\ell'}(x) P_{\ell}(x) dx = \sum_{\ell=0}^{\infty} f_{\ell}(r) \frac{2}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'} = f_{\ell'}(r) \frac{2}{2\ell'+1}.$$

Suy ra:

$$f_{\ell}(r) = \frac{2\ell+1}{2} \int_{-1}^1 P_{\ell}(x) e^{ikrx} dx. \quad (3.56)$$

Phép tính vế phải của (3.56) với r lớn cho ta kết quả

$$f_{\ell}(r) = \frac{2\ell+1}{2} e^{i\ell\pi/2} \frac{e^{i(kr-\ell\pi/2)} - e^{-i(kr-\ell\pi/2)}}{ikr},$$

$$f_{\ell}(r) = i^{\ell}(2\ell+1) \frac{\sin(kr - \ell\pi/2)}{kr}. \quad (3.57)$$

Như vậy

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell}(2\ell+1) \frac{\sin(kr - \ell\pi/2)}{kr} P_{\ell}(\cos \theta). \quad (3.58)$$

Trong số hạng thứ hai vế phải của biểu thức hàm sóng (3.48), ta khai triển biên độ tán xạ $A(\theta)$ theo các đa thức Legendre. Khai triển có dạng:

$$A(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} g_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta), \quad (3.59)$$

trong đó g_{ℓ} là các hằng số. Thay các biểu thức (3.58) và (3.59) vào (3.48), ta thu được công thức tiệm cận sau đây cho hàm ψ của hạt tán xạ

$$\psi(r, \theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell}(2\ell+1) \frac{\sin(kr - \ell\pi/2)}{kr} P_{\ell}(\cos \theta) + \sum_{\ell=0}^{\infty} g_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r}. \quad (3.60)$$

Biểu diễn hàm sin trở lại hàm e mũ và $i^{\ell} = \exp(i\ell\pi/2)$ rồi cân bằng hai biểu thức (3.60) và (3.53), ta tính được

$$g_{\ell} = \frac{2\ell+1}{2ik} (e^{2i\delta_{\ell}} - 1), \quad (3.61)$$

trong đó δ_{ℓ} là góc pha ứng với sóng riêng phần thứ ℓ . Cuối cùng, thay biểu thức (3.61) vào (3.59), ta được công thức cho biên độ tán xạ

$$A(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) (e^{2i\delta_{\ell}} - 1) P_{\ell}(\cos \theta), \quad (3.62)$$

và suy ra tiết diện tán xạ vi phân

$$d\sigma(\theta) = \frac{1}{2k^2} \left| \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (e^{2i\delta_\ell} - 1) P_\ell(\cos \theta) \right|^2 d\Omega. \quad (3.63)$$

Tiết diện tán xạ hiệu dụng toàn phần σ thu được bằng cách lấy tích phân (3.62) theo toàn bộ góc khối 4π . Với

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta = -2\pi d(\cos \theta),$$

ta có

$$\begin{aligned} \sigma &= \int_0^{4\pi} d\sigma = \frac{1}{4k^2} \int \left\{ \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (e^{2i\delta_\ell} - 1) P_\ell(\cos \theta) \right\} \times \\ &\quad \times \left\{ \sum_{\ell'=0}^{\infty} (2\ell' + 1) (e^{-2i\delta_{\ell'}} - 1) P_{\ell'}(\cos \theta) \right\} 2\pi [-d(\cos \theta)] \\ \sigma &= \frac{\pi(2i)^2}{k^2} \sum_{\ell, \ell'=0}^{\infty} (2\ell + 1)(2\ell' + 1) (e^{2i\delta_\ell} - 1) \times \\ &\quad \times (e^{-2i\delta_{\ell'}} - 1) (-2\pi) \int_1^{-1} P_\ell(x) P_{\ell'}(x) dx \end{aligned}$$

Đối với các đa thức Legendre, ta có tính chất

$$\int_{-1}^1 P_\ell(x) P_{\ell'}(x) dx = \frac{2}{2\ell + 1} \delta_{\ell\ell'}.$$

Nên kết quả trên có thể viết lại

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (e^{2i\delta_\ell} - 1) (e^{-2i\delta_\ell} - 1), \\ \sigma &= \frac{\pi(2i)^2}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \frac{e^{i\delta_\ell} (e^{i\delta_\ell} - e^{-i\delta_\ell}) e^{-i\delta_\ell} (e^{-i\delta_\ell} - e^{i\delta_\ell})}{(2i)^2}. \end{aligned}$$

Chuyển sang hàm sin, ta được công thức

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell. \quad (3.64)$$

Ta gọi tiết diện tán xạ riêng phần

$$\sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2}(2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell, \quad (3.65)$$

thì tiết diện tán xạ toàn phần là tổng của các tiết diện tán xạ riêng phần

$$\sigma = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_\ell. \quad (3.66)$$

Giá trị cực đại của tiết diện tán xạ riêng phần của hạt có mômen ℓ

$$(\sigma_\ell)_{max} = \frac{4\pi}{k^2}(2\ell + 1). \quad (3.67)$$

Việc tính pha thường rất khó khăn. Tính thực tế của các công thức (3.64) và (3.65) càng rõ rệt khi số các số hạng của chuỗi theo ℓ giữ vai trò chủ yếu càng ít, nghĩa là các chuỗi hội tụ càng nhanh. Khi năng lượng của hạt tăng lên thì mômen của các hạt tán xạ tăng. Như vậy, số số hạng của chuỗi giữ vai trò chủ yếu càng ít khi năng lượng hạt tán xạ càng bé (tăng chậm). Do đó, lý thuyết tán xạ các sóng riêng phần đặc biệt quan trọng cho việc nghiên cứu các hạt tán xạ chậm.

Còn về hàm sóng, thay (3.61) vào (3.60), ta thu được biểu thức tiệm cận ($r \rightarrow \infty$) cho hàm sóng ψ

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) e^{i(\delta_\ell + \ell\pi/2)} P_\ell(\cos \theta) \frac{\sin(kr + \delta_\ell - \ell\pi/2)}{kr}, \\ \psi(r, \theta) &= \frac{1}{2k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) \left[(-1)^\ell \frac{e^{-ikr}}{r} - e^{2i\delta_\ell} \frac{e^{ikr}}{r} \right]. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Số hạng thứ nhất trong dấu ngoặc vuông của công thức (3.68) biểu diễn sóng cầu hội tụ với biên độ $(-1)^\ell$, còn số hạng thứ hai biểu diễn sóng cầu phân kỳ với biên độ $S_\ell = e^{2i\delta_\ell}$. Môđun của cả hai biên độ đều bằng đơn vị. Do đó, hàm ψ mô tả tán xạ đàn hồi có dạng sóng đứng tạo bởi chồng chất các sóng cầu hội tụ và sóng cầu phân kỳ.

Theo công thức của hàm sóng như trên, ta thu được mật độ dòng xác suất tương ứng với sóng hội tụ bằng

$$\vec{j}_{sd} = \frac{\hbar}{2mi} |(-1)^\ell|^2 \left\{ \frac{e^{ikr}}{r} \nabla \left(\frac{e^{-ikr}}{r} \right) - \frac{e^{-ikr}}{r} \nabla \left(\frac{e^{ikr}}{r} \right) \right\} = \frac{-\hbar k}{2m_0 r^2} \vec{e}_r, \quad (3.69)$$

trong đó \vec{e}_r là vec tơ đơn vị của bán kính vec tơ \vec{r} .

Tương tự, ta thu được biểu thức cho mật độ dòng xác suất tương ứng với sóng phân kỳ bằng

$$\vec{j}_{pk} = \frac{\hbar k}{m_0 r^2} \vec{e}_r. \quad (3.70)$$

Rõ ràng hai vec tơ mật độ dòng $\vec{j}_{sđ}, \vec{j}_{pk}$ chỉ khác nhau về hướng. Do đó, dòng xác suất tương ứng với hàm sóng (3.68) gửi qua một mặt bất kỳ, kể cả qua mặt cầu bán kính R đều bằng không. Điều đó nói lên rằng, trong tán xạ đàn hồi số hạt bay đi từ tâm tán xạ bằng số hạt bay hướng về tâm đó.

Chương 4

Cơ học lượng tử tương đối tính

Các chương trước nghiên cứu những tính chất của các hạt vi mô có khối lượng nghỉ khác không và chuyển động với vận tốc rất nhỏ so với vận tốc của ánh sáng c trong chân không. Các vi hạt này tuân theo phương trình Schrödinger. Đó là phương trình cơ bản của cơ học lượng tử cổ điển. Nhờ các máy gia tốc hiện đại, vận tốc của các vi hạt có khối lượng nghỉ được tăng tốc đến vận tốc gần vận tốc ánh sáng. Trong trường hợp này, cơ học lượng tử cổ điển với phương trình Schrödinger không còn sử dụng được nữa. Hơn nữa, một thiếu sót của phương trình Schrödinger là không xét đến spin của các vi hạt. Trong cơ học lượng tử cổ điển, phương trình Schrödinger cho hạt chuyển động tự do có khối lượng m_0 được suy từ mối tương quan cổ điển:

$$H = \frac{p^2}{2m_0}. \quad (4.1)$$

Nếu thay

$$H \rightarrow \hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}; \quad \vec{p} \rightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}} = -i\hbar \left(\vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} \right). \quad (4.2)$$

Ta tìm được phương trình Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \psi. \quad (4.3)$$

Từ phương trình này, ta suy ra được phương trình liên tục cho vectơ mật độ dòng xác suất

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0, \quad (4.4)$$

trong đó

$$w = |\psi|^2 \geq 0 \quad \text{và} \quad \vec{j} = \frac{i\hbar}{2m_0} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \quad (4.5)$$

4.1 Phương trình Klein-Gordon (K-G)

Theo thuyết tương đối Einstein các phương trình mô tả các quy luật vật lý phải bất biến tương đối tính, nghĩa là phải bất biến với phép quay trong không gian bốn chiều Minkowski (hay với phép biến đổi Lorentz). Các phương trình chỉ bất biến khi chúng được mô tả dưới dạng các phương trình bốn chiều. Các phương trình (4.3) và phương trình (4.4), (4.5) không thoả mãn yêu cầu này vì sự tham gia phép lấy đạo hàm theo bốn toạ độ $x_1 = x; x_2 = y; x_3 = z; x_4 = ict$ trong các phương trình đó không cùng cấp.

Để thu được phương trình lượng tử tương đối tính cho hạt vi mô chuyển động tự do có vận tốc lớn, ta phải tìm biểu thức cổ điển của Hamiltonian (4.1) bằng biểu thức tương đối tính của nó

$$H^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4. \quad (4.6)$$

Theo đó, phương trình lượng tử tương đối tính có thể được viết

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = (-c^2 \hbar^2 \nabla^2 + m_0^2 c^4) \psi \quad (4.7)$$

hay

$$\nabla^2 \psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \psi = 0. \quad (4.8)$$

Ta đưa vào toán tử d'Alembert

$$\nabla_\alpha^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} \equiv \nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_4^2}, \quad \text{với } \alpha = 1, 2, 3, 4. \quad (4.9)$$

Theo đó, (4.8) có thể viết lại

$$\left(\nabla_\alpha^2 - \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0. \quad (4.10)$$

Toán tử $\nabla_\alpha^2 - m_0^2 c^2 / \hbar^2$ được gọi là toán tử Klein-Gordon, và phương trình (4.10) được gọi là phương trình Klein-Gordon. Đây là phương trình bất biến tương đối tính vì toán tử Klein-Gordon là toán tử vô hướng bốn chiều.

Ta tìm ý nghĩa vật lý của phương trình Klein-Gordon (4.10). Muốn vậy, ta nhân hai vế của phương trình (4.8) với ψ^* và nhân hai vế của phương trình liên hiệp phức của (4.8) với ψ rồi trừ kết quả cho nhau, ta thu được:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\nabla (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi). \quad (4.11)$$

Nhân hai vế phương trình trên với $i\hbar/(2m_0)$ và đưa vào mật độ điện tích

$$w_e = \frac{i\hbar}{2m_0c^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \quad (4.12)$$

và mật độ dòng điện

$$\vec{j}_e = \frac{i\hbar}{2m_0} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi), \quad (4.13)$$

ta thu được

$$\frac{\partial w_e}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_e = 0. \quad (4.14)$$

Trong trường hợp cổ điển, $v \ll c \Rightarrow E = m_0c^2 (1 + v^2/(2c^2) + \dots)$ giúp cho ta rút ra được từ (4.12) biểu thức $w_e \rightarrow w = e|\psi|^2$ hoàn toàn phù hợp với phương trình cơ học cổ điển (4.5).

Tuy nhiên, từ mật độ điện tích w_e có thể suy ra mật độ xác suất $w_m = w_e/e$

$$w_m = \frac{i\hbar}{2m_0c^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right), \quad (4.15)$$

đại lượng này có chứa ψ và $(\partial\psi)/(\partial t)$ là những đại lượng độc lập nên nó có thể dương hoặc âm, cho nên nó không thể được coi là mật độ hạt được.

4.2 Phương trình Dirac

Phương trình K-G gặp khó khăn về mật độ xác suất âm, cần phải tránh các đạo hàm theo thời gian trong biểu thức của w_m . Như vậy, bản thân hàm sóng chỉ được chứa đạo hàm bậc nhất theo thời gian. Do yêu cầu của thuyết tương đối thì cả các đạo hàm theo không gian cũng phải bậc nhất. Mặt khác, nguyên lý chồng chất các trạng thái cũng đòi hỏi phương trình phải tuyến tính. Do đó, phương trình sóng cần phải tìm phải là một phương trình vi phân tuyến tính theo thời gian và theo các tọa độ không gian.

Trên cơ sở những nhận định như vậy, Dirac đã đưa ra phương trình sau đây để mô tả chuyển động của một hạt tự do

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\beta'_x \frac{\partial}{\partial x} + \beta'_y \frac{\partial}{\partial y} + \beta'_z \frac{\partial}{\partial z} + \beta'_0 \right) \psi. \quad (4.16)$$

Để thuận tiện, ta viết

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\hat{\beta}_x \hat{p}_x + \hat{\beta}_y \hat{p}_y + \hat{\beta}_z \hat{p}_z + \hat{\beta}_0 \right) \psi, \quad (4.17)$$

trong đó $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ là các toán tử hình chiếu xung lượng $\hat{\vec{p}}$ trên các trục tọa độ, còn các toán tử $\hat{\beta}_x, \hat{\beta}_y, \hat{\beta}_z$ không chứa tọa độ. Tính chất của các toán tử $\hat{\beta}_i (i = x, y, z)$ sẽ xác định sau. Đưa vào ký hiệu

$$\hat{H} = \hat{\beta}_x \hat{p}_x + \hat{\beta}_y \hat{p}_y + \hat{\beta}_z \hat{p}_z + \hat{\beta}_0 \quad (4.18)$$

Phương trình (4.17) có dạng

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi. \quad (4.19)$$

Nếu \hat{H} thực sự là Hamiltonian, thì theo lý thuyết tương đối, ta có

$$\hat{H}^2 = c^2 (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + m_0^2 c^4. \quad (4.20)$$

Bình phương (4.18) và đối chiếu với (4.20), ta có

$$\begin{aligned} \hat{\beta}_x^2 = \hat{\beta}_y^2 = \hat{\beta}_z^2 = c^2; \quad \hat{\beta}_0^2 = m_0^2 c^4; \\ \hat{\beta}_i \hat{\beta}_j + \hat{\beta}_j \hat{\beta}_i = 0, \quad i \neq j \quad \text{và} \quad \hat{\beta}_i \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_0 \hat{\beta}_i = 0; \quad i, j = x, y, z. \end{aligned}$$

Đặt

$$\beta_i = c \hat{\alpha}_i \quad \text{và} \quad \hat{\beta}_0 = m_0 c^2 \hat{\beta}, \quad (4.21)$$

ta có

$$\left. \begin{aligned} \hat{\alpha}_i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_i &= 0; \quad \hat{\alpha}_i^2 = \hat{\beta}^2 = 1, \\ \hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j + \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_i &= 0 \quad \text{với} \quad i \neq j. \end{aligned} \right\} \quad (4.22)$$

Dựa vào (4.21) và (4.22), phương trình (4.17) có thể được viết lại

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[c (\hat{\alpha}_x \hat{p}_x + \hat{\alpha}_y \hat{p}_y + \hat{\alpha}_z \hat{p}_z) + m_0 c^2 \hat{\beta} \right] \psi, \quad (4.23)$$

Đây là phương trình Dirac. Nếu đặt

$$\hat{\vec{\alpha}} = \hat{\alpha}_x \vec{i} + \hat{\alpha}_y \vec{j} + \hat{\alpha}_z \vec{k},$$

thì (4.23) trở thành

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad \text{với} \quad \hat{H} = c \hat{\vec{\alpha}} \hat{\vec{p}} + m_0 c^2 \hat{\beta}. \quad (4.24)$$

Bây giờ chúng ta đi tìm dạng cụ thể của các toán tử $\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z$ và $\hat{\beta}$. Chúng ta thử tìm các toán tử đó dưới dạng tập hợp các hằng số, nói chung

là phức, nghĩa là dưới dạng các ma trận vuông có dạng

$$\hat{\alpha}_x = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

Trước hết cần xác định số n . Các ma trận $\hat{\alpha}$ và $\hat{\beta}$ đều có cùng số chiều n . Muốn xác định n , ta cần đối ứng các ma trận $\hat{\alpha}$ và $\hat{\beta}$ với các định thức tương ứng của chúng.

Ta nhớ lại một tính chất của các định thức

$$\det(\hat{\alpha}_x \hat{\beta}) = \det(\hat{\alpha}_x) \cdot \det(\hat{\beta}). \quad (4.25)$$

Từ các quy tắc giao hoán ở (4.22), ta có thể viết

$$\hat{\alpha}_x \hat{\beta} = -\hat{\beta} \hat{\alpha}_x = -\hat{I} \hat{\beta} \hat{\alpha}_x$$

trong đó \hat{I} là ma trận đơn vị cấp n . Dùng hệ thức (4.25), ta có

$$\det(\hat{\alpha}_x \hat{\beta}) = \det(\hat{\alpha}_x) \det(\hat{\beta}) = \det(\hat{\beta}) \det(\hat{\alpha}_x) = \det(-\hat{I}) \det(\hat{\beta}) \det(\hat{\alpha}_x)$$

vì các định thức là một số phức nên giao hoán được, do đó

$$\det(-\hat{I}) = 1 \Leftrightarrow (-1)^n = 1 : \quad n \text{ chẵn} \quad (4.26)$$

a) Trường hợp $n = 2$: Các ma trận cần tìm là hạng 2. Chúng ta đã gặp các ma trận hạng 2, đó là các ma trận Pauli

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \hat{I}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

Tuy nhiên, các ma trận này không thoả mãn các điều kiện phản giao hoán (4.22), do đó không phải là các toán tử $\hat{\sigma}_i$ và $\hat{\beta}$ cần tìm.

b) Trường hợp $n = 4$: Ta có thể xây dựng được các ma trận với các tính chất được yêu cầu ở (4.22). Đó là các ma trận do Dirac đưa ra như sau

$$\hat{\alpha}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\alpha}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\hat{\alpha}_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.28)$$

Dùng các ma trận Pauli, ta có thể viết gọn hơn

$$\hat{\alpha}_x = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_x \\ \hat{\sigma}_x & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\alpha}_y = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_y \\ \hat{\sigma}_y & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\alpha}_z = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_z \\ \hat{\sigma}_z & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \hat{I}_2 & 0 \\ 0 & -\hat{I}_2 \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

Dễ dàng nghiệm lại được rằng, các ma trận $\hat{\alpha}_i, \hat{\beta}$ là các ma trận hermitic, nghĩa là nếu chuyển vị các ma trận rồi lấy liên hiệp phức, ma trận trở lại với ma trận ban đầu

$$\hat{\alpha}_x^+ = \hat{\alpha}_x; \quad \hat{\alpha}_y^+ = \hat{\alpha}_y; \quad \hat{\alpha}_z^+ = \hat{\alpha}_z; \quad \hat{\beta}^+ = \hat{\beta}. \quad (4.30)$$

Với việc đưa vào các ma trận hạng 4 này, phương trình Dirac mô tả được tính chất của các hạt có spin 1/2. Ứng với $n > 4$ sơ đồ lý thuyết vẫn không bị phá hủy.

Bây giờ, với $n = 4$, và các ma trận Dirac hạng 4 đã chọn như trên, hàm sóng của hệ vi mô có thể được mô tả bởi một lưỡng spinơ Dirac

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (4.31)$$

Theo đó, các phương trình (4.23) có thể được viết lại

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \left[c(\hat{\alpha}_x \hat{p}_x + \hat{\alpha}_y \hat{p}_y + \hat{\alpha}_z \hat{p}_z) + m_0 c^2 \hat{\beta} \right] \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \left\{ c \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \hat{p}_x \\ 0 & 0 & \hat{p}_x & 0 \\ 0 & \hat{p}_x & 0 & 0 \\ \hat{p}_x & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i\hat{p}_y \\ 0 & 0 & i\hat{p}_y & 0 \\ 0 & -i\hat{p}_y & 0 & 0 \\ i\hat{p}_y & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \right.$$

$$+ \left(\begin{array}{cccc} 0 & 0 & \hat{p}_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\hat{p}_z \\ \hat{p}_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\hat{p}_z & 0 & 0 \end{array} \right) + m_0 c^2 \left(\begin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{array} \right) \left. \vphantom{\begin{array}{c} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{array}} \right\} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Suy ra

$$\begin{pmatrix} i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} \\ i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} \\ i\hbar \frac{\partial \psi_3}{\partial t} \\ i\hbar \frac{\partial \psi_4}{\partial t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_0 c^2 & 0 & c\hat{p}_z & c(\hat{p}_x - i\hat{p}_y) \\ 0 & m_0 c^2 & c(\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & -c\hat{p}_z \\ c\hat{p}_z & c(\hat{p}_x - i\hat{p}_y) & -m_0 c^2 & 0 \\ c(\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & -c\hat{p}_z & 0 & -m_0 c^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Do đó, ta rút ra được

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} &= c(\hat{p}_x - i\hat{p}_y)\psi_4 + c\hat{p}_z\psi_3 + m_0 c^2\psi_1 \\ i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} &= c(\hat{p}_x + i\hat{p}_y)\psi_3 - c\hat{p}_z\psi_4 + m_0 c^2\psi_2 \\ i\hbar \frac{\partial \psi_3}{\partial t} &= c(\hat{p}_x - i\hat{p}_y)\psi_2 + c\hat{p}_z\psi_1 - m_0 c^2\psi_3 \\ i\hbar \frac{\partial \psi_4}{\partial t} &= c(\hat{p}_x + i\hat{p}_y)\psi_1 - c\hat{p}_z\psi_2 - m_0 c^2\psi_4 \end{aligned} \right\}. \quad (4.32)$$

Để dàng mở rộng phương trình Dirac sang trường hợp hạt mang điện chuyển động trong trường điện từ. Muốn vậy, thay toán tử \hat{p} bằng $\hat{p} - (e/c)\vec{A}$ và thêm toán tử $e\varphi$ vào toán tử \hat{H} , trong đó \vec{A}, φ theo thứ tự là thế vectơ và thế vô hướng của trường điện từ. Ta thu được phương trình Dirac cho hạt điện vi mô chuyển động trong trường điện từ

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[c\hat{\alpha} \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right) + e\varphi + m_0 c^2 \hat{\beta} \right] \psi. \quad (4.33)$$

Muốn đưa phương trình Dirac về dạng đối xứng hơn, ta nhân bên trái (4.33) với toán tử $\hat{\beta}$

$$i\hbar \hat{\beta} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[c\hat{\beta}\hat{\alpha} \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right) + e\varphi\hat{\beta} + m_0 c^2 \hat{\beta}^2 \right] \psi, \quad (4.34)$$

và đưa vào các ma trận sau

$$\hat{\gamma}_1 = -i\hat{\beta}\hat{\alpha}_x; \quad \hat{\gamma}_2 = -i\hat{\beta}\hat{\alpha}_y; \quad \hat{\gamma}_3 = -i\hat{\beta}\hat{\alpha}_z; \quad \hat{\gamma}_4 = \hat{\beta}.$$

Các ma trận $\hat{\gamma}_i$ ($i = 1, 2, 3, 4$) thoả mãn hệ thức giao hoán

$$\hat{\gamma}_i \hat{\gamma}_k + \hat{\gamma}_k \hat{\gamma}_i = 2\delta_{ik}. \quad (4.35)$$

Dựa vào các ma trận $\hat{\gamma}_i$, ta có thể viết lại phương trình Dirac (4.23)

$$\sum_{i=1}^3 \hat{\gamma}_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + \frac{m_0 c}{\hbar} \psi + \frac{\hat{\gamma}_4 \partial \psi}{ic \partial t} = 0, \quad (4.36)$$

với lưu ý $x_4 = ict$, ta viết được phương trình Dirac dưới dạng bốn chiều của hạt chuyển động tự do

$$\hat{\gamma}_\mu \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} + \frac{m_0 c}{\hbar} \psi = 0, \quad (4.37)$$

trong đó số hạng đầu là phép lấy tổng theo $\mu = 1, 2, 3, 4$.

Còn trong trường hợp hạt chuyển động trong trường điện từ, ta đưa vào toán tử $\hat{p}_\mu = (\hbar/i)(\partial/\partial x_\mu)$ và thế bốn chiều \hat{A}_μ ($\hat{A}_x, \hat{A}_y, \hat{A}_z, i\varphi/c$), ta có thể viết lại (4.33) dưới dạng

$$\left[\hat{\gamma}_\mu \left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c} \hat{A}_\mu \right) - im_0 c \right] \psi = 0. \quad (4.38)$$

4.3 Mật độ xác suất và mật độ dòng xác suất trong lý thuyết Dirac

Lấy liên hợp hermitic phương trình Dirac (4.24)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-i\hbar c \hat{\alpha} \nabla + m_0 c^2 \hat{\beta} \right) \psi, \quad (4.39)$$

ta được phương trình

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^+}{\partial t} = i\hbar c \nabla \psi^+ \hat{\alpha}^+ + m_0 c^2 \psi^+ \hat{\beta}^+, \quad (4.40)$$

Vì các toán tử $\hat{\alpha}$ và $\hat{\beta}$ là hermitic, nên ta có

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^+}{\partial t} = i\hbar c \nabla \psi^+ \hat{\alpha} + m_0 c^2 \psi^+ \hat{\beta}, \quad (4.41)$$

Nhân bên trái phương trình (4.39) với ψ^+ và nhân bên phải phương trình (4.41) với ψ , sau đó lấy phương trình thứ nhất trừ với phương trình thứ hai, vế theo vế, ta được:

$$i\hbar \left(\psi^+ \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^+}{\partial t} \psi \right) = -i\hbar c \left[\psi^+ \hat{\alpha} \nabla \psi + \left(\nabla \psi^+ \hat{\alpha} \right) \psi \right]. \quad (4.42)$$

Từ phép biến đổi

$$\nabla(\hat{\alpha}\psi) = (\nabla\hat{\alpha})\psi + \hat{\alpha}\nabla\psi = (\hat{\alpha}\nabla)\psi \quad \text{vì} \quad \nabla\hat{\alpha} = 0.$$

nên

$$\psi^+(\hat{\alpha}\nabla)\psi + (\nabla\psi^+\hat{\alpha})\psi = \psi^+\nabla(\hat{\alpha}\psi) + (\nabla\psi^+)\hat{\alpha}\psi = \nabla(\psi^+\hat{\alpha}\psi),$$

và ở về trái

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

Suy ra phương trình (4.42) trở thành

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^+\psi) = -\nabla(\psi^+\hat{\alpha}\psi). \quad (4.43)$$

Đặt

$$w = \psi^+\psi \quad \text{và} \quad \vec{j} = c\psi^+\hat{\alpha}\psi. \quad (4.44)$$

Phương trình (4.43) được viết lại dưới dạng

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \text{div}\vec{j} = 0 \quad (4.45)$$

Trong đó đại lượng

$$w = \psi^+\psi = (\psi_1^* \ \psi_2^* \ \psi_3^* \ \psi_4^*) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2 \geq 0 \quad (4.46)$$

là một đại lượng không âm nên được gọi là *mật độ xác suất tương đối tính*. Còn \vec{j} được gọi là *mật độ dòng xác suất tương đối tính* cho hạt có hàm sóng ψ .

Như vậy cũng như trong lý thuyết Schrödinger, hàm sóng có ý nghĩa xác suất thông thường. Từ tính chất tuyến tính của phương trình Dirac và ý nghĩa xác suất của hàm sóng ψ , ta rút ra rằng các luận điểm cơ bản của cơ học lượng tử vẫn còn giá trị trong lý thuyết của Dirac, cụ thể là:

1. Đại lượng $|C_m(t)|^2$, trong đó $C_m(t)$ là hệ số khai triển của hàm sóng theo hệ hàm riêng $\{\psi_m(\vec{r}, t)\}$ của một toán tử hermitic nào đó

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_m C_m(t)\psi_m(\vec{r}, t),$$

vẫn được hiểu là xác suất đo được một trị riêng nào đó.

2. Giá trị trung bình được xác định bằng

$$\bar{L} = \int \psi^+ \hat{L} \psi dV$$

4.4 Nghiệm của phương trình Dirac đối với hạt chuyển động tự do

Xét phương trình Dirac của hạt vi mô chuyển động tự do

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(c\hat{\alpha}\hat{p} + m_0c^2\hat{\beta} \right) \psi. \quad (4.47)$$

Thay $\psi = \exp(-iEt/\hbar)\psi_0$ vào (4.47), ta thu được phương trình cho hàm sóng ψ_0 không phụ thuộc thời gian

$$\left(c\hat{\alpha}\hat{p} + m_0c^2\hat{\beta} \right) \psi_0 = E\psi_0. \quad (4.48)$$

Ta xét các trạng thái có xung lượng \vec{p} xác định và tìm nghiệm của phương trình (4.48) dưới dạng sóng phẳng

$$\psi_0 = u \exp\left(i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}\right), \quad (4.49)$$

trong đó u là spinơ bốn thành phần

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} \quad (4.50)$$

với u_1, u_2, u_3, u_4 là các hằng số, còn các thành phần của \vec{p} chỉ là các con số.

Thế ψ_0 ở (4.49) vào (4.48), ta thu được phương trình

$$Eu = \left(c\hat{\alpha}\hat{p} + m_0c^2\hat{\beta} \right) u. \quad (4.51)$$

Từ đó rút ra hệ các phương trình

$$\left. \begin{aligned} Eu_1 &= m_0c^2u_1 + c(p_x - ip_y)u_4 + cp_zu_3 \\ Eu_2 &= m_0c^2u_2 + c(p_x + ip_y)u_3 - cp_zu_4 \\ Eu_3 &= -m_0c^2u_3 + c(p_x - ip_y)u_2 + cp_zu_1 \\ Eu_4 &= -m_0c^2u_4 + c(p_x + ip_y)u_1 - cp_zu_2 \end{aligned} \right\} \quad (4.52)$$

thuần nhất đối với bốn ẩn không đổi u_i ($i = 1, 2, 3, 4$). Để nghiệm của hệ không tầm thường thì định thức

$$\begin{vmatrix} m_0c^2 - E & 0 & cp_z & c(p_x - ip_y) \\ 0 & m_0c^2 - E & c(p_x + ip_y) & -cp_z \\ cp_z & c(p_x - ip_y) & -m_0c^2 - E & 0 \\ c(p_x + ip_y) & -cp_z & 0 & -m_0c^2 - E \end{vmatrix} = 0 \quad (4.53)$$

quy về dạng

$$E^2 - c^2p^2 - m_0^2c^4 = 0$$

hay

$$E^2 = c^2p^2 + m_0^2c^4. \quad (4.54)$$

Từ đây suy ra các trị riêng suy biến hai lần của E

$$E_+ = \sqrt{c^2p^2 + m_0^2c^4}, \quad (4.55)$$

$$E_- = -\sqrt{c^2p^2 + m_0^2c^4}. \quad (4.56)$$

Vậy ứng với mỗi giá trị xung lượng xác định của \vec{p} , có giá trị năng lượng suy biến hai lần E_+ và giá trị năng lượng suy biến hai lần E_- .

Sự suy biến của các giá trị riêng của năng lượng E_+, E_- được đoán nhận là sự không phụ thuộc của năng lượng điện tử vào sự định hướng spin của nó. Hình chiếu spin này lên một trục nào đó có thể nhận đúng hai giá trị $\pm\hbar/2$. Còn đối với dấu của năng lượng, thì ý nghĩa của nó sâu xa hơn nhiều: đó là năng lượng của điện tử và của phản hạt của điện tử là positron mà hàm sóng của chúng tương ứng với 4 spinơ trục chuẩn $u^{(i)}$ ($i = 1, 2, 3, 4$) sau:

Với năng lượng E_+ , hạt có hai hàm riêng tương ứng với hai spinơ

$$u^{(1)} = \sqrt{\frac{m_0c^2 + E_+}{2E_+}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp_z}{m_0c^2 + E_+} \\ \frac{c(p_x + ip_y)}{m_0c^2 + E_+} \end{pmatrix}; \quad u^{(2)} = \sqrt{\frac{m_0c^2 + E_+}{2E_+}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{c(p_x - ip_y)}{m_0c^2 + E_+} \\ \frac{-cp_z}{m_0c^2 + E_+} \end{pmatrix}$$

Với năng lượng E_- , hạt có hai hàm riêng tương ứng với hai spinơ

$$u^{(3)} = \sqrt{\frac{m_0c^2 + E_-}{2E_-}} \begin{pmatrix} \frac{-cp_z}{m_0c^2 + E_-} \\ \frac{-c(p_x + ip_y)}{m_0c^2 + E_-} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad u^{(4)} = \sqrt{\frac{m_0c^2 + E_-}{2E_-}} \begin{pmatrix} \frac{-c(p_x - ip_y)}{m_0c^2 + E_-} \\ \frac{cp_z}{m_0c^2 + E_-} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Lưu ý rằng tại giới hạn cổ điển ($|\vec{p}| \ll mc$), các thành phần thứ ba, thứ tư của $u^{(1)}$, $u^{(2)}$ và thành phần thứ nhất, thứ hai của $u^{(3)}$, $u^{(4)}$ đều rất nhỏ và có cấp $(|\vec{p}|/mc) \ll 1$.

4.5 Spin của hạt được mô tả bằng phương trình Dirac

Từ trước tới nay, chúng ta đã sử dụng rộng rãi khái niệm spin. Toán tử spin đã được đưa vào một cách thuần túy hình thức, nhằm mô tả các sự kiện thực nghiệm. Bây giờ, chúng ta chứng tỏ rằng sự tồn tại của spin được suy trực tiếp từ phương trình Dirac. Muốn vậy, ta xét các định luật bảo toàn được rút ra từ phương trình Dirac.

Đối với hạt chuyển động trong chân không, mômen của hạt được bảo toàn. Do đó, toán tử mômen toàn phần của hạt giao hoán với \hat{H} .

Xét giao hoán giữa \hat{L} và \hat{H} . Để đơn giản, ta xét hạt chuyển động tự do. Chọn trục z có hướng tùy ý, ta có

$$\hat{H}\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{H} = \left(c\hat{\alpha}\hat{p} + m_0c^2\hat{\beta}\right)\hat{L}_z - \hat{L}_z\left(c\hat{\alpha}\hat{p} + m_0c^2\hat{\beta}\right).$$

Vì $\hat{L}_z = (\hbar/i)[y(\partial/\partial x)]$ giao hoán với $\hat{\beta}$ và $\hat{\alpha}_z\hat{p}_z$, nên

$$\hat{H}\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{H} = c\hat{\alpha}_x\left(\hat{p}_x\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{p}_x\right) + c\hat{\alpha}_y\left(\hat{p}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{p}_y\right). \quad (4.57)$$

Dùng các tính chất giao hoán

$$\left[\hat{L}_z, \hat{p}_x\right] = i\hbar\hat{p}_y \quad \text{và} \quad \left[\hat{L}_z, \hat{p}_y\right] = -i\hbar\hat{p}_x$$

đế thế vào (4.57), ta suy ra

$$\hat{H}\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{H} = i\hbar c(\hat{\alpha}_y\hat{p}_x - \hat{\alpha}_x\hat{p}_y). \quad (4.58)$$

Kết quả tương tự thu được cho các hình chiếu khác của mômen xung lượng.

Như vậy mômen xung lượng của hạt tự do trong trường hợp này không phải là tích phân chuyển động và không bảo toàn, ta đưa vào khái niệm mômen toàn phần

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$$

trong đó $\hat{\vec{S}}$ là toán tử chưa biết, với điều kiện sao cho $\left[\hat{J}_i, \hat{H}\right] = 0$, ($i = x, y, z$).

Ta xét \hat{J}_z .

$$[\hat{J}_z, \hat{H}] = 0 \quad \Leftrightarrow \quad [\hat{L}_z + \hat{S}_z, \hat{H}] = 0$$

hay

$$[\hat{L}_z, \hat{H}] + [\hat{S}_z, \hat{H}] = 0.$$

Từ (4.58) ta rút ra kết quả

$$\hat{H}\hat{S}_z - \hat{S}_z\hat{H} = i\hbar c (\hat{\alpha}_x\hat{p}_y - \hat{\alpha}_y\hat{p}_x). \quad (4.59)$$

Để thoả mãn (4.59), ta đặt

$$\hat{S}_z = A\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y, \quad (4.60)$$

trong đó A là hằng số chưa biết.

Dùng các hệ thức giao hoán (4.22) cho các toán tử $\hat{\alpha}_i, \hat{\beta}$, ta thu được

$$\hat{H}\hat{S}_z - \hat{S}_z\hat{H} = A \left(\hat{H}\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y - \hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y\hat{H} \right) = Ac [(\hat{\alpha}_x\hat{p}_x + \hat{\alpha}_y\hat{p}_y)\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y - \hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y(\hat{\alpha}_x\hat{p}_x + \hat{\alpha}_y\hat{p}_y)]$$

$$\hat{H}\hat{S}_z - \hat{S}_z\hat{H} = 2Ac(\hat{\alpha}_y\hat{p}_x - \hat{\alpha}_x\hat{p}_y) = -2Ac(\hat{\alpha}_x\hat{p}_y - \hat{\alpha}_y\hat{p}_x).$$

So sánh biểu thức này với (4.59), ta suy ra $A = -i\hbar/2$. Vậy toán tử \hat{S}_z bằng

$$\hat{S}_z = -\frac{i\hbar}{2}\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y = -\frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_x \\ \hat{\sigma}_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_y \\ \hat{\sigma}_y & 0 \end{pmatrix} = -\frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y \end{pmatrix} = -\frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} i\hat{\sigma}_z & 0 \\ 0 & i\hat{\sigma}_z \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_z & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.61)$$

Bằng cách tương tự, ta thu được

$$\hat{S}_x = -\frac{i\hbar}{2}\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_x & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_x \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.62)$$

$$\hat{S}_y = -\frac{i\hbar}{2}\hat{\alpha}_z\hat{\alpha}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_y & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_y \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.63)$$

Còn toán tử

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2.$$

Dùng các tính chất của các toán tử $\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z$, chúng ta thu được

$$\hat{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\hat{I} = \hbar^2\frac{1}{2}\left(1 + \frac{1}{2}\right)\hat{I}. \quad (4.64)$$

Phân tích các kết quả thu được trên, ta có thể gọi $\vec{\hat{J}}$ là *mômen toàn phần của hạt* (bảo toàn theo thời gian). Mômen toàn phần bằng tổng mômen quỹ đạo và mômen spin của hạt. Các toán tử \hat{S}_z và \hat{S}^2 trong (4.61) và (4.64) được đưa về dạng chéo. Khi đó hình chiếu của spin lên trục z có thể lấy hai giá trị $\pm\hbar/2$. Các trị riêng của toán tử \hat{S}^2 có dạng $\hbar^2s(s+1)$, trong đó $s = 1/2$. Từ đó, thấy rõ rằng hạt có spin bằng $\hbar/2$.

4.6 Chuyển từ phương trình Dirac sang phương trình Pauli. Mômen từ của hạt.

Bây giờ ta khảo sát dạng của phương trình Dirac tại giới hạn gần đúng cổ điển ($v \ll c$). Ta xét trường hợp tổng quát khi hạt vi mô mang điện tích e chuyển động trong trường điện từ có thế vectơ $\vec{\hat{A}}$ và thế vô hướng φ .

Từ (4.33), phương trình Dirac cho hạt mang điện chuyển động trong trường điện từ

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[c\hat{\alpha}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\hat{\vec{A}}\right) + e\varphi + m_0c^2\hat{\beta} \right] \psi. \quad (4.65)$$

Đặt

$$\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad \phi, \chi \text{ là các spinơ hai thành phần}, \quad (4.66)$$

và lưu ý

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = E\psi, \quad (4.67)$$

khi ở trạng thái dừng. Thế (4.66) và (4.67) vào (4.65), ta có

$$(E - e\varphi - m_0c^2)\phi = c\hat{\sigma}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\hat{\vec{A}}\right)\chi, \quad (4.68)$$

$$(E - e\varphi + m_0c^2)\chi = c\hat{\sigma}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\hat{\vec{A}}\right)\phi, \quad (4.69)$$

Gọi ε là động năng của hạt, theo thuyết tương đối, ta có

$$E = \varepsilon + m_0c^2$$

Trong gần đúng cổ điển $E - e\varphi - m_0c^2 \ll m_0c^2$, nghĩa là vận tốc của điện tử $v \ll c$ và trường gây bởi thế φ đủ nhỏ. Khi đó hệ phương trình (4.68), (4.69) chuyển thành

$$\varepsilon\phi = c\hat{\sigma} \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A} \right) \chi + e\varphi\phi, \quad (4.70)$$

$$\chi = \frac{c\hat{\sigma} \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A} \right)}{\varepsilon + 2m_0c^2 - e\varphi} \phi \approx \frac{1}{2m_0c} \hat{\sigma} \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A} \right) \phi. \quad (4.71)$$

Thay giá trị của χ từ phương trình (4.71) vào phương trình (4.70), ta tìm được phương trình chỉ chứa hàm spinơ ϕ

$$\varepsilon\phi = \left\{ \frac{\left[\hat{\sigma} \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A} \right) \right]^2}{2m_0} + e\varphi \right\} \phi. \quad (4.72)$$

Đối với các ma trận Pauli, dùng hệ thức

$$\forall \vec{a}, \vec{b}, \quad (\hat{\sigma}\vec{a})(\hat{\sigma}\vec{b}) = (\vec{a}\vec{b}) + i\hat{\sigma}(\vec{a} \times \vec{b})$$

để áp dụng vào (4.72) sẽ thu được

$$\left[\hat{\sigma} \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A} \right) \right]^2 = \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{c} \hat{\sigma} \text{rot}\hat{A}. \quad (4.73)$$

Thực vậy,

$$\left[\hat{\sigma} \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A} \right) \right] \left[\hat{\sigma} \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A} \right) \right] = \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A} \right)^2 + i\hat{\sigma} \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A} \right) \times \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A} \right)$$

trong đó

$$\begin{aligned} \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A} \right) \times \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A} \right) &= (\hat{p} \times \hat{p}) - \frac{e}{c} (\hat{A} \times \hat{p}) - \frac{e}{c} (\hat{p} \times \hat{A}) + \frac{e^2}{c^2} (\hat{A} \times \hat{A}) \\ &= \frac{ie\hbar}{c} (\nabla \times \hat{A}) = \frac{ie\hbar}{c} \text{rot}\hat{A} = \frac{ie\hbar}{c} \vec{B}, \end{aligned}$$

trong đó \vec{B} là vectơ cảm ứng từ trường và ta đã sử dụng

$$\begin{aligned} (\hat{A} \times \hat{p} + \hat{p} \times \hat{A}) \phi &= -i\hbar \left[(\hat{A} \times \nabla \phi) + \nabla \times (\hat{A} \phi) \right] \\ (\hat{A} \times \hat{p} + \hat{p} \times \hat{A}) \phi &= -i\hbar \left[\hat{A} \times (\nabla \phi) + (\nabla \times \hat{A}) \phi - \hat{A} \times (\nabla \phi) \right] \\ (\hat{A} \times \hat{p} + \hat{p} \times \hat{A}) \phi &= -i\hbar \text{rot} \hat{A} \phi. \end{aligned}$$

hay

$$-\frac{e}{c} (\hat{A} \times \hat{p} + \hat{p} \times \hat{A}) = \left(\frac{i\hbar e}{c} \text{rot} \hat{A} \right).$$

Thế kết quả (4.73) vào (4.72), ta rút ra được phương trình cổ điển cho chuyển động của hạt có spin 1/2 trong trường điện từ

$$\varepsilon \phi = \left\{ \frac{(\hat{p} - \frac{e}{c} \hat{A})^2}{2m_0} + e\varphi - \frac{e\hbar}{2m_0 c} (\hat{\sigma} \vec{B}) \right\} \phi,$$

hay

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left\{ \frac{(\hat{p} - \frac{e}{c} \hat{A})^2}{2m_0} + e\varphi - \frac{e\hbar}{2m_0 c} (\hat{\sigma} \vec{B}) \right\} \phi. \quad (4.74)$$

Đây là phương trình Pauli trong cơ học lượng tử phi tương đối tính.

Tóm lại, trong gần đúng phi tương đối tính phương trình Dirac tự động chuyển thành phương trình Pauli. Hơn nữa, phương trình Dirac không những suy ra được sự tồn tại của spin mà còn cho thấy sự có mặt mômen từ riêng $\mu_s = (e\hbar)/(2m_0 c)$ của hạt nữa.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Đavudóp A. X., *Cơ học lượng tử*, NXB ĐH & THCN, Hà Nội, 1972.
2. Phạm Quý Tư, Đỗ Đình Thanh, *Cơ học lượng tử*, NXB ĐHSP Hà Nội, 1995.
3. Squires G. L., *Problems in Quantum Mechanics*, Cambridge University Press 1995.
4. Đặng Quang Khang, *Cơ học lượng tử*, NXB KH & KT, Hà Nội, 1996.
5. Nguyễn Hoàng Phương, *Nhập môn Cơ học lượng tử*, NXB GD, Hà Nội, 1998.
6. Nguyễn Xuân Hãn, *Cơ học lượng tử*, NXB ĐHQG Hà Nội, 1998.
7. Siegfried Flugge, *Practical Quantum Mechanics*, Springer-Verlag New York Heidelberg Berlin, 1974.
8. Nguyễn Hữu Minh, Tạ Duy Lợi, Đỗ Đình Thanh, Lê Trọng Tường, *Bài tập Vật lý lý thuyết, tập 2*, NXB ĐHQG Hà Nội, 1996.
9. G. L. Squires, *Problems in quantum mechanics with solutions*, Cambridge University Press, Great Britain, 1995.