

[www.mientayvn.com](http://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](http://www.mientayvn.com/chat_box_li.html)

TRƯỜNG ĐẠI HỌC ĐÀ LẠT  
Đ \* Đ



GIÁO TRÌNH  
**CƠ HỌC LƯỢNG TỬ**

**ThS. NGUYỄN DUY HÙNG**

**1998**

## MỤC LỤC

MỤC LỤC .....	- 1 -
LỜI NÓI ĐẦU .....	- 4 -
BÀI MỞ ĐẦU .....	- 5 -
§1 LƯỢC ĐỒ TỔNG QUÁT CỦA VẬT LÝ HỌC.....	- 5 -
§2 BỨC TRANH THẾ GIỚI CỦA VẬT LÝ HỌC CỔ ĐIỂN.....	- 5 -
I/ Hai ý tưởng cơ bản của vật lý học cổ điển : .....	- 5 -
II/ Hai bộ phận chủ yếu của vật lý học cổ điển : .....	- 6 -
III/ Hai dạng vật chất cơ bản của vật lý học cổ điển : .....	- 7 -
IV/ Những quan niệm cơ sở của vật lý học cổ điển : .....	- 7 -
§3 NHỮNG BẾ TẮC CỦA VẬT LÝ HỌC CỔ ĐIỂN VÀ NHỮNG Ý TƯỞNG NỬA LƯỢNG TỬ.....	- 8 -
CHƯƠNG I. CƠ SỞ CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ.....	- 10 -
§1 CƠ SỞ VẬT LÝ CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ.....	- 10 -
I/ Thế giới vi mô: .....	- 10 -
§2 HAI Ý TƯỞNG CƠ BẢN CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ.....	- 12 -
1/ Ý tưởng lượng tử hóa. ....	- 12 -
2/ Ý tưởng lưỡng sóng hạt. ....	- 13 -
§3 CƠ SỞ TOÁN HỌC CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ .....	- 16 -
I/.Toán tử tuyến tính : .....	- 16 -
II/ Giao hoán tử và phản giao hoán tử : .....	- 17 -
III/. Bài toán trị riêng của toán tử tuyến tính : .....	- 18 -
IV/. Một số toán tử đặc biệt : .....	- 19 -
V/.Toán tử liên hợp và toán tử tự liên hợp (hermitic) : .....	- 24 -
§4 THÍ NGHIỆM QUAN TRỌNG TÍNH THỐNG KÊ CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ.....	- 28 -
I/ Thí nghiệm hai lỗ : .....	- 28 -
II/ Tính thống kê của CHLT: .....	- 29 -
§5 CÁC BIẾN ĐỘNG LỰC TRONG CƠ HỌC LƯỢNG TỬ .....	- 30 -
1/.Các toán tử tọa độ : .....	- 30 -
2/.Các toán tử xung lượng : .....	- 30 -
3/. Các toán tử Moment xung lượng L và toán tử moment xung lượng bình phương L <sup>2</sup> .....	- 31 -
4/.Toán tử Hamilton H: .....	- 32 -
§6 CÁC HỆ THỨC BẤT ĐỊNH.....	- 34 -
I/ Ý Tưởng Lưỡng Sóng Hạt Và các Hệ Thức Bất Định: .....	- 34 -
II/ Ý nghĩa của các hệ thức bất định: .....	- 35 -
III/ Một số kết quả thu được từ hệ thức bất định : .....	- 37 -
IV . Xây dựng hệ thức bất định Heisenberg: .....	- 39 -
§7 HÀM SỐNG . NGUYÊN LÝ CHỒNG CHẬP TRẠNG THÁI.....	- 44 -
I/. Hàm Sóng:.....	- 44 -
II/. Nguyên lý chồng chập trạng thái: .....	- 45 -
§8 PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER.....	- 46 -
I/. Cách “Thiết lập” phương trình: .....	- 46 -

§9 CÁC PHƯƠNG TRÌNH CHUYỂN ĐỘNG LƯỢNG TỬ.....	49 -
I/ Nhận xét chung : .....	49 -
II/ Các móc Poisson lượng tử : .....	50 -
III/ Đạo hàm theo thời gian của các toán tử :.....	52 -
IV/ Các phương trình chuyển động lượng tử . Định lý Ehrenfest . .....	54 -
§10 SỰ LIÊN HỆ GIỮA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ VỚI CƠ HỌC CỔ ĐIỂN VÀ QUANG HỌC.....	56 -
I/ Sự chuyển từ phương trình Schrodinger hiện đại về phương trình Hamilton – Jacobi cổ điển : .....	56 -
II/ Cơ học lượng tử và quang học : .....	60 -
§11 CÁC CÁCH PHÁT BIỂU CƠ HỌC LƯỢNG TỬ.....	61 -
I/ Cơ học lượng tử của Schrodinger: .....	61 -
II/ Cơ học ma trận Heisenberg: .....	62 -
III/ Cơ học lượng tử của P.Dirac : .....	62 -
IV/ Cơ học lượng tử của R. Feynman : .....	64 -
§12 CÁC CÁCH MÔ TẢ SỰ PHỤ THUỘC THỜI GIAN CỦA HỆ VI MÔ. -	65 -
1/ Bức tranh Schrodinger : .....	66 -
2/ Bức tranh Heisenberg: .....	67 -
3/ Bức tranh tương tác : .....	67 -
4/ So sánh hai bức tranh cơ bản: (bức tranh Schrodinger và bức tranh Heisenberg ) . .....	67 -
§13 CÁC BIỂU DIỄN TRONG CƠ HỌC LƯỢNG TỬ.....	68 -
I/ Cơ học lượng tử trong $\hat{F}$ biểu diễn : .....	68 -
II/ Vài biểu diễn cụ thể: .....	71 -
CHƯƠNG II. MỘT SỐ BÀI TOÁN CƠ BẢN CỦA PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER .....	73 -
§ 1 CHUYỂN ĐỘNG TỰ DO.....	73 -
§2 BÀI TOÁN MỘT CHIỀU .....	75 -
I/ Hạt trong hố thế ( giếng thế ) sâu vô hạn : .....	75 -
II/ Thế bậc thang: .....	76 -
III/ Sự truyền qua hàng rào thế có bề rộng hữu hạn: .....	78 -
IV/ Hố thế năng có các thành cao hữu hạn .....	79 -
§3 DAO ĐỘNG TỬ ĐIỀU HÒA .....	82 -
§4 CHUYỂN ĐỘNG TRONG TRƯỜNG XUYÊN TÂM. NGUYÊN TỬ HYDRO .....	84 -
I/ Momen góc : (Momen động lượng ).....	84 -
II/ Hạt trong trường đối xứng cầu (chuyển động xuyên tâm).....	87 -
III/ Nguyên tử Hydrogen : .....	89 -
CHƯƠNG III. LÝ THUYẾT SPIN CỦA PAULI .....	92 -
§1 SPIN CỦA ELECTRON .....	93 -
1/ Các toán tử spin : .....	93 -
2. Các tính chất của các toán tử Pauli .....	96 -
3. Vecto Spin .....	96 -
§2 PHƯƠNG TRÌNH PAULI.....	100 -

---

CHƯƠNG IV. PHƯƠNG PHÁP NHIỄU LOẠN .....	- 102 -
§1 LÝ THUYẾT NHIỄU LOẠN DỪNG KHÔNG SUY BIẾN . .....	- 102 -
§2 HIỆU ỨNG ZEEMANN .....	- 105 -
§3 LÝ THUYẾT NHIỄU LOẠN DỪNG CÓ SUY BIẾN HIỆU ỨNG STARK ...	- 108 -
I/ Lý thuyết nhiễu loạn dừng có suy biến : .....	- 108 -
II/ Hiệu ứng Stark trong nguyên tử Hydrogen : .....	- 109 -
CHƯƠNG V. HỆ CÁC HẠT ĐỒNG NHẤT .....	- 115 -
§1 TOÁN TỬ HOÁN VỊ. NGUYÊN LÝ PAULI.....	- 115 -
1/ Toán tử hoán vị.....	- 115 -
2/ Các hạt Bose và các hạt Fermi (các boson và các Fermion) .....	- 116 -
3/ Hàm sóng của hệ đồng nhất không tương tác. Nguyên lý Pauli. ....	- 116 -
§2 NĂNG LƯỢNG TRAO ĐỔI VÀ NGUYÊN TỬ HELI.....	- 118 -
I/. Định nghĩa năng lượng trao đổi : .....	- 118 -
II/. Nguyên tử Heli : .....	- 118 -
BÀI KẾT .....	- 122 -
I/. Các nguyên lý và bài toán cơ bản của cơ học lượng tử : .....	- 122 -
1/. Hàm Sóng Và Nguyên Lý Chồng Chất Trạng Thái.....	- 122 -
2/ Giá Trị Trung Bình: .....	- 123 -
3/ Bài toán trị riêng và các giá trị đo được của các đại lượng vật lý trong thực nghiệm .....	- 123 -
4/ Phương trình cơ bản: .....	- 123 -
5/ Nguyên lý không phân biệt các hạt đồng nhất:.....	- 124 -
II/ Những chân trời mới – hay là sự phát triển tiếp tục của Cơ học lượng tử:-	- 125 -
Tài liệu tham khảo: .....	- 127 -

## LỜI NÓI ĐẦU

### Các bạn sinh viên Vật Lý thân mến !

Cuốn giáo trình cơ học lượng tử này được soạn dành cho các bạn. Đây là sự chắt lọc từ hầu hết các giáo trình cơ học lượng tử đã được soạn bởi những nhà vật lý nổi tiếng trên thế giới cũng như ở Việt Nam. Bởi lẽ cơ học lượng tử là thành tựu vĩ đại của trí tuệ nhân loại thế kỷ thứ 20, đã và vẫn đang là cơ sở của các mũi nhọn của vật lý học thậm chí ngay cả trong thế kỷ 21 sắp tới.

Tuy nhiên do: Cơ học lượng tử là môn rất khó, rất phức tạp thậm chí “kỳ quặc”, nên việc soạn một giáo trình cho dễ hiểu sáng sủa trong khuôn khổ 100 trang giấy là điều vô cùng khó khăn thậm chí là điều không thể thực hiện – ít nhất là đối với tôi. Không những thế khuôn khổ của giáo trình này là tương đương với 60 tiết học trong chương trình học của khoa vật lý hiện nay. Vì vậy mặc dù tôi đã hết sức cố gắng và bỏ nhiều công sức cuốn sách này không thể được xem là một giáo trình hoàn chỉnh và nó càng không thể thay thế cho việc nghe giảng của các bạn.

Tôi xin lưu ý các bạn đôi điều về đặc điểm của giáo trình này. Phạm vi ứng dụng của Cơ học lượng tử là vô cùng rộng rãi, ví dụ như: Hóa học lượng tử, Lý thuyết trường Lượng tử, Lý thuyết hạt nhân và Cấu trúc hạt nhân nguyên tử, Lý thuyết chất rắn, Điện tử học lượng tử... và còn nhiều ngành khác nữa. Chính vì thế để hiểu thật sự đầy đủ về Cơ học lượng tử phải trình bày trong những tài liệu khá đồ sộ. Tuy nhiên do nhiều lý do xuất phát từ thực tiễn học tập và giảng dạy của chúng ta hiện nay, giáo trình này chỉ chủ yếu trả lời cho câu hỏi: “Cơ học lượng tử ra đời từ đâu?” hay “Cơ sở của Cơ học lượng tử là gì?” (chương I). Công cụ toán học của Cơ học lượng tử chỉ được giới thiệu những nét cơ sở (toán tử tuyến tính tự liên hợp) và những tính toán cho những vấn đề cụ thể được xem là thứ yếu và đôi khi chỉ trình bày dưới dạng giới thiệu nội dung phương pháp chứ không áp dụng vào những bài toán cụ thể (Phương pháp nhiễu loạn)

Tôi thật xúc động khi những dòng cuối cùng của giáo trình này được viết vào ngày 20-11-1998- ngày mà từ nhiều năm nay các bạn thường dành cho tôi những lời chúc mừng tốt đẹp, Vì thế tôi muốn các bạn xem giáo trình này như là lời cảm ơn của tôi đến với các bạn. Hơn thế nữa tôi cũng hy vọng rằng đây cũng là biểu hiện của lòng biết ơn chân thành và sâu sắc của tôi đối với biết bao thầy cô giáo, những người đã thắp lên ngọn lửa khát vọng tìm hiểu thế giới tự nhiên trong tâm hồn tôi mà trong số đó có không ít người mà vĩnh viễn không bao giờ tôi có thể gặp lại được nữa.

Chúc các bạn gặt hái nhiều thành công trong học tập.

Ngày 20-11-1998.

Nguyễn Duy Hưng

## BÀI MỞ ĐẦU

### §1 LƯỢC ĐỒ TỔNG QUÁT CỦA VẬT LÝ HỌC

Vật lý học cho tới ngày nay dựa trên hai học thuyết vật lý lớn đó là :Thuyết tương đối của Einstein và lý thuyết lượng tử.

1/ Lý thuyết tương đối của Einstein được đặc trưng bởi hằng số  $c$  là vận tốc ánh sáng trong chân không . Về mặt độ lớn  $c = 300000 \text{ km/s}$ . Trong lý thuyết tương đối  $c$  là vận tốc truyền sóng điện từ và cho tới nay nó được xem là vận tốc giới hạn của mọi chuyển động .

2/ Lý thuyết lượng tử (M.plank,N.Bohr) được đặc trưng bởi hằng số Plank . Hằng số này dùng làm độ đo sự phân lập các giá trị khả dĩ các đại lượng vật lý và là cầu nối hai mặt sóng hạt của chuyển động của vật chất .

$$[h] = [\text{năng lượng}] \times [\text{thời gian}] = [\text{tác dụng}]$$

Plank đã gọi  $h$  là lượng tử tác dụng .

$$H = 6,62517.10^{-37} \text{ Js}$$

Dựa vào hai hằng số này ta có thể thiết lập lược đồ tổng quát của vật lý học như sau .

$v \ll c$ Cơ học cổ điển $h=0$	$v \approx c$ Cơ học tương đối tính $h=0$
$v \ll c$ $h$ hữu hạn . Cơ học lượng tử không tương đối tính	$v \approx c$ , $h$ hữu hạn. Cơ học lượng tử tương đối tính Lý thuyết trường lượng tử.

Tài liệu này chỉ đề cập đến miền  $v \ll c$ ,  $h$  hữu hạn, tức là phần cơ học lượng tử không tương đối tính .

### §2 BỨC TRANH THẾ GIỚI CỦA VẬT LÝ HỌC CỔ ĐIỂN

#### 1/ Hai ý tưởng cơ bản của vật lý học cổ điển :

Vật lý học cho tới cuối thế kỷ 19 đầu thế kỷ 20 - mà ngày nay thường gọi là vật lý học cổ điển - đã xây dựng một bức tranh hài hòa về thế giới vật chất. Nó bao gồm hai lĩnh vực chủ yếu đó là : Cơ học của Newton và lý thuyết điện từ của Maxwell. Tất cả những kiến thức đó đã cho phép nhân loại giải thích được một số lượng khổng lồ các hiện tượng ,các sự kiện quan sát được từ thế giới vật chất .

Cơ sở của vật lý học cổ điển là hai ý tưởng sau :

- Ý tưởng thứ nhất là ý tưởng nguyên tử. Theo ý tưởng này thì vật chất được cấu tạo từ những hạt rất nhỏ không thể phân chia được và được gọi là nguyên tử (Atomos).

- Ý tưởng thứ hai là ý tưởng về sự tồn tại của một môi trường đàn hồi đặc biệt chứa đầy khắp nơi trong không gian và nhờ đó mà các nguyên tử tương tác được với nhau.

- Ý tưởng nguyên tử được đề xuất từ rất sớm (thế kỷ thứ IV trước công nguyên - Democrite) và cho tới thế kỷ 20 đã có những bằng chứng tuyệt đối không phủ nhận được về sự tồn tại thực sự của nguyên tử và phân tử. Con người đã có những dụng cụ dùng để ghi lại được những ion riêng rẽ - các ống đếm - và những dụng cụ quan sát được quỹ đạo của các hạt (buồng Wilson) Thậm chí quan sát được bằng mắt và chụp ảnh được những phân tử lớn riêng rẽ của một vài hợp chất hữu cơ.

## **II/ Hai bộ phận chủ yếu của vật lý học cổ điển :**

1/ Cơ học Newton :

Cơ học Newton - dựa trên ba định luật của Newton - là một bộ phận rất quan trọng của vật lý học cổ điển. Trong ba định luật đó định luật thứ hai có vai trò đặc biệt. Đó là phương trình :

$$\vec{F} = m\vec{a}$$

hay là : Lực = khối lượng  $\times$  gia tốc.

Phương trình này có vai trò đặc biệt vì về trái là lực là nguyên nhân gây ra sự biến đổi vận động, về phải có khối lượng tức là thuộc tính của vật chất và gia tốc tức là hệ thức giữa không gian và thời gian. Điều này có nghĩa là phương trình này thiết lập mối quan hệ giữa vật chất, vận động, Không gian, thời gian và nguyên nhân gây ra vận động.

Cùng với định luật hấp dẫn, ba định luật trên đã cho phép con người giải thích được một cách thỏa đáng chuyển động của những hệ vĩ mô trung hòa điện

2/Lý thuyết điện từ

Một bộ phận chủ yếu khác của vật lý học cổ điển nghiên cứu các hiện tượng điện và từ. Các hiện tượng này được cho bằng các đại lượng điện từ  $\vec{E}, \vec{D}, \vec{B}, \vec{H}$ . Các đại lượng này được hệ thống nhờ hệ phương trình Maxwell :

$$\nabla * \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$\nabla * \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$$

$$\nabla \vec{D} = \rho$$

$$\nabla \vec{B} = 0$$

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E}, \vec{B} = \mu \vec{H}, \vec{J} = \sigma \vec{E}$$

Từ hệ phương trình này có thể giải quyết thỏa đáng tất cả các bài toán điện từ đã biết.



Hai bộ phận của vật lý học được liên hệ với nhau nhờ định luật Lorentz nói rằng : Một điện tích  $e$  chuyển động với vận tốc  $v$  trong điện từ trường chịu tác dụng của một lực :

$$\vec{F} = e \left[ \vec{E} + (\vec{v} \times \vec{B}) \right]$$

### **III/ Hai dạng vật chất cơ bản của vật lý học cổ điển :**

a/ Dạng hạt : Hạt được đặc trưng bằng tính định xứ trong không gian và sự tồn tại quỹ đạo khi chuyển động . Hạt còn có những đặc trưng khác như khối lượng , xung lượng , moment .v.v.

b/ Dạng sóng : Sóng là quá trình lan truyền nhiễu loạn trong không gian và chuyển động sóng là chuyển động của trạng thái vật chất chứ không phải là chuyển động của chính vật chất . Chuyển động sóng tuần hoàn trong không gian và thời gian . Đặc trưng quan trọng của chuyển động sóng là sóng có khả năng giao thoa và nhiễu xạ .

Vật lý học cổ điển đã nghiên cứu hai loại sóng :

- Sóng cơ : là sự lan truyền dao động của các hạt vật chất trong môi trường truyền sóng , loại sóng này chỉ có thể lan truyền trong môi trường vật chất .

- Sóng điện từ là sự lan truyền những dao động điện từ , Sóng điện từ có thể lan truyền cả trong chân không .

### **IV/ Những quan niệm cơ sở của vật lý học cổ điển :**

Vật lý học cổ điển dựa trên ba quan niệm cơ sở sau :

1/ Sự biến đổi liên tục của các đại lượng vật lý , hay rộng hơn là tính liên tục của thế giới vật chất .

Về mặt toán học điều này có nghĩa là các hàm mô tả các đại lượng vật lý là các hàm số liên tục . Chính quan niệm này là cơ sở của khái niệm quỹ đạo của chuyển động . Một thuộc tính cố hữu của chuyển động trong vật lý học cổ điển .

2/ Quyết định luận cổ điển (Quyết định luận Laplace). Quan niệm này cho rằng nếu biết được trạng thái của vật ở một thời điểm nào đó , biết được tất cả các lực tác dụng vào vật thì có thể tiên đoán một cách chính xác tuyệt đối trạng thái của vật ở thời điểm tiếp theo . quan niệm này là hình thức cơ bản của nguyên lý nhân quả trong vật lý học cổ điển .

3/ Phương pháp phân tích :

Phương pháp của vật lý học cổ điển để xem xét, nghiên cứu các hiện tượng và sự vật là phương pháp phân tích . Điều này có nghĩa là :

Thứ nhất : vật có thể được tách ra khỏi môi trường xung quanh và được xem xét như là một vật hoàn toàn độc lập.

Thứ hai : trong những trường cần thiết vật có thể chia nhỏ ra từng phần để nghiên cứu và việc chia nhỏ đó không cản trở việc ta hiểu biết bản chất của sự vật .

Nói riêng trong mọi trường hợp dụng cụ đo và đối tượng được quan sát là hoàn toàn độc lập với nhau .

### §3 NHỮNG BẾ TẮC CỦA VẬT LÝ HỌC CỔ ĐIỂN VÀ NHỮNG Ý TƯỞNG NỬA LƯỢNG TỬ

Mặc dù giải quyết được một số lượng rất lớn các hiện tượng của thế giới vật chất, song cho tới cuối thế kỷ 19 vật lý học cổ điển đã vấp phải một số hiện tượng mà trong khuôn khổ các định luật đã có vật lý học cổ điển không thể giải quyết được. Đó là các hiện tượng sau:

1/ Bức xạ của vật đen tuyệt đối.

2/ Hiện tượng quang điện.

3/ Hiệu ứng Compton.

4/ Cấu tạo nguyên tử và lý thuyết nửa lượng tử của Bohr.

Để giải quyết những vấn đề trên vật lý học phải đưa ra những quan niệm mới vượt xa khuôn khổ của những quan niệm trước đây. Tương ứng với những hiện tượng trên, đó là những quan niệm sau đây:

1'/ Các nguyên tử của vật chất không hấp thụ và bức xạ năng lượng một cách liên tục mà ngược lại hấp thụ và bức xạ một cách gián đoạn các lượng tử năng lượng.

$$\varepsilon = h\nu = \hbar\omega$$

$h$  là hằng số phổ biến - lượng tử tác dụng - hằng số Plank

2'/ Ánh sáng là một chùm hạt - lượng tử ánh sáng - hay photon. Các photon có năng lượng xác định và xung lượng xác định.

$$\varepsilon = \hbar\omega, \quad \vec{P} = \hbar\vec{k}$$

Hệ thức này được gọi là hệ thức Planck - Einstein. Như vậy hệ thức này đã liên hệ các thông số của hạt với các thông số của sóng ( $\varepsilon$  và  $\vec{P}$  với  $\omega$  và  $\vec{k}$ ).

3'/ Từ kết quả thu được của hiệu ứng Compton:

$$\Delta\lambda = 2\lambda_c \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

Trong đó:  $\lambda_c$  là bước sóng Compton của electron.

Công thức trên có nghĩa là: Sự thay đổi của bước sóng chỉ phụ thuộc vào góc tán xạ mà không phụ thuộc vào tần số ban đầu (của tia tới). Kết quả này được giải thích dễ dàng từ sự va chạm của một photon với mặt electron mà không thể giải thích theo quan điểm sóng.

4'/ Các điện tử trong nguyên tử không chuyển động trên những quỹ đạo bất kỳ mà chỉ có thể ở những quỹ đạo xác định gọi là quỹ đạo lượng tử. Các quỹ đạo này được nhận sao cho moment xung lượng  $M$  của điện tử thỏa mãn hệ thức:

$$M = n\hbar \quad (n=1,2,\dots)$$

Trên các quỹ đạo lượng tử các electron có năng lượng xác định. Khi electron chuyển từ quỹ đạo này sang quỹ đạo khác gần hạt nhân hơn nguyên tử sẽ phát ra

một photon và electron thực hiện một bước nhảy lượng tử. Tần số của photon phát ra được tính theo công thức:

$$E_n - E_m = \hbar \omega_{nm}$$

5/ Năm 1927, C.Davison và L.Germer phát hiện hiện tượng nhiễu xạ của electron. Hiện tượng này đã được DeBroglie tiên đoán từ 1924. Hiện tượng này chỉ có thể giải thích được bằng những giả thiết hoàn toàn mới so với những quan niệm cũ của vật lý cổ điển đó là việc thừa nhận giả thiết của De Broglie: hạt electron và vi hạt nói chung là có tính chất lưỡng nguyên: hay lưỡng tính sóng – hạt. Cụ thể là:

Mỗi hạt tự do có năng lượng E và xung lượng  $\vec{P}$  xác định được biểu diễn bởi một sóng phẳng đơn sắc có tần số vòng  $\omega$  và vector sóng  $\vec{k}$  liên hệ với E và  $\vec{P}$  bởi hệ thức giống như hệ thức Planck- Eistein đối với photon :

$$E = \hbar \omega \quad , \quad \vec{P} = \hbar \vec{k}$$

Sóng phẳng này có dạng :

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}[\vec{p}\vec{r} - Et]} = A e^{i[\vec{k}\vec{r} - \omega t]}$$

và được gọi là sóng De Broglie .

## CHƯƠNG I. CƠ SỞ CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

### §1 CƠ SỞ VẬT LÝ CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

#### I/ Thế giới vi mô:

1/ Hạt vi mô:

Các phân tử, nguyên tử, hạt nhân nguyên tử và các hạt cơ bản được gọi là các hạt vi mô. Danh sách của các hạt cơ bản cho đến nay đã trở nên một danh sách khá đồ sộ nhưng có thể phân thành ba loại là: các lượng tử của trường điện từ - các photon, các hardron và các lepton. Các hardron là các hạt tham gia tương tác mạnh (tương tác hạt nhân) và ngược lại các lepton bao gồm: các electron, các muon và các neutrino. Nhóm các hardron đông đảo hơn cả: chúng bao gồm các nucleon (proton và neutron), các meson (các hạt này nhẹ hơn proton) và các hyperon (các hạt nặng hơn proton). Ngoại trừ trường hợp đặc biệt là photon và một vài meton trung hòa các hạt còn lại đều có phản hạt.

Thuộc tính rất quen thuộc của hầu hết vi hạt là có khối lượng nghỉ. Ví dụ khối lượng nghỉ  $m$  của electron là bằng:  $9,1 \cdot 10^{-28} g$ , khối lượng của photon là 1836 $m$ , của neutron là: 1839 $m$ , của muon là 207 $m$ . Khối lượng nghỉ của photon và của tất cả các neutrino đều bằng không.

Khối lượng của phân tử, nguyên tử và hạt nhân nguyên tử bằng tổng khối lượng của các hạt tạo thành trừ đi độ hụt khối. Độ hụt khối bằng năng lượng dùng để phá vỡ vi hạt thành những hạt cấu thành (thường được gọi là năng lượng liên kết) chia cho bình phương vận tốc ánh sáng. Các nucleon trong hạt nhân có năng lượng liên kết lớn nhất- độ hụt khối của mỗi nucleon lớn hơn 10 $m$ .

Điện tích của hạt vi mô bằng bội nguyên lần điện tích của electron, tức là bằng bội lần  $1,6 \cdot 10^{-19} C$ . Ngoài những hạt vi mô tích điện có nhiều hạt vi mô trung hòa về điện. Điện tích của hạt vi mô phức tạp bằng tổng đại số các điện tích của các hạt thành phần.

2/ Spin của vi hạt.

Spin là một trong những thuộc tính quan trọng của hạt vi mô. Spin có thể được xem như là moment cơ riêng của hạt. Bình phương của Spin bằng:  $\hbar^2 s(s+1)$  trong đó  $s$  có thể là số nguyên hay bán nguyên ( $s$  thường được gọi là Spin),  $\hbar$  là hằng số phổ biến, đóng vai trò đặc biệt quan trọng trong cơ học lượng tử, giá trị của  $\hbar$  bằng:  $1,05 \cdot 10^{-34} J \cdot s$ . Spin của photon bằng 1, Spin của electron bằng 1/2.

Spin là một thuộc tính đặc biệt của vi hạt. Và do đó nó không thể có mô hình tương tự cổ điển. Việc giải thích Spin như là moment cơ riêng của vi hạt tuy thuận tiện cho việc hình dung nhưng là không đúng với thực tế vì khái niệm "vi hạt quay quanh nó" là không chấp nhận được.

Momemt góc của vi hạt có thuộc tính khác thường. Cụ thể hình chiếu trên phương bất kỳ của nó chỉ nhận các giá trị gián đoạn:  $\hbar s, \hbar(s-1), \dots, -\hbar s$ , tức là  $(2s + 1)$  giá trị. Điều này có thể nói là vi hạt có  $(2s + 1)$  trạng thái Spin. Như vậy sự tồn tại Spin đối với vi hạt đưa tới sự xuất hiện bậc tự do trong để mô tả nó.

3/ Boson và Fermion:

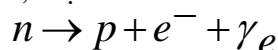
Trên cơ sở Spin người ta chia vi hạt thành hai nhóm. Nhóm một là các vi hạt có Spin nguyên hoặc bằng không. Nhóm hai là các vi hạt có Spin bán nguyên.

Nhóm thứ nhất có đặc điểm là chúng có thể có vô số hạt cùng tồn tại trong một trạng thái lượng tử, tuân theo thống kê Bose - Einstein và do đó nhóm này thường được gọi tắt là các Boson. Như vậy các meson và photon là các Boson.

Nhóm thứ hai có đặc điểm là chúng chỉ tồn tại nhiều nhất một hạt trong mỗi trạng thái lượng tử, tuân theo thống kê Fermi - Dirac và do đó các vi hạt thuộc nhóm này được gọi tắt là các Fermion. Các lepton - nói riêng là các electron - các nucleon và các hyperon là các Fermion.

4/ Tính không bền của vi hạt:

Tất cả các hạt cơ bản - tức photon, electron, proton và neutrino đều không bền. Điều này có nghĩa là các hạt đó tự phát phân rã thành những hạt vi mô khác không cần một tác động nào từ bên ngoài. Ví dụ một neutron tự phân rã thành một proton, một electron và một neutrino:



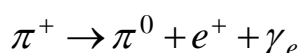
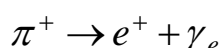
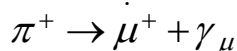
Chúng ta không thể tiên đoán được vào thời điểm nào sự phân rã sẽ xảy ra nhưng từ thực nghiệm người ta đã tìm được quy luật phân rã.

$$N(t) = N_0 \exp(-t/\tau)$$

trong đó  $\tau$  là hằng số đặc trưng của neutron- được gọi là thời gian sống của neutron và bằng  $10^3 s$ . Lượng  $\exp(-t/\tau)$  xác định xác suất của neutron không phân rã tại thời điểm  $t$ .

Các hạt vi mô không bền được đặc trưng bằng thời gian sống của nó. Thời gian sống của một hạt càng nhỏ thì xác suất phân hủy của hạt càng lớn. Ví dụ: Thời gian sống của muon là  $2,2 \cdot 10^{-6} s$ , thời gian sống của  $\pi^-$  meson dương là  $2,6 \cdot 10^{-8} s$ , thời gian sống của  $\pi^-$  meson trung hòa là  $10^{-16} s$  và của hyperon là  $10^{-10} s$ . Một nhóm hạt khác có thời gian sống cực kỳ ngắn vào khoảng  $10^{-22} s$  đến  $10^{-23} s$ . Các hạt này được gọi là các hạt cộng hưởng.

Một điều lưu ý là: các meson và các hyperon có thể phân rã theo nhiều cách khác nhau. Ví dụ các  $\pi^-$  meson dương có thể phân rã theo kiểu như sau:



Với một meson  $\pi$  bất kỳ không thể tiên đoán được vào lúc nào cũng như kiểu phân rã nào sẽ xảy ra. Tính không bền không phải chỉ có đối với các hạt cơ bản mà còn đúng đối với các vi hạt khác. Hiện tượng phóng xạ cho thấy rằng hạt nhân

nguyên tử là không bền vững. Các nguyên tử cũng như các phân tử khi ở trạng thái kích thích cũng không hề, chúng sẽ tự phát trở về trạng thái ban đầu của chúng hay chuyển sang trạng thái kích thích thấp hơn.

Nhưng cần lưu ý rằng tính không bền vững không phải là bản chất chung của các vi hạt bởi vì ngoài các hạt không bền có một số hạt vi mô khác là bền. Ví dụ như: photon, electron, proton, neutron, các hạt nhân nguyên tử bền cũng như các nguyên tử và phân tử ở trạng thái cơ bản.

Ngoài tính chất đã nêu trên hạt cơ bản còn có một đặc tính “kỳ quặc” thể hiện trong sự biến đổi qua lại của chúng. Tuy nhiên bạn đọc có thể tìm hiểu thêm vấn đề đó qua các giáo trình khác chi tiết hơn về vật lý hạt cơ bản.

## §2 HAI Ý TƯỞNG CƠ BẢN CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

### 1/ Ý tưởng lượng tử hóa.

Bản chất của ý tưởng lượng tử hóa là: một số đại lượng vật lý mô tả các đối tượng vi mô trong những điều kiện thích hợp chỉ có thể nhận những giá trị rời rạc xác định. Khi đó ta nói rằng các đại lượng ấy bị lượng tử hóa.

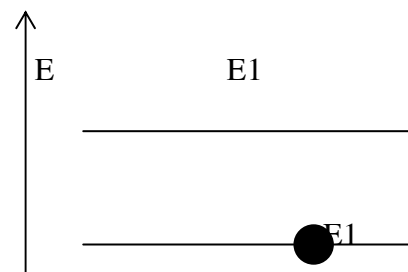
Ý tưởng này do M. Planck đưa ra năm 1900 khi nghiên cứu bức xạ của vật đen tuyệt đối. Planck đã giả thuyết rằng năng lượng của bức xạ điện từ do vật phát ra không phải là liên tục mà là gián đoạn - theo từng lượng tử năng lượng, năng lượng của mỗi lượng tử này bằng:  $\varepsilon = \hbar\omega$ . Giả thuyết này đã bảo đảm cho sự phù hợp của lý thuyết và thực nghiệm, đặc biệt là loại bỏ được khó khăn khi chuyển lý thuyết đến vùng tần số lớn - mà người ta gọi là tai biến tử ngoại.

Tiếp theo Planck, Bohr đã áp dụng ý tưởng lượng tử hóa vào mẫu hành tinh nguyên tử của Rutherford để xây dựng mẫu nguyên tử mới của ông, mẫu nguyên tử Bohr - hay mẫu nguyên tử nửa lượng tử. Mặc dù lý thuyết Bohr về nguyên tử vẫn có những mâu thuẫn nội tại song nó được coi là bước đầu tiên để xây dựng lý thuyết hoàn chỉnh về cấu trúc nguyên tử.

Để hiểu nội dung của ý tưởng này ta xét ví dụ các electron trong nguyên tử. Ở trong nguyên tử năng lượng của electron nhận những giá trị rời rạc - những giá trị này tập hợp thành phổ năng lượng, như hình:

Giả sử ta chỉ quan tâm đến hai mức  $E_1$  và  $E_2$ . Khi đó electron

chỉ có thể có năng lượng là  $E_1$   
hoặc  $E_2$  chứ không thể có năng lượng  $E$  thỏa mãn:  $E_1 < E < E_2$ .  
Đây là điểm cơ bản của cơ học



lượng tử sau này. Electron có thể chuyển từ mức năng lượng  $E_1$  sang mức  $E_2$  hoặc ngược lại, trong hai quá trình đó electron nhận và phát ra một photon tương ứng. Quá trình đó được gọi là phép chuyển dời lượng tử.

Nhưng lưu ý rằng: Năng lượng electron không phải khi nào cũng bị lượng tử hóa. Chỉ các electron ở trong trạng thái liên kết (ví dụ electron trong nguyên tử) thì năng lượng của nó mới bị lượng tử hóa. Các electron ở trạng thái tự do thì năng lượng của nó không bị lượng tử hóa.

Sự lượng tử hóa không phải chỉ xảy ra với năng lượng mà là với nhiều đại lượng khác. Cụ thể moment xung lượng của vi hạt cũng bị lượng tử hóa. Khác với năng lượng là đại lượng chỉ bị lượng tử hóa trong trạng thái liên kết, moment xung lượng luôn bị lượng tử hóa. Các giá trị quan sát được của bình phương moment xung lượng của hạt vi mô được cho bởi công thức:

$$M^2 = \hbar^2 \ell(\ell + 1)$$

trong đó  $\ell$  là số nguyên,  $\ell = 0, 1, 2, \dots$ . Nếu ta xét moment góc của một electron trong nguyên tử ở trạng thái dừng thứ thì số  $\ell$  nhận giá trị từ 0 đến  $(n-1)$ .

Người ta thường gọi Moment xung lượng (hay moment góc) một cách đơn giản là moment. Thực nghiệm chứng tỏ rằng: hình chiếu của moment của vi hạt lên một phương nhất định nào đó (ta thường gọi đó là hình chiếu trên trục oz cho tiện) nhận các giá trị:

$$M_z = \hbar m$$

trong đó  $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell$ . Như vậy với mỗi giá trị của  $\ell$ , số  $m$  nhận  $(2\ell + 1)$  giá trị gián đoạn

Ở phần trên ta đã nói về Spin của vi hạt và có thể coi Spin như là “moment nội tại” của vi hạt. Người ta gọi nó là moment Spin để phân biệt moment thường là moment quỹ đạo. Nếu  $s$  là Spin của vi hạt thì hình chiếu của moment Spin sẽ nhận các giá trị  $\hbar\sigma$  trong đó  $\sigma = -s, -s + 1, \dots, s - 1, s$ .

Như vậy hình chiếu của Spin của một electron sẽ nhận hai giá trị:  $-\frac{\hbar}{2}$  và  $+\frac{\hbar}{2}$ .

Các số  $n, \ell, m, \sigma$  xác định các giá trị gián đoạn khác nhau của các biến động lực lượng tử hóa và được gọi là các số lượng tử.

$n$  là số lượng tử chính.

$\ell$  là số lượng tử quỹ đạo.

$m$  là số lượng tử từ.

$\sigma$  là số lượng tử Spin.

## 2/ Ý tưởng lưỡng sóng hạt.

Trong vật lý học cổ điển người ta coi các khái niệm sóng và hạt là loại trừ nhau. Hạt được đặc trưng bằng khối lượng, có tính định xứ trong không gian và có

thể va chạm với nhau. Ngược lại sóng không có tính định xứ nhưng có khả năng giao thoa, nhiễu xạ...

Song những quan niệm quen thuộc này không thể chuyển qua cơ học lượng tử một cách trực tiếp được. Ở mức độ các hiện tượng vi mô sự phân định rõ ràng hai dạng chuyển động này bị phai mờ đi một cách căn bản. Cụ thể là:

Chuyển động của vi hạt đồng thời được đặc trưng bằng cả tính sóng lẫn tính hạt. Có thể nói rằng các vi hạt ở mức độ nào đó giống như hạt và ở mức độ nào đó giống với sóng. Các mức độ đó phụ thuộc vào điều kiện mà ở đó ta xét hạt vi mô.

Nếu trong vật lý cổ điển hạt và sóng là hai mặt đối lập loại trừ nhau- hoặc là hạt hoặc là sóng – thì đối với các đối tượng vi mô các mặt đối lập này kết hợp với nhau một cách biện chứng trong khuôn khổ một đối tượng vi mô thống nhất là tính lưỡng sóng hạt.

Ý tưởng lưỡng sóng hạt được Einstein áp dụng cho bức xạ điện từ để giải thích hiện tượng quang điện. Đến 1924 De Broglie đã mở rộng ý tưởng lưỡng sóng hạt không chỉ cho bức xạ điện từ mà cho mọi hạt vi mô nói chung. Cụ thể mỗi hạt vi mô đồng thời có những đặc trưng hạt (năng lượng và xung lượng) và cả những đặc trưng sóng (tần số và bước sóng). Mối liên hệ giữa những đặc trưng đó được cho bằng hệ thức Planck - Einstein:

$$E = \hbar\omega, \quad \vec{P} = \hbar\vec{k} \quad (2.1)$$

Như vậy là một hạt chuyển động được liên hệ với một sóng mà bước sóng được xác định theo công thức:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Ý tưởng này đã cho các giả thiết của Bohr một cơ sở vững chắc. Chuyển động của electron trong nguyên tử Hydro lúc đó sẽ bền vững khi dọc theo các quỹ đạo được quy định là bằng một số nguyên lần bước sóng. Các sóng dọc theo quỹ đạo được quy định là các sóng dừng.

Điều này tương đương với quy tắc lượng tử của Bohr:

$$E = n \frac{h\omega}{2}$$

trong đó  $\omega$  là tần số quay của electron quanh hạt nhân, tức là số vòng quay của electron quanh hạt nhân. Thật vậy, theo De Broglie độ dài của quỹ đạo bằng số nguyên lần bước sóng:

$$n\lambda = 2\pi r, \quad \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

Từ đó suy ra :

$$2\pi r m v = n h$$

hay nhân cả hai vế với  $\omega$  và chia cho 2 ta có:

$$n \frac{1}{2} h \omega = \frac{m v \cdot 2\pi r \omega}{2}$$

Nhưng để ý rằng :

$$2\pi r \omega = v$$



nên ta có :

$$\frac{mv^2}{2} = E = n \frac{1}{2} h\omega$$

đây chính là quy tắc lượng tử của Bohr.

Vấn đề đặt ra là với các hạt vi mô – như hạt bụi chẳng hạn – tại sao ta không nhận thấy tính lưỡng sóng hạt của nó? Lý do đơn giản là từ công thức De Broglie ta tính được bước sóng của nó nhỏ hơn kích thước rất nhiều lần. Do đó trong điều kiện đó ta không thể phát hiện thấy tính sóng của hạt bụi. Còn khi “hạt” có khối lượng càng nhỏ thì bước sóng De Broglie của hạt càng lớn khi đó hạt càng khác với hạt cổ điển và cũng vì thế hạt vi mô càng giống với một sóng hơn. Chú ý là sóng De Broglie khác với những sóng có thực mà ta nói ở trên. Như vậy ta hình dung quan hệ sóng – hạt như thế nào? . Có hai cách hình dung sai về mối quan hệ này.

Cách thứ nhất : là hạt tựa trên sóng. Cách này là do chính De Broglie đề xuất trong thời kỳ đầu. Theo ông thì hạt tựa như ngồi trên sóng và sóng cuốn nó tới đâu thì hạt tới đó- hay nói đơn giản là sóng chuyên chở hạt. Nhưng thực tế là sóng có thể tồn tại cùng hạt ngay cả trong chân không hoàn toàn như vậy sóng có thể là sản phẩm của chính hạt. Như vậy hạt tạo ra sóng như thế nào? Sóng chia sẻ “số phận” cùng với hạt như thế nào khi hạt tương tác với các hạt khác và với môi trường? Đó là những câu hỏi mà quan niệm “sóng chuyên chở hạt” không trả lời được.

Cách thứ hai : đó là quan niệm cho rằng hạt là sản phẩm được tạo nên từ các sóng, là một cơ cấu rắn đặc do các sóng kết lại hay nói cách khác hạt như là bó sóng là nơi chồng chất các sóng có bước sóng rất ngắn. Tuy nhiên thực tế cho thấy các sóng tham gia hiện tượng tán sắc như vậy nếu hạt là bó sóng thì hạt phải bị tan rã khi những điều kiện của sự tán sắc xuất hiện. Nhưng trong thực tế hạt không hề bị tan trong những điều kiện đó.

Như vậy cả hai cách hình dung trên là hai cách hình dung máy móc theo kiểu cổ điển đều không chấp nhận được.

Cần lưu ý rằng tính lưỡng sóng hạt không phải chỉ có khi xét một tập hợp các hạt mà ngay cả khi có một hạt duy nhất tính lưỡng sóng hạt của hạt vi mô vẫn biểu lộ rõ rệt.

Có nhiều cách giải thích ý nghĩa của sóng De Broglie nhưng chưa có cách nào hoàn chỉnh. Cách giải thích của Born coi đó là “sóng xác suất” có vẻ như được nhiều người chấp nhận hơn cả. Nhưng sóng xác suất vẫn không mang một ý nghĩa vật lý cụ thể như sóng cơ học (sóng âm, sóng trên mặt nước ...) Có cách giải thích rằng hạt vi mô lúc thì mang tính sóng, lúc thì mang tính hạt. Cũng có cách giải thích rằng hạt vi mô đồng thời vừa là sóng vừa là hạt.

Đáng chú ý hơn cả là quan niệm rằng : hạt vi mô không phải là sóng cũng không phải là hạt. Tính lưỡng sóng hạt của vi hạt được hiểu như khả năng tiềm tàng của thế giới vi mô thể hiện những tính chất khác biệt của nó phụ thuộc vào điều kiện “bên ngoài” cụ thể là điều kiện quan sát nó.

### §3 CƠ SỞ TOÁN HỌC CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

Bất cứ lý thuyết vật lý nào cũng là sự kết hợp giữa các ý tưởng vật lý đưa ra trên cơ sở thực nghiệm và một công cụ toán học nhất định .

Trong giai đoạn xây dựng lý thuyết vật lý công cụ toán học có thể là chưa có - như khi Newton xây dựng lý thuyết của ông , nhưng khi xây dựng cơ học lượng tử thì công cụ toán học tương ứng đã được xây dựng từ trước . Công cụ đó là lý thuyết các toán tử tuyến tính .

#### **I. Toán tử tuyến tính :**

a/ Toán tử và ví dụ :

Toán tử là sự tương ứng giữa các phần tử của tập X với các phần tử của tập Y nào . Các thuật ngữ đồng nghĩa với toán tử là : ánh xạ , hay hàm . Nếu hai tập X và Y là hai tập hợp số thì người ta dùng khái niệm hàm số . Vài trường hợp đặc biệt của toán tử là :

- Một toán tử từ một không gian X vào chính nó gọi là một phép biến đổi .
- Một toán tử từ một không gian hàm số vô hạn chiều vào một tập hợp số được gọi là một phiếm hàm .

Với một toán tử  $\hat{L}$  bất kỳ tác dụng trong không gian X và Y ta thường viết : (toán tử là chữ in có dấu mũ):

$$\hat{L}\psi(x) = \varphi(x), \psi(x) \in X, \varphi(x) \in Y$$

và nói rằng : toán tử  $\hat{L}$  tác dụng lên hàm (hay vectơ )  $\varphi(x)$ .

Các ví dụ về toán tử như : Phép tích phân , vi phân , phép lấy căn phép nâng lên lũy thừa ...

b/ Toán tử tuyến tính :

Trường hợp đặc biệt quan trọng của các toán tử đó là các toán tử tuyến tính . Đó là các toán tử thỏa mãn hai điều kiện :

$$\begin{aligned} +/ \hat{L}(\psi_1 + \psi_2) &= \hat{L}\psi_1 + \hat{L}\psi_2 \\ +/ \hat{L}(\lambda\psi) &= \lambda\hat{L}\psi \end{aligned}$$

(Đòi hỏi tính tuyến tính của toán tử có thể xem như biểu hiện của nguyên lý chồng chập trong cơ học lượng tử).

Có thể dễ dàng thấy rằng : Các toán tử đạo hàm , vi phân , tích phân là các toán tử tuyến tính , còn các toán tử nâng lên thừa , toán tử khai căn và toán tử Logarit không phải là toán tử tuyến tính .

Với các toán tử tuyến tính ta có một số phép toán sau đây:

+ Toán tử đơn vị :  $\hat{L}$  được gọi là toán tử đơn vị nếu nó thỏa mãn điều kiện:  
 $L\psi = \psi = 1.\psi$ .

+ Phép cộng các toán tử : Tổng của hai (hay nhiều) toán tử và là một toán tử mà kết quả tác dụng của nó bằng tổng các kết quả tác dụng của các toán tử thành phần , nghĩa là :

$$\hat{C} = \hat{A} + \hat{B} \quad \text{nếu} \quad \hat{C}\psi = \hat{B}\psi + \hat{A}\psi$$

+ Phép nhân các toán tử:  $\hat{C}$  được gọi là tích của hai toán tử  $\hat{A}$  và  $\hat{B}$  và viết là:  $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$  nếu có:  $\hat{C}\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi)$ .

lưu ý với phép nhân các toán tử thứ tự của chúng trong phép nhân là quan trọng.

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

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

+ Toán tử liên hợp phức: Toán tử  $\hat{L}^*$  được gọi là toán tử liên hợp phức của  $\hat{L}$  nếu như:

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

+ Phép nâng lên lũy thừa:

$$\hat{L}^n = \hat{L}\hat{L}\dots\hat{L} \quad (n: \text{là thừa số}).$$

### **III/ Giao hoán tử và phản giao hoán tử:**

Giao hoán tử của hai toán tử  $\hat{A}$  và  $\hat{B}$  là: Với các toán tử có hai bài toán quan trọng cần xét là giao hoán tử và bài toán trị riêng

$$[\hat{A}\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Phản giao hoán tử của hai toán tử  $\hat{A}$  và  $\hat{B}$  là:

$$[\hat{A}\hat{B}]_+ = \{\hat{A}\hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$$

Lưu ý là giao hoán tử cũng như phản giao hoán tử của hai toán tử không phải luôn bằng không.

Ví dụ: cho

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

Khi đó:

$$[\hat{A}\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = x \frac{d}{dx} - \frac{d}{dx} x$$

Hay:

$$[A, B]\psi = \left( x \frac{d}{dx} - \frac{d}{dx} x \right) \psi = x \frac{d\psi}{dx} - \frac{d}{dx} (x\psi)$$

$$= x \frac{d\psi}{dx} - x \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{dx}{dx} = -\psi$$

$$\text{Vậy:} \quad \left[ x, \frac{d}{dx} \right] \psi = -\psi \quad \text{hay} \quad \left[ x, \frac{d}{dx} \right] = -1$$

**III/. Bài toán trị riêng của toán tử tuyến tính :**

Giả sử ta xét toán tử  $\hat{L}$  , Nếu có :

$$\hat{L}\psi(x) = \lambda\psi(x) \quad (\lambda=\text{const}, \psi(x) \neq 0).$$

Thì  $\psi(x)$  được gọi là hàm riêng và  $\lambda$  được gọi là các trị riêng tương ứng của toán tử  $\hat{L}$  . Mỗi toán tử có thể có nhiều hàm riêng và trị riêng tương ứng ; khi đó ta viết :

$$\hat{L}\psi_n(x) = \lambda_n\psi_n(x) \quad (n=0,1,2\dots).$$

Tập hợp các giá trị  $\{\lambda_n\}$  được gọi là các phổ các trị riêng của toán tử tuyến tính  $\hat{L}$  .

Như vậy các hàm riêng của toán tử tuyến tính  $\hat{L}$  là các hàm có tính chất đặc biệt là nó giữ không đổi dạng dưới tác dụng của toán tử ngoài phép nhân với một trị số (trị riêng) .

Ví dụ : giả sử  $L = -i \frac{\partial}{\partial x}$  . Điều kiện là hàm  $\psi(x)$  tuần hoàn trong khoảng  $[0,L]$ . Phương trình trị riêng có dạng :

$$-i \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = \lambda \psi(x)$$

Hay chính xác hơn :

$$-i \frac{\partial \psi_n(x)}{\partial x} = \lambda_n \psi_n(x)$$

Từ phương trình ta có ngay :

$$\psi_n(x) = A e^{i\lambda_n x}$$

Từ điều kiện tuần hoàn ta có :

$$\psi_n(x) = \psi_n(X + L)$$

Mặt khác lưu ý rằng :

$$e^{i\lambda_n L} = 1 = e^{i2n\pi} \text{ Vậy :}$$

$$\lambda_n = \frac{2n\pi}{L}, (n = \pm 0, \pm 1, \pm 2 \dots)$$

Như vậy  $\lambda_n$  lập thành một tập hợp gián đoạn . khi  $L \rightarrow \infty$  các  $\lambda_n$  càng sát lại gần nhau hơn hay chính xác hơn khoảng cách giữa các  $\lambda_n \rightarrow 0$ . khi đó các hàm riêng trở thành :

$$\psi_\lambda(x) = A e^{i\lambda x}$$

Với  $\lambda$  là một biến liên tục có thể lấy bất cứ giá trị nào . từ đây ta cũng nên lưu ý một điều là : các trị riêng phụ thuộc vào điều kiện biên của nghiệm của phương trình trị riêng , nghĩa là chúng chỉ xác định khi cho các điều kiện biên .

Để xác định thừa số A ta xét điều kiện chuẩn hóa :

$$\int_0^L \psi^* \psi dx = |A|^2 L = 1$$

Từ đó ta suy ra :

$$A = \sqrt{\frac{1}{L}}$$

Vậy cuối cùng ta có :

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\lambda_n x}, \lambda_n = \frac{2n\pi}{L}$$

Lưu ý rằng phổ các trị riêng của một toán tử tuyến tính có thể liên tục, có thể gián đoạn hay vừa liên tục vừa gián đoạn.

Một điều cần lưu ý là : Với một trị riêng có thể có S hàm riêng tương ứng. Khi đó ta nói rằng các hàm riêng đó suy biến bậc S

#### IV/. Một số toán tử đặt biệt :

Các hàm đặt biệt có vai trò quan trọng trong vật lý cổ điển. Trong cơ học lượng tử các hàm đặt biệt xuất hiện trong khá nhiều bài toán quan trọng.

1/ Toán tử LH : Trong lý thuyết các hàm đặt biệt ta thường xét các đa thức - được gọi là đa thức Hermite (phương trình cho nghiệm là đa thức Hermite được gọi là phương trình Hermite hay phương trình Hermite-Tsebussep)-có dạng :

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_2(x) = -2 + 4x^2$$

$$H_3(x) = -12x + 8x^3 + \dots$$

$$H_n(x) = (2x)^n - \frac{n(n-1)(2x)^{n-2}}{1!} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)(2x)^{n-4}}{2!} + \dots$$

Các đa thức Hermite có các tính chất :

$$xH_n(x) = nH_{n-1}(x) + \frac{1}{2}H_{n+1}(x)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} H_m(x) H_n(x) dx = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{mn}$$

Như vậy nếu xét toán tử :

$$L_H = \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx}$$

Thì bằng cách lấy đạo hàm trực tiếp ta có kết quả :

$$L_H H_n(x) = -2n H_n(x) \quad (n=0,1,2\dots)$$

2/ Toán tử LP:

Ta đã biết các đa thức Legendre.

$$P_\ell = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dx^\ell} (x^2 - 1)^\ell, \quad -1 \leq x \leq 1$$

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}$$

$$P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x, \quad P_4(x) = \frac{35}{8}x^4 - \frac{15}{4}x^2 + \frac{3}{8}$$

$$P_5(x) = \frac{63}{8}x^5 - \frac{35}{8}x^3 + \frac{15}{8}x.$$

$$P_\ell(-1) = (-1)^\ell, \quad P_\ell(1) = 1$$

Các đa thức Legendre có tính chất :

$$a/ \int_{-1}^1 P_\ell(x) P_m(x) dx = \frac{2}{2\ell+1} \delta_{\ell m}$$

$$b/ \frac{1}{\sqrt{1-2rx+r^2}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(x) r^\ell.$$

$$c/ (1+\ell)P_{\ell+1}(x) - (2\ell+1)xP_\ell(x) + \ell P_{\ell-1}(x) = 0.$$

Nếu đưa vào toán tử :

$$L_P \equiv (1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx}.$$

Thì ta thấy các đa thức Legendre liên hệ với Lp như sau:

$$L_P P_\ell(x) = -\ell(\ell+1)P_\ell(x)$$

3/ Toán tử Laplace :

Trong lý thuyết các hàm đặc biệt các hàm cầu có vai trò đặc biệt quan trọng .

Đó là các hàm :

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} (-1)^m \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{2(\ell+m)!}} \sin^m \theta \frac{\partial^m}{(\partial \cos \theta)^m} P_\ell(\cos \theta)$$

Với  $m \geq 0$ .

$$\text{Với } m \leq 0, \text{ hàm } Y_\ell^m(\theta, \varphi) = (-1)^m (Y_\ell^{-m})^*$$

(dấu \* chỉ liên hợp phức).

Với mỗi giá trị của  $\ell=0,1,2,3\dots$  ta có  $2\ell+1$  giá trị của  $m$ .

$$m = -\ell, -\ell+1, -\ell+2, \dots, \ell-2, \ell-1, \ell.$$

Một số biểu thức của  $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$  với  $\ell$  và  $m$  cụ thể:

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_\ell^0 = \frac{3}{\sqrt{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_\ell^{\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left( \frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$$

$$Y_2^{\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_2^{\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$$

Các hàm cầu có tính chất:

$$a/ \int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_\ell^m(\theta, \varphi) Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

$$b/ \cos \theta Y_\ell^m = a Y_{\ell+1}^m + b Y_{\ell-1}^m$$

$$c/ e^{i\varphi} \sin \theta Y_\ell^m = c Y_{\ell+1}^{m+1} + d Y_{\ell-1}^{m+1}$$

Trong đó  $a, b, c, d$  là những hằng số chỉ phụ thuộc  $\ell, m$ . Nếu đưa vào toán tử

:

$$\Lambda = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

Thì các hàm cầu liên hệ với toán tử này như sau:

$$\Lambda Y_\ell^m(\theta, \varphi) = -\ell(\ell+1) Y_\ell^m(\theta, \varphi)$$

4/. Toán tử LL:

Các đa thức Legendre có dạng:

$$L_k^j(x) = \frac{d^j}{dx^j} L_k(x), \quad (j \leq k)$$

Với :

$$L_k = e^x \frac{d^k}{dx^k} (x^k e^{-x})$$

Ta có một số đa thức cụ thể :

$$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = 1 - x$$

$$L_2(x) = 2 - 4x + x^2$$

$$L_3(x) = 6 - 18x + 9x^2 - x^3, \text{ v.v..}$$

Các đa thức Laguerre có tính chất :

$$\int_0^\infty L_k^j(x) L_k^j(x) x^j e^{-x} dx = \frac{(k!)^3}{(k-j)!} \delta_{kk}$$

Nếu đưa vào toán tử :

$$L_L \equiv x \frac{d^2}{dx^2} + (j+1-x) \frac{d}{dx}$$

Thì ta có liên hệ của LL với các đa thức Laguerre như sau

$$L_L L_k^j(x) = -(k-j) L_k^j(x); \quad (j \leq k)$$

5/. Toán tử LF :

Các hàm siêu bội suy biến là các hàm có dạng :

$$F(a, b, z) = 1 + \frac{a}{b \cdot 1!} z + \frac{a(a+1)}{b(b+1)} z^2 + \frac{a(a+1)(a+2)}{b(b+1)(b+2) 3!} z^3 + \dots$$

Ta thấy nếu a là một số nguyên âm tức là  $a = -n$  (n là số nguyên dương) thì hàm siêu bội  $F(-n, b, z)$  sẽ là một đa thức của z. Có thể chứng minh được rằng :

$$F(a, b, z) \rightarrow cz^{a-b} e^z \quad \text{khi } \text{Re}z \rightarrow \infty, c = \text{const.}$$

$$F(a, b, z) \rightarrow d(-z)^{-a} \quad \text{khi } \text{Re}z \rightarrow \infty, d = \text{const.}$$

Hơn nữa dựa vào biểu thức định nghĩa của hàm siêu bội, đa thức Hermite và đa thức Legendre ta có các hệ thức sau :



$$H_{2n}(x) = (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} F\left(-n, \frac{1}{2}, x^2\right)$$

$$H_{2n+1}(x) = (-1)^n \frac{2(2n+1)!}{n!} F\left(-n, \frac{3}{2}, x^2\right)$$

$$L_k^j(x) = \frac{(J+k+1)!}{(j+1)!} F(-k, j+1, x)$$

(k nguyên, không âm)

Ngoài ra nếu các hàm Bessel viết dạng :

$$J_p(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!(k+p+1)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{p+2k}$$

thì ta có hệ thức :(n là số nguyên):

$$J_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} \left(\frac{x}{2}\right)^n e^{-ix} F\left(\frac{1}{2}+n, 1+2n, 2ix\right)$$

Như vậy nếu đưa vào toán tử :

$$L_F \equiv z \frac{d^2}{dz^2} + (b-z) \frac{d}{dz}$$

thì ta thấy các hàm siêu bội suy biến liên hệ với toán tử LF như sau :

$$L_F F(a, b, z) = aF(a, b, z) \quad (5)$$

Nếu b không phải là một số nguyên thì nghiệm thứ hai của phương trình (5) có dạng:

$$G(a, b, z) = z^{1-b} F(a-b-1, 2-b, z)$$

6/.Toán tử Laplace toán phần :

Trong giáo trình phương trình toán lý ta đã gặp nhiều lần toán tử : (Trong hệ tọa độ Descartes )

$$\Delta \equiv \nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (6)$$

Trong các hệ tọa độ suy rộng q1, q2, q3:

$$\begin{aligned}x &= \varphi_1(q_1, q_2, q_3) \\y &= \varphi_2(q_1, q_2, q_3) \\z &= \varphi_3(q_1, q_2, q_3)\end{aligned}$$

Trong đó  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$  là những hàm liên tục và đơn trị. Nếu đặt :

$$H_i^2 = \left( \frac{\partial \varphi_1}{\partial q_i} \right)^2 + \left( \frac{\partial \varphi_2}{\partial q_i} \right)^2 + \left( \frac{\partial \varphi_3}{\partial q_i} \right)^2 \quad ; \quad (i=1,2,3)$$

và gọi là các hệ số Lamé ,thì ta có :

$$\Delta = \frac{1}{H_1 H_2 H_3} \left\{ \frac{\partial}{\partial q_1} \left( \frac{H_2 H_3}{H_1} \frac{\partial}{\partial q_1} \right) + \frac{\partial}{\partial q_2} \left( \frac{H_3 H_1}{H_2} \frac{\partial}{\partial q_2} \right) + \frac{\partial}{\partial q_3} \left( \frac{H_1 H_2}{H_3} \frac{\partial}{\partial q_3} \right) \right\}$$

Cụ thể với hệ tọa độ cầu  $q_1 = r, q_2 = \theta, q_3 = \varphi$  ta có:  $H_1 = 1, H_2 = r, H_3 = r \sin \theta$ . Do đó :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

Với hệ tọa độ trục :  $q_1 = r, q_2 = \varphi, q_3 = z$ .

Ta có :

$$H_1 = 1, H_2 = r, H_3 = 1.$$

Như vậy trong hệ trụ ta có :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Nhớ lại biểu thức (3) ta có :

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\Lambda}{r^2}$$

### VI. Toán tử liên hợp và toán tử tự liên hợp (hermitic) :

1/ Tích vô hướng của hai hàm :

Giả sử có hai hàm  $\varphi(x)$  và  $\psi(x)$  nào đó ,khi đó tích vô hướng của hai hàm này được định nghĩa bởi:

$$(\varphi, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \psi(x) dx$$

trong đó dấu \* chỉ liên hợp phức .(Nói thêm : hai hàm  $\varphi(x)$  và  $\psi(x)$  phải bằng không tại vô cùng ).

Biểu thức :

$$(\psi, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx$$

được gọi là chuẩn của hàm  $\psi(x)$

Nếu viết  $\psi(x)$  dạng cột :

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ \dots \\ \psi_n(x) \end{pmatrix}$$

và  $\varphi(x)$  dạng ma trận hàng :

$$\varphi^*(x) = (\varphi_1^*(x), \varphi_2^*(x), \dots, \varphi_n^*(x))$$

thì :

$$(\varphi, \psi) = \sum_n \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^*(x) \psi_n(x) dx$$

Nếu  $\psi_1(x), \psi_2(x), \dots, \psi_n(x)$  là các hằng số  $C_1, C_2, \dots, C_n$ . còn  $\varphi_1^*(x), \varphi_2^*(x), \dots, \varphi_n^*(x)$  là các hằng số  $b_1^*, b_2^*, \dots, b_n^*$  thì tích vô hướng  $(\varphi, \psi)$  được cho bằng tích :

$$(\varphi, \psi) = \sum_I b_i^* C_i$$

Trường hợp :  $\varphi = \varphi(x, y, z)$ ;  $\psi = \psi(x, y, z)$  thì :

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi^*(x, y, z) \psi(x, y, z) dx dy dz$$

Có thể chứng minh tích vô hướng định nghĩa như trên có các tính chất như sau :

$$\begin{aligned} +/ (\varphi, \psi) &= (\varphi, \psi)^* \\ +/ (\varphi, \psi_1 + \psi_2) &= (\varphi, \psi_1) + (\varphi, \psi_2) \\ +/ (\varphi_1 + \varphi_2, \psi) &= (\varphi_1, \psi) + (\varphi_2, \psi) \\ +/ (\lambda \varphi, \psi) &= \lambda^* (\varphi, \psi) \quad ; \quad \lambda = const \\ +/ (\varphi, \lambda \psi) &= \lambda (\varphi, \psi) \end{aligned}$$

(Các chứng minh này không khó khăn lắm, bạn đọc có thể xem như một bài tập)

2/ Toán tử tuyến tính liên hợp (Hermitic) và toán tử Unità :

Giả sử  $\hat{A}$  và  $\hat{B}$  là hai toán tử được gọi là liên hợp của nhau (hay liên hợp với nhau), và kí hiệu là:  $\hat{A} = \hat{B}^\dagger$  và  $\hat{B} = \hat{A}^\dagger$ , dấu  $\dagger$  là dấu liên hợp.

Ví dụ 1 : Ta xét với toán tử  $C$  là một số hãy tìm  $C^\dagger$ , theo định nghĩa ta có :

$$(\varphi, C\psi) = \int \varphi^*(x) C \psi(x) dx,$$

$$(C^+ \varphi, \psi) = \int C^{+*} \varphi^*(x) \psi(x) dx$$

Hơn thế nữa :

$$\int C^{+*} \varphi^*(x) \psi(x) dx = \int \varphi^*(x) C \psi(x) dx$$

Như vậy :  $C^{+*} = C$  hay  $C = C^*$ .

Nghĩa là toán tử liên hợp của một hằng số là liên hợp phức của nó .

Ví dụ 2 : Ta xét toán tử nhân với  $U(x)$  . Hãy tìm toán tử  $U^+(x)$ .

Lập luận tương tự như trên để thấy rằng :

$$U^+(x) = U^*(x)$$

Hay tổng quát hơn : Nếu  $L$  là một toán tử nhân thì :

$$L^+ = L^*.$$

Ví dụ 3 : Hãy tìm  $\left(\frac{d}{dx}\right)^+$  .

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \left(\frac{d}{dx}\right)^+ \varphi(x) \right]^* \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \left(\frac{d}{dx}\right) \psi(x) dx$$

Ta có :

Tích phân từng phần vế phải ta được :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \left(\frac{d}{dx}\right) \psi(x) dx = \varphi^*(x) \psi(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varphi^*(x)}{dx} \psi(x) dx$$

Vì  $\varphi^*(x)$  và  $\psi(x)$  triệt tiêu tại  $\pm\infty$  nên ta có :

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^+ = -\frac{d}{dx}$$

Như vậy ta có :

$$\left(\varphi, \frac{d\psi}{dx}\right) = -\left(\frac{d\varphi}{dx}, \psi\right)$$

(Luôn phải lưu ý rằng các hàm  $\varphi(x)$  và  $\psi(x)$  triệt tiêu tại  $\pm\infty$ ). Hay tổng quát hơn ta có :

$$\left(\varphi, \frac{d^n \psi}{dx^n}\right) = (-1)^n \left(\frac{d^n \varphi}{dx^n}, \psi\right)$$

3/. Toán tử tự liên hợp (Hecmitic) và toán tử unita .

a/ Toán tử tự liên hợp : Nếu  $\hat{L}$  thỏa mãn điều kiện :

$$L = L^+.$$

nghĩa là :

$$\int \varphi^* L \psi dx = \int (L \varphi)^* \psi dx$$

thì  $L$  là toán tử tự liên hợp (Hay Hecmitic )

Toán tử Unita : Nếu L thỏa mãn :

$$L L^\dagger = L^\dagger L = 1.$$

Thì L gọi là toán tử unita . Toán tử unita thường được kí hiệu là U .

Có thể chứng minh rằng :  $L = -i \frac{d}{dx}$  là tự liên hợp .

b/. Các tính chất của toán tử tự liên hợp (Hecmitic) :

Tính chất 1 : Một toán tử có các trị riêng thực khi và chỉ khi nó là toán tử Hecmitic .

Chứng minh :

Từ bài toán trị riêng :

$$L\psi(x) = \lambda \psi(x)$$

Ta có :

$$\int \varphi^* L\psi(x) dx = \lambda \int \varphi^*(x) \psi(x) dx$$

$$\int \varphi L^* \psi^*(x) dx = \lambda^* \int \psi(x) \varphi^*(x) dx$$

Trừ cho nhau :

$$\int \varphi^* L\psi dx - \int \varphi L^* \psi^* dx = (\lambda - \lambda^*) \int \varphi^* \psi dx$$

do đó :

$$\int \varphi^* (L - L^*) \psi dx = (\lambda - \lambda^*) \int \varphi^* \psi dx$$

Như vậy rõ ràng  $\lambda = \lambda^*$  khi và chỉ khi L là tự liên hợp  $L = L^\dagger$ .

Tính chất 2 : Các hàm riêng của một toán tử Hecmitic ứng với các trị riêng khác nhau là trực giao .

Chứng minh :

Cũng xuất phát từ bài toán :

$$L\psi(x) = \lambda \psi(x)$$

ta có

$$L\psi_n = \lambda_n \psi_n$$

$$L^* \psi_m^* = \lambda_m^* \psi_m^*.$$

Hay viết cách khác :

$$\int \psi_m^* L\psi_n dx = \lambda_n \int \psi_m^* \psi_n dx$$

Và :

$$\int \psi_n L^* \psi_m^* dx = \lambda_m^* \int \psi_n \psi_m^* dx$$

Từ đó ta có :

$$\int \psi_m^* (L - L^*) \psi_n dx = (\lambda_n - \lambda_m^*) \int \psi_m^* \psi_n dx$$

Nếu L là Hecmitic thì  $L = L^\dagger$ . (và do đó  $\lambda_n = \lambda_m^*$ ) khi đó :

$$(\lambda_n - \lambda_m^*) \int \psi_m^* \psi_n dx = 0$$

Vì  $\lambda_n \neq \lambda_m^*$  (chúng ta giả thiết các trị riêng khác nhau) nên :  
 $\int \psi_m^* \psi_n dx = 0$

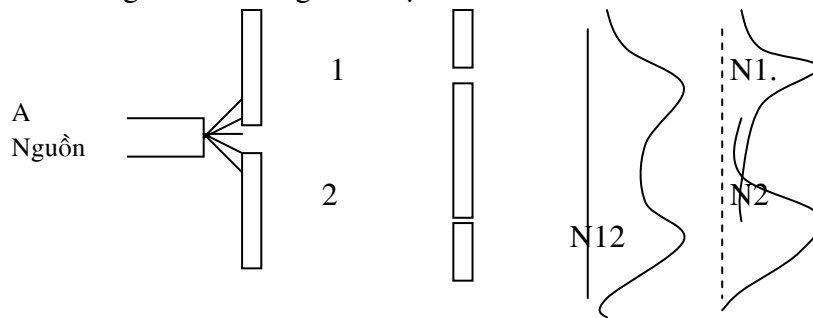
Nghĩa là các  $\psi_n$  và  $\psi_m$  là trực giao với nhau .

## §4 THÍ NGHIỆM QUAN TRỌNG TÍNH THỐNG KÊ CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

### I/ Thí nghiệm hai lỗ :

"thí nghiệm mà người ta nghĩ ra để bao gồm được mọi bí ẩn của CHLT và dẫn dắt ta đến tất cả những nghịch lý ,những bí mật , những điều kỳ lạ của tự nhiên một cách đầy đủ ....Chính trong thí nghiệm này chứa đựng những điều bí ẩn căn bản ".Nhận xét về thí nghiệm này Feynman đã từng nói như thế .

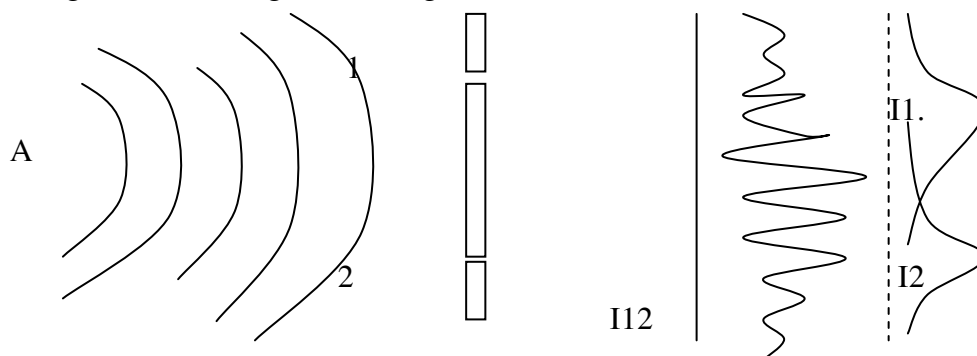
1/ nguồn là những viên đạn :



Sơ đồ thí nghiệm được bố trí như hình vẽ .Nguồn A là nguồn phóng xạ (ví dụ súng tiểu liên ) .Trong đó N1 là số đạn tới bia khi bịt kín lỗ 2 , N2 là số đạn tới bia khi bịt kín lỗ 1 và N12 là số đạn trung bình của cả 1 và 2 đều mở (trong một đơn vị thời gian).

Kết quả :  $N12 = N1 + N2$

2/ Nguồn là hai sóng (ví dụ sóng nước) :



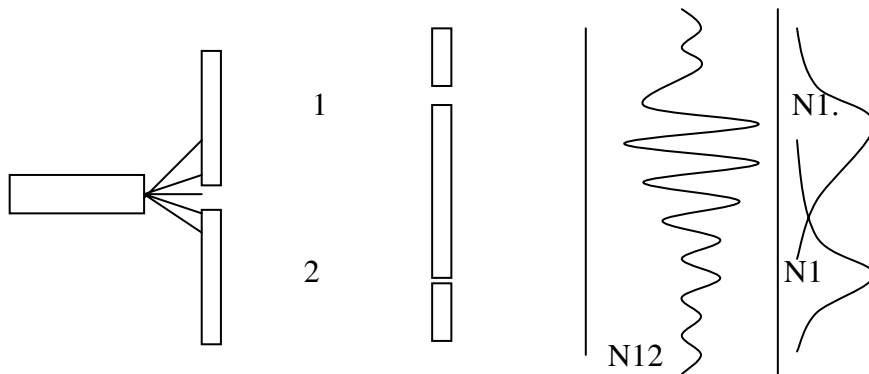
I12 Cường độ sóng trên "bia" khi cả hai lỗ đều mở

I1 Cường độ sóng trên "bia" khi lỗ 2 đóng .

I2 Cường độ sóng trên "bia" khi lỗ 1 đóng.

Kết quả :  $I12 \neq I1 + I2$  ( Có giao thoa sóng )

3/ Nguồn là chùm electron :



Kết quả :  $N_{12} \neq N_1 + N_2$  (có giao thoa)

Với :  $I_{12}$  ,  $I_1$  ,  $I_2$  là các xác suất tìm thấy electron ở “bia” khi đóng lỗ 2 , đóng lỗ 1 , mở cả hai lỗ tương ứng .

Tóm tắt ba trường hợp

Đạn	Sóng	Electron
Gián đoạn . Xác suất tới được đo: $N_{12} = N_1 + N_2$ Không có giao thoa	Không gián đoạn Cường độ sóng được đo: $I_{12} \neq I_1 + I_2$ Có giao thoa	Gián đoạn Xác suất tới được đo : $N_{12} \neq N_1 + N_2$ Có giao thoa

Với trường hợp chùm electron : các electron đi tới “bia” (hay máy thu) theo từng lượng nhỏ gián đoạn giống như đó là những hạt nhưng xác suất để những hạt đó tới “bia” lại được xác định theo cùng những quy luật như quy luật xác định cường độ của sóng nước . Vì vậy có thể nói rằng các electron vừa giống như chùm hạt vừa giống như sóng . Nó đồng thời là hai “ vật” hoàn toàn khác nhau .

### II/ Tính thống kê của CHLT:

Trong các điều kiện bên ngoài cho trước kết quả của sự tương tác giữa đối tượng vi mô và dụng cụ đo nói chung không thể tiên đoán một cách chính xác , mà chỉ có thể dự kiến với một xác suất nào đó . Tập hợp các kết quả như vậy đưa đến thống kê tương ứng với phân bố nhất định của xác suất. Như vậy ta phải đưa yếu tố xác suất vào cách mô tả đối tượng vi mô và trạng thái của nó .

Khái niệm xác suất cũng được dùng trong VLCD nhưng với một ý nghĩa khác . Trong VLCD xác suất được đưa vào chỉ khi điều kiện của bài toán không được biết một cách đầy đủ và phải lấy trung bình theo các tham số chưa biết . Song ở đó đã giả thiết rằng về nguyên tắc thì sự trung bình hóa là không bắt buộc và luôn luôn có thể chính xác hóa các điều kiện để khẳng định là một trong số các kết quả khả dĩ được xây ra hoàn toàn còn các kết quả khác sẽ không xây ra . Như vậy , trong VLCD xác suất đã phản ánh sự phát biểu không đầy đủ bài toán . Sự không đầy đủ ở đây là không thể tránh được nhưng về nguyên tắc là có thể loại trừ được . Trong vật lý cổ điển nguyên lý quyết định luận Laplace đã loại bỏ yếu tố ngẫu nhiên khi mô tả đáng điệu của từng đối tượng riêng biệt do đó các định luật của cơ học cổ điển là các định luật động lực chứ không phải là các định luật thống kê . Tính thống kê chỉ xuất hiện khi nghiên cứu một tập hợp lớn các hạt và là một phương pháp có tính thủ thuật .

Ngược lại trong Cơ học lượng tử yếu tố ngẫu nhiên có mặt trong dáng điệu của từng vi hạt riêng biệt. Yếu tố ngẫu nhiên là hệ quả của sự hữu hạn của hằng số Planck và nguyên lý bất định Heisenberg. Do đó cơ học lượng tử là một lý thuyết thống kê về mặt nguyên tắc. Và tính xác suất là một trong những đặc điểm của nó.

## §5 CÁC BIẾN ĐỘNG LỰC TRONG CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

Trong vật lý học cổ điển trạng thái và biến động lực là hai khái niệm cơ bản. Các biến động lực như tọa độ, xung lượng, moment xung lượng và năng lượng trong vật lý học cổ điển là những hàm số (thông thường).

Nhưng trong cơ học lượng tử vấn đề khác một cách cơ bản. Cụ thể là:

- Trong cơ học lượng tử mỗi biến động lực của cơ học cổ điển được đối ứng với một toán tử Hermitic.

- Có thể chuyển các hệ thức động lực từ cơ học cổ điển sang cơ học lượng tử với dạng như cũ nhưng trong đó phải thay các đại lượng vật lý bằng các toán tử Hermitic tương ứng.

Nói cách khác: Công cụ của cơ học lượng tử được xây dựng hoàn toàn tương tự như công cụ cơ học cổ điển nếu ta thay các biến động lực của cơ học cổ điển (là các hàm) bằng các toán tử Hermitic.

### 1/. Các toán tử tọa độ :

$$\vec{r} = (x, y, z) \equiv (x_1, x_2, x_3)$$

Đó là các toán tử nhân hàm  $f$  trên đó các toán tử tác dụng với các lượng  $x_i (i=1,2,3)$ . Phép nhân hiểu theo nghĩa thông thường, các hàm  $f=f(x,y,z)$ .

Ta có thể dễ dàng tìm được các giao hoán tử của các toán tử tọa độ là:

$$[x_i, x_j] = 0. \quad (5.1)$$

Để ý rằng vì các lượng  $x_i$  là thực nên các toán tử này đều là Hermitic.

### 2/. Các toán tử xung lượng :

$$\vec{P} = (P_1, P_2, P_3) = (P_x, P_y, P_z)$$

Các toán tử xung lượng có dạng:

$$\vec{P} = -i\hbar \nabla, \quad P_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}; \quad (i = 1, 2, 3) \quad (5.2)$$

Các giao hoán tử có dạng:

$$[P_i, P_j] = 0; \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (5.3)$$

Ta cũng có thể tìm được các giao hoán tử của các toán tử này với các toán tử tọa độ là:

$$[x_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij}; \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (5.4)$$

Các toán tử xung lượng cũng là các toán tử Hermitic.



### 3/. Các toán tử Moment xung lượng L và toán tử moment xung lượng bình phương L<sup>2</sup>.

Định nghĩa :Toán tử L được định nghĩa như sau :

$$L=[r*p].$$

Như vậy ta có :

$$L_1 = x_2 p_3 - x_3 p_2 = -i\hbar \left( x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \right)$$

$$L_2 = x_3 p_1 - x_1 p_3 = -i\hbar \left( x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} \right)$$

$$L_3 = x_1 p_2 - x_2 p_1 = -i\hbar \left( x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \right)$$

Các giao hoán tử :

Trước hết ta có thể tìm giao hoán tử của L với các toán tử x ; cụ thể ta có :

$$\begin{aligned} [L_1, x_2] &= [x_2 p_3 - x_3 p_2, x_2] = [x_2 p_3, x_2] - [x_3 p_2, x_2] \\ &= x_2 [p_3, x_2] + [x_2, x_2] p_3 - x_3 [p_2, x_2] - [x_3, x_2] p_2 \\ &= i\hbar x_3 \end{aligned}$$

Hơn nữa có thể chứng minh trường hợp tổng quát :

$$[L_i, x_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} x_k \quad (5.5)$$

Với :

$$\varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = 1, \varepsilon_{321} = \varepsilon_{213} = \varepsilon_{132} = -1$$

Các thành phần khác đều bằng không .

Giao hoán tử của  $\vec{L}$  với  $\vec{P}$  bằng cách tính trực tiếp ta có :

$$[L_i, x_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} p_k \quad (5.6)$$

Giữa các thành phần của L ta có :

$$\begin{aligned} [L_1, L_2] &= [L_1, x_3 p_1 - x_1 p_3] \\ &= -[L_1, x_1 p_3] + [L_1, x_3 p_1] \\ &= [L_1 x_3] p_1 + x_3 [L_1 p_1] - [L_1 x_1] p_3 - x_1 [L_1 p_3] \\ &\quad - i\hbar x_2 p_1 + i\hbar x_1 p_2 = i\hbar L_3 \end{aligned}$$

$$\text{Vậy: } [L_1, L_2] = iL_3.$$

Tổng quát hơn ta có :

$$[L_i, x_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k \quad (5.7)$$

Từ các toán tử  $L_1, L_2, L_3$  ta đưa vào toán tử :

$$L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$$

Gọi là toán tử moment bình phương . Ta có thể tìm giao hoán tử :

$$\begin{aligned} [L^2, L_1] &= [L_1^2 + L_2^2 + L_3^2, L_1] = [L_1^2, L_1] + [L_2^2, L_1] + [L_3^2, L_1] \\ &= 0 + L_2 [L_2, L_1] + [L_2, L_1] L_2 + L_3 [L_3, L_1] + [L_3, L_1] L_3 = 0 \end{aligned}$$

Tổng quát ta có :

$$[L^2, L_i] = 0 ; (i = 1, 2, 3) \quad (5.8)$$

Do các toán tử xi và pi là Hecmitic ta dễ dàng thấy rằng các toán tử  $L_i$  và  $L^2$  đều Hecmitic .

#### **4/Toán tử Hamilton H:**

Tương ứng với biểu thức hàm Hamilton trong cơ học cổ điển :

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2M} + U(x, y, z, t)$$

Ta đưa vào toán tử Hamilton :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z, t) \quad (5.9)$$

Trong hệ tọa độ cầu  $(r, \theta, \varphi)$  toán tử hamilton có dạng :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\Lambda}{r^2} \right\} + U \quad (5.10)$$

Các giao hoán tử : Ta có thể tính trực tiếp để tìm các giao hoán tử của H và xi và pi như sau :

$$\begin{aligned} [H, x_i] &\neq 0 \\ [H, p_i] &\neq 0 \end{aligned} \quad (i=1,2,3)$$

Chỉ khi  $U = 0$  thì ta mới có :

$$[H, p_i] = 0$$

Các giao hoán tử của H với các toán tử moment xung lượng Và moment xung lượng bình phương sẽ được xét trong trường hợp đặc biệt khi  $U=U(r,t)$ . Tức là tương ứng với bài toán chuyển động trong trường xuyên tâm .

Trước hết ta tìm biểu thức của  $L_i$  và  $L^2$  trong hệ tọa độ cầu .Từ mối liên hệ giữa hai tọa độ :

$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{\partial x}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial y} = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}$$

Ta có :

Nghĩa là ta có :

$$L_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (5.12)$$

Để tìm các biểu thức của L1 và L2 ta để ý rằng :

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} ; \cos \theta = \frac{z}{r} ; \operatorname{tg} \varphi = \frac{y}{x}$$

Từ đó ta được :

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r} = \cos \theta, \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{\sin \theta}{r}, \quad \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta}$$

Từ biểu thức định nghĩa :

$$\begin{aligned} L_1 &= -i\hbar \left[ y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right] \\ &= -i\hbar \left[ r \sin \theta \sin \varphi \left( \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right. \\ &\quad \left. - r \cos \theta \left( \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right] = \\ &= -i\hbar \left[ (r \sin \theta \sin \varphi \cos \theta - r \cos \theta \sin \theta \sin \varphi) \frac{\partial}{\partial r} + \right. \\ &\quad \left. + (-\sin^2 \theta \sin \varphi - \cos^2 \theta \sin \varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} + (-\cot \theta \cos \varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \end{aligned}$$

Như vậy ta có :

$$L_1 = -i\hbar \left[ -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \quad (5.13)$$

Tương tự ta tính được :

$$L_2 = -i\hbar \left[ \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \quad (5.14)$$

Từ các kết quả trên ta có :

$$L^2 = -\hbar^2 \Lambda = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (5.15)$$

Ta xét trường hợp đặc biệt khi  $U=U(r,t)$ . Khi đó ta kí hiệu :

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r, t)$$

Từ biểu thức này và các kết quả trên ta có :

$$[H_0, L_3] = 0$$

$$[H_0, L^2] = 0$$

Và

(5.16)

Các toán tử động lực có vai trò đặc biệt quan trọng trong cơ học lượng tử bởi lẽ nó liên quan đến các giá trị đo được trong thực nghiệm . Phép chuyển từ các toán tử tới các đại lượng đo được (hay quan sát được ) trong thực nghiệm được thực hiện nhờ bài toán trị riêng :

$$L\psi_n(x) = \lambda_n\psi_n(x)$$

Mối liên hệ đó là :Nếu hệ ở trạng thái được mô tả bởi hệ hàm riêng  $\psi_n(x)$  của toán tử đối xứng với biến động lực nào đó thì khi đo đại lượng này ở trạng thái  $\psi_n(x)$  ta sẽ nhận được giá trị  $\lambda_n$  nào đó nằm trong phổ  $\{\lambda_n\}$ .

## §6 CÁC HỆ THỨC BẤT ĐỊNH

### I/ Ý Tưởng Lượng Sóng Hạt Và các Hệ Thức Bất Định:

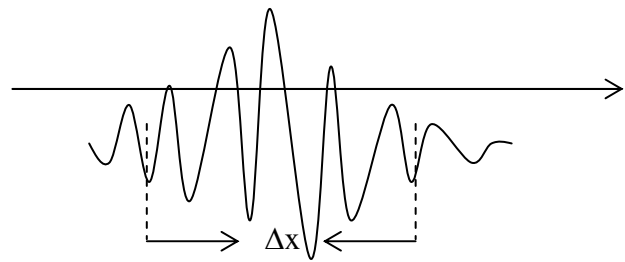
Ta xét tập hợp các sóng phẳng (cổ điển) lan truyền trên trục x. Ta giả sử rằng các tần số sóng “rải rác” ở một khoảng nào đó  $\Delta\omega$ , còn các giá trị của vector sóng ở trong khoảng  $\Delta k_x$ . Nếu chập tất cả các sóng phẳng này với nhau thì chúng ta sẽ nhận được bó sóng như hình vẽ. Với bó sóng đó người ta đã tìm được các hệ thức:

$$\Delta\omega \cdot \Delta t \geq 1$$

$$\Delta k_x \cdot \Delta x \geq 1$$

Những hệ thức này rất quen thuộc trong vật lý cổ điển. Những người đã biết về kỹ thuật radio đều biết rằng: để tạo ra tín hiệu định xứ hơn thì cần phải lấy nhiều sóng phẳng với các tần số khác nhau hơn. Hay nói cách khác: Để giảm  $\Delta x$  và  $\Delta t$  thì phải tăng  $\Delta k_x$  và  $\Delta\omega$ .

Một cách hình thức ta giả thiết rằng các hệ thức trên không chỉ đúng với các sóng cổ điển mà còn đúng cho cả những đặc trưng sóng của các vi hạt (Nhưng lưu ý



rằng điều này không có nghĩa là chúng ta mô hình hóa vi hạt dưới dạng bó sóng nào đó).

Sử dụng các hệ thức Planck – Einstein:

$$E = \hbar\omega, \quad \vec{P} = \hbar\vec{k}$$

và chuyển sang biểu thức tương tự cho các đặc tính của vi hạt (cho năng lượng và xung lượng của hạt) ta có:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar \quad (6.2)$$

$$\Delta P_x \cdot \Delta x \geq \hbar \quad (6.3)$$

Các hệ thức này được Heisenberg đưa ra lần đầu tiên vào năm 1927 và được ông gọi là hệ thức bất định (ngày nay ta thường gọi chúng là hệ thức bất định Heisenberg).

Ngoài ra ta có thể bổ sung thêm hệ thức dưới đây:

$$\Delta M_x \cdot \Delta \varphi_x \geq \hbar \quad (6.4)$$

trong đó  $\Delta \varphi_x$  là độ bất định của tọa độ góc của đối tượng vi hạt (xét phép quay quanh trục x), còn  $\Delta M_x$  là độ bất định của hình chiếu moment trên trục x.

Các hệ thức trên cũng có thể mở rộng cho các trường hợp tương tự khác. Cụ thể là ta có thể viết:

$$\Delta y \cdot \Delta P_y \geq \hbar$$

$$\Delta z \cdot \Delta P_z \geq \hbar$$

$$\Delta M_y \cdot \Delta \varphi_y \geq \hbar$$

$$\Delta M_z \cdot \Delta \varphi_z \geq \hbar$$

### II/ Ý nghĩa của các hệ thức bất định:

Ta xét hệ thức:  $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar$

trong đó  $\Delta x$  là độ bất định của tọa độ x,  $\Delta p_x$  là độ bất định của hình chiếu trên trục x của xung lượng của vi hạt. Như vậy nếu vi hạt được định xứ tại một điểm xác định x nào đó thì hình chiếu của xung lượng của vi hạt trên trục x có độ bất định tùy ý. Nghĩa là vi hạt phải tan ra trên toàn trục x.

Điều này có nghĩa là trong cơ học lượng tử vi hạt không thể có đồng thời tọa độ xác định và giá trị hình chiếu xung lượng xác định trên trục đó. Điều này cho thấy trong cơ học lượng tử hoàn toàn không có khái niệm quỹ đạo. Đây là một hệ quả quan trọng của nguyên lý bất định.

Bây giờ ta xét hệ thức:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$$

Với hệ thức này có nhiều cách giải thích khác nhau vì  $\Delta t$  không phải là độ bất định theo thời gian (vì thời gian là một tham số chứ không phải một biến động lực). Cụ thể là :

- Nếu hệ ở trạng thái kích thích trong khoảng thời gian  $\Delta t$  thì khi đó hệ không thể có năng lượng xác định và độ bất định của năng lượng là:

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{\Delta t}$$

Tuy nhiên năng lượng có độ bất định không có nghĩa là năng lượng không được bảo toàn. Bởi vì nếu hệ ở trạng thái dừng thì năng lượng của hệ không đổi theo thời gian và khi đó ta có thể đo năng lượng trong khoảng thời gian  $\Delta t$  lâu tùy ý. Nghĩa là nếu  $\Delta t = \infty$  thì  $\Delta E = 0$  là không có sự sai lệch nào về trị số của năng lượng.

Nhờ hệ thức

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$$

ta có thể suy ra thời gian sống của hạt vi mô, có thể tưởng tượng ra những quá trình ảo để làm công cụ giải thích những hiện tượng mà không vi phạm định luật bảo toàn năng lượng.

Những điều cần lưu ý:

- Thứ nhất: hệ thức bất định nhấn mạnh một điều là: sự bất định trong thế giới vi mô không phải là những sai số ngẫu nhiên của phép đo hay sự không hoàn thiện của các thiết bị kỹ thuật mà xuất phát từ bản chất lưỡng sóng hạt của hạt vi mô hay nói cách khác việc không thể xác định đồng thời tọa độ và xung lượng là có tính nguyên tắc.

- Thứ hai: Các đại lượng đặc trưng cho sóng ( $\lambda$  và  $\nu$ ) không phải là các đại lượng định xứ được. Do đó xuất phát từ hệ thức De Broglie ta có thể rút ra hệ thức bất định. Mặt khác chuyển động của hạt có khối lượng  $m$  và vận tốc  $v$  liên đối với một sóng có bước sóng tính theo công thức:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

trong đó  $\lambda$  là bước sóng. Đặc trưng của sóng là sự lan truyền vô hạn trong không gian cho nên bước sóng là một hàm số của dạng sóng chứ không phải là hàm số của một điểm của không gian. Cũng do hệ thức De Broglie thì vận tốc của hạt cũng không phải là hàm số của tọa độ của hạt. Nói tóm lại vận tốc và tọa độ của hạt không thể đồng thời có giá trị xác định. Hệ thức bất định là một hệ thức cơ bản nhất của cơ học lượng tử, một trong những hệ quả quan trọng nhất của giả thiết De Broglie về tính lưỡng sóng hạt của vi hạt.

- Thứ ba: Nhìn các hệ thức bất định ta thấy cấu trúc của chúng phải như thế nào để trong mọi hệ thức gồm hai đại lượng liên hợp chính tắc với nhau theo ý nghĩa cổ điển. Do đó ta có thể suy ra rằng đối với các cặp đại lượng chính tắc thì các hệ thức tương tự vẫn đúng. Về phương diện lý thuyết tương đối các hệ thức bất định Heisenberg có tính chất đối xứng: cụ thể là ba thành phần của xung lượng và năng lượng  $(p_x, p_y, p_z, E)$  tạo thành một vector 4 chiều, còn ba tọa độ và thời gian  $(x, y, z, t)$  tạo thành một vector khác

**III/ Một số kết quả thu được từ hệ thức bất định :**

a/ Ước lượng xác định năng lượng của trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro. Trong vật lý học cổ điển biểu thức năng lượng của hạt tích điện trong một trường coulomb là :

$$E = \frac{P^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \quad (6.5)$$

trong đó m và e là khối lượng và điện tích của electron .Để sử dụng công thức trên trong cơ học lượng tử ta phải xem P và r trong biểu thức đó như là xự bất định của xung lượng và tọa độ của electron . Theo hệ thức bất định giữa xung lượng và tọa độ :

$$\Delta P \cdot \Delta x \geq \hbar$$

ta đi tới hệ thức tương đương :  $p \cdot r \approx \hbar$

hay đơn giản hơn là :  $p \cdot r = \hbar$  (6.6)

Thay r tính được từ (6.6) vào (6.5) ta có :

$$E(p) = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2 p}{\hbar}$$

(6.7)

Từ kết quả này ta dễ dàng thấy rằng E(p) có một cực tiểu tại  $p=p_1$ . Ta ký hiệu năng lượng cực tiểu đó là  $E_1$  .Lượng  $E_1$  chính là năng lượng của trạng thái cơ

bản của nguyên tử Hydro còn  $r_1 = \frac{\hbar}{p_1}$  là kích thước ước lượng của nguyên tử (trong lý thuyết của Bohr kích thước ước lượng của nguyên tử là bán kính của quỹ

đạo thứ nhất trong nguyên tử) . Có thể dễ dàng xác định được  $p_1 = \frac{me^2}{\hbar}$  . Cuối cùng ta có:

$$r_1 = \frac{\hbar^2}{me^2}, E_1 = -\frac{me^4}{2\hbar^2}$$

(6.8)

Những kết quả này hoàn toàn phù hợp với những lý thuyết chính xác ,chắc chắn cổ điển .

b/ Ước lượng năng lượng của dao động tại điểm không của một dao động tử .

Năng lượng của một dao động tử điều hòa một chiều cổ điển được cho bằng biểu thức :

$$E = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (6.9)$$

Xem  $P_x$  và x như là sự bất định của xung lượng và tọa độ của vi hạt dao động và sử dụng phương trình :

$$P_x \cdot x = \hbar$$

như là một trường hợp của hệ thức bất định , ta có :

$$E(P_x) = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hbar^2}{2P_x^2}$$

Bằng cách giải phương trình :

$$\frac{d}{dP_x} E(P_x) = 0$$

Ta tìm được :  $P_o = \pm \sqrt{m\hbar\omega}$  là giá trị tại đó  $E(P_x)$  cực tiểu . Dễ dàng từ đó suy ra :

$$E_o = E(P_o) = \hbar\omega \quad (6.9)$$

Đây là một kết quả rất đáng để ý . Bởi lẽ nó chứng tỏ rằng : Trong cơ học lượng tử năng lượng của một dao động tử không thể triệt tiêu và có giá trị là  $\hbar\omega$  . Năng lượng này được gọi là năng lượng của dao động không của dao động tử . Lưu ý rằng ước lượng (6.9) khác với biểu thức chính xác của năng lượng của dao

động không của dao động tử một thừa số  $\frac{1}{2}$  (giá trị chính xác là :  $\frac{1}{2}\hbar\omega$  ).

Sử dụng kết quả này vào các tính toán năng lượng của chuyển động điều hòa của nguyên tử trong một tinh thể người ta đi đến một kết quả thú vị bất ngờ là : Năng lượng đó không triệt tiêu ngay cả ở độ không tuyệt đối.

Dao động không của một dao động có năng lượng khác không chứng tỏ một sự kiện cơ bản là : Không thể tìm thấy một vi hạt ở đáy của một hố thế hay nói cách khác hạt vi mô không thể rơi xuống đáy của một hố thế, dù cho hố thế có dạng như thế nào. Sở dĩ như vậy là do sự “rơi xuống đáy hố thế của vi hạt ” là không cho phép do tính triệt tiêu của xung lượng , cũng như tính bất định của tọa độ của vi hạt .

c/ Giải thích tại sao electron không rơi vào hạt nhân .

Khi đưa ra giả thuyết về trạng thái dừng trong lý thuyết nguyên tử , Bohr không giải thích vì sao các electron chuyển động có gia tốc xung quanh hạt nhân lại không bức xạ và rơi vào hạt nhân . Nhưng hệ thức (6.3) lại cho phép ta giải thích điều này khá dễ dàng . Electron rơi vào hạt nhân đồng nghĩa với việc thay đổi đáng kể tọa độ của nó . Giả sử trước khi rơi vào hạt nhân electron cách hạt nhân vào cỡ

$$r_1 = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 10^{-8} \text{ cm}$$

. Khi “rơi vào nhân” electron sẽ nằm trong vùng có kích thước cỡ 10-12cm . Theo hệ thức bất định (6.3) tính định xứ càng cao thì sự “nhòe” của xung lượng càng lớn. Do đó trước khi rơi vào hạt nhân xung lượng của electron phải tăng lên điều này có nghĩa là electron phải tiêu tốn một năng lượng . Thành thử sự cố gắng “giữ” cho electron không rơi vào hạt nhân là sự định xứ cho electron ở vùng rất gần hạt nhân.

Trong khi xét dao động không ở trên ta thấy rằng vi hạt trong một hố thế luôn có một năng lượng cực tiểu khác không  $E_o$  . Độ lớn của  $E_o$  nói chung phụ thuộc vào độ rộng của giếng . Sử dụng các kết quả đó ta dễ dàng có thể suy ra là :

$$E_o = \frac{\hbar^2}{ma^2} .$$

Như vậy nếu  $a$  giảm thì  $E_o$  sẽ tăng lên . Như vậy với  $a$  đủ nhỏ , năng



lượng  $E_0$  có thể trở nên lớn hơn độ sâu của hố thế. Rõ ràng một giếng như thế sẽ không thể giữ nổi một hạt nào trong nó.

Sự rơi vào hạt nhân của electron sẽ tương đương với sự giảm bề rộng của hố

$$E_0 \approx \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

thế từ 10-8cm xuống 10-12cm. Thậm chí thấp hơn. Theo công thức:

, khi đó cực tiểu năng lượng  $E_0$  sẽ tăng từ 10 eV đến 109 eV và thậm chí hơn nữa. Kết quả là năng lượng tối thiểu của electron ở vào cỡ lớn hơn năng lượng liên kết của các nucleon trong hạt nhân nguyên tử (năng lượng liên kết này vào cỡ 109 eV). Lập luận ở đây không những trả lời cho câu hỏi “vì sao electron không rơi vào hạt nhân” mà còn trả lời cho một câu hỏi rất quan trọng là: Vì sao trong hạt nhân nguyên tử không có electron.

#### **IV . Xây dựng hệ thức bất định Heisenberg:**

1. Giá trị trung bình:

a/ Kỳ vọng toán học trong lý thuyết xác suất: Giả sử ta có một đại lượng ngẫu nhiên  $l$  có nhận các giá trị  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_k \dots$  cùng với xác suất tương ứng  $\omega_1, \omega_2, \omega_k \dots$  và

$$\omega_1 + \omega_2 + \dots + \dots = 1$$

Kỳ vọng toán học – hay trung bình thống kê – của đại lượng ngẫu nhiên  $l$  là tổng các tích của từng giá trị này nhân với xác suất xuất hiện của nó:

$$\bar{l} = \sum \omega_K \lambda_K$$

Đối với các đại lượng liên tục nghĩa là lượng  $l$  biến đổi liên tục ở một khoảng nào đó, Xác suất để cho  $l$  nằm trong khoảng  $\lambda$  và  $(\lambda + d\lambda)$  sẽ phụ thuộc vào  $\lambda$  và tỷ lệ với  $d\lambda$ . Khi đó kỳ vọng toán học của đại lượng  $l$  sẽ có dạng:

$$\bar{l} = \int \omega(\lambda) \lambda d\lambda$$

Trong đó:  $\omega(\lambda)$  là mật độ xác suất

b/ kỳ vọng toán học trong Cơ học lượng tử:

Trong Cơ học lượng tử trạng thái của vi hạt được mô tả bởi hàm sóng  $\Psi$ . Nếu  $\Psi$  là hàm riêng của toán tử  $L$  thì khi đó đại lượng bất kỳ nếu nhận được giá trị riêng  $\lambda$ , ta có thể biểu diễn  $\lambda$  bằng công thức:

$$\lambda = \frac{\int \Psi^* L \Psi dV}{\int \Psi^* \Psi dV} = \langle L \rangle \Psi$$

Ký hiệu  $\langle L \rangle \Psi$  chỉ rằng của đại lượng  $L$  trong trạng thái  $\Psi$ .

Như vậy với biến động lực tọa độ ta có:

$$\bar{x} = \frac{\int \Psi^* \hat{x} \Psi dV}{\int \Psi^* \Psi dV}$$

Nếu ta giả sử có hệ thức :

$$\int \Psi^* \Psi dV = 1$$

thì khi đó :

$$\bar{x} = \int \Psi^* x \Psi dV \quad (6.12)$$

Tương tự ta có :

$$\begin{aligned} \bar{P}_x &= \int \Psi^*(x) \hat{P}_x \Psi(X) dX \\ &= \frac{\hbar}{i} \int \Psi^* \frac{d\Psi(x)}{dx} dX \end{aligned} \quad (6.13)$$

Tổng quát hóa cho toán tử  $\hat{F}$  bất kỳ :

$$\bar{F} = \int \Psi^* \hat{F} \Psi dV \quad (6.14)$$

Với điều kiện hàm sóng chuẩn hóa về đơn vị .

Giá trị trung bình có một số tính chất như sau :

+/ giá trị trung bình của các đại lượng chính xác bằng chính giá trị của đại lượng chính xác đó .

Nếu trong trạng thái  $\Psi$  giá trị của toán tử  $L$  bằng  $\lambda$  thì ta có :

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

$$\bar{\ell} = \int \Psi^* \hat{L}\Psi dV \equiv \lambda$$

+ Nếu trong cùng một trạng thái  $\Psi$  giá trị trung bình của  $\hat{F}$  là  $\bar{F}$  , của  $\hat{G}$  là  $\bar{G}$  thì giá trị trung bình của tổng thỏa mãn :

$$\begin{aligned} \overline{F+G} &= \int \Psi^* (\hat{F} + \hat{G}) \Psi dV \\ &= \int \Psi^* \hat{F} \Psi dV + \int \Psi^* \hat{G} \Psi dV \\ &= \bar{F} + \bar{G} \end{aligned}$$

2/ Điều kiện để hai toán tử  $F$  và  $G$  giao hoán với nhau :

một vấn đề quan trọng của Cơ học lượng tử là khả năng đo đồng thời các giá trị của các đại lượng vật lý gắn liền với cơ hệ lượng tử . với vấn đề này ta có định lý sau:

Định lý : Muốn cho hai đại lượng  $F$  và  $G$  có cùng giá trị xác định trong một trạng thái nào đó mô tả bởi hàm sóng  $\Psi_n(X)$  thì hàm sóng này phải đồng thời là hàm riêng của toán tử  $F$  và  $G$  .

Chứng minh :

$$F\Psi_n(X) = \lambda\Psi_n(X)$$

tác dụng tiếp lên đó toán tử G thì ta có :

$$GF\Psi_n(X) = \lambda\mu\Psi_n(X) \quad (a)$$

Với toán tử G :

$$G\Psi_n(X) = \mu\Psi_n(X)$$

Tác dụng tiếp toán tử F lên đó ta được :

$$\hat{F}G\Psi_n(X) = \lambda\mu\Psi_n(X) \quad (b)$$

Lấy (a) trừ đi (b) ta có :

$$(GF - FG)\Psi_n(X) = [G, F]\Psi_n(X) = 0$$

Điều này có nghĩa là : Nếu hai đại lượng có thể đồng thời có các giá trị xác định thì hai toán tử tương ứng với chúng phải giao hoán với nhau .

Định lý đảo : Nếu hai toán tử F và G giao hoán với nhau thì chúng có chung một hệ hàm riêng . Nghĩa là nếu :

$$[F, G] = 0$$

thì hệ hàm  $\Psi_1(X)$  thỏa mãn :

$$F\Psi_1(X) = \lambda\Psi_1(X)$$

Và hệ hàm  $\Psi_2(X)$  thỏa mãn :

$$G\Psi_2(X) = \mu\Psi_2(X)$$

Sẽ hoàn toàn trùng nhau . Nghĩa là :  $\Psi_1(X) \equiv \Psi_2(X) \equiv \Psi(X)$ .

Chứng minh định lý này không khó lắm các bạn có thể xem như bài tập ; hoặc xem trong các tài liệu tham khảo.

3/ khái niệm tập hợp đủ các đại lượng vật lý :

Ta cần làm rõ hơn thuật ngữ “ cho trước trạng thái của hệ ” Trong Cơ học lượng tử .

Trạng thái của hệ đã cho nếu cho biết hàm sóng mô tả hệ . Song ta không thể đo trực tiếp được hàm sóng trong bất kỳ điều kiện nào, chỉ có bình phương modun hàm sóng có ý nghĩa vật lý như là mật độ xác suất tìm thấy hạt ở một vị trí xác định trong không gian . Vì vậy trong Cơ học lượng tử người ta quan niệm rằng :

Khi ta nói rằng cho trước trạng thái của hệ lượng tử thì điều đó có nghĩa là cho trước giá trị của tập hợp xác định của các đại lượng Cơ học lượng tử . Tập hợp các đại lượng này được gọi là hệ đủ các đại lượng vật lý .

Ví dụ:

Tập hợp đủ các đại lượng vật lý xác định trạng thái của electron có Spin  $\frac{1}{2}$  chẳng hạn có thể là một trong ba tập hợp sau :

$$x, y, z, \sigma$$

$$P_x, P_y, P_z, \sigma$$

$$E, \ell, m, \sigma$$

Trong đó :  $\ell$  ,  $m$  ,  $\sigma$  là số lượng tử quỹ đạo , số lượng tử từ và số lượng tử Spin . Các tọa độ và các thành của xung lượng rơi vào hai tập hợp khác nhau vì các đại lượng này không thể đo được đồng thời . Do đó các hệ thức trong vật lý cổ điển :

$$E = \frac{P^2}{2m} + u(\vec{r})$$

$$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{P}]$$

Không có ý nghĩa khi chuyển sang Cơ học lượng tử vì chứa cả xung lượng và tọa độ .

4/ Xây dựng hệ thức bất định :

Trong phần trên ta đã tìm được điều kiện mà trong đó có thể đo đồng thời hai đại lượng vật lý . Bây giờ giả thiết ta có hai đại lượng vật lý G và F không có đồng thời các giá trị xác định khi đó các toán tử này không giao hoán với nhau .

Giả thiết chúng thỏa mãn hệ thức :

$$FG - GF = iB$$

Trong đó B là một toán tử Hermitic nào đó . Nếu chọn  $G = PX$  ,  $F = x$  , thì  $B = \hbar$  vì :

$$xPX - PXx = i\hbar .$$

Như vậy vấn đề đặt ra là : Khi đồng thời đo hai đại lượng này thì sự không chính xác ( hay sai số ) sẽ là bao nhiêu ? .

Để giải quyết vấn đề này ta phải xét thêm hai khái niệm là thăng giáng trung bình và thăng giáng toàn phương .

Thăng giáng là mức độ sai lệch giữa giá trị trung bình và giá trị thực .

Mức sai lệch giữa giá trị chính xác a và giá trị trung bình  $\bar{a}$  là  $\Delta a$  :

$$\Delta a = a - \bar{a}$$

trong đó :

$$\bar{a} = \sum_i a_i \omega_i$$

Thăng giáng trung bình là :  $\overline{\Delta a}$  . Lưu ý rằng thăng giáng trung bình luôn bằng không . Thật vậy :

$$\overline{\Delta a} = \overline{(a - \bar{a})} = \int (a - \bar{a}) \omega(a) da =$$

$$= \int a \omega(a) da - \bar{a} \int \omega(a) da = \bar{a} - \bar{a} = 0$$

Mặt dù vậy cần lưu ý là có thể  $\bar{a}$  khác rất xa với giá trị chính xác a .

Vì lẽ đó phải đưa vào một đại lượng khác để đánh giá mức độ thăng giáng đó là khái niệm thăng giáng toàn phương .

Thăng giáng toàn phương được định nghĩa như sau :

$$\langle \Delta a \rangle \equiv TGT = \sqrt{(\Delta a)^2} = \sqrt{a^2 - (\bar{a})^2}$$

Bây giờ ta tìm các suy ra hệ thức bất định một cách chặt chẽ .

Xuất phát từ bất đẳng thức hiển nhiên :

$$\int \left| \alpha x \psi + \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 dx \geq 0$$

trong đó  $\alpha$  là số thực. Biểu diễn dưới dấu tích phân có thể biến đổi như sau :

$$\begin{aligned} \left| \alpha x \psi + \frac{d\psi}{dx} \right|^2 &= \left( \alpha x \psi + \frac{d\psi}{dx} \right)^* \left( \alpha x \psi + \frac{d\psi}{dx} \right) = \\ &= \left( \alpha x \psi^* + \frac{d\psi^*}{dx} \right) \left( \alpha x \psi + \frac{d\psi}{dx} \right) = \\ &= \alpha^2 x^2 |\psi|^2 + \alpha x \frac{d}{dx} |\psi|^2 + \frac{d\psi}{dx} \frac{d\psi}{dx} \end{aligned}$$

Nếu đặt :

$$A = \int |\psi|^2 x^2 dx,$$

$$B = - \int x \frac{d}{dx} |\psi|^2 dx$$

$$C = \int \frac{d\psi^*}{dx} \cdot \frac{d\psi}{dx} dx$$

thì biểu thức trên có dạng :

$$A\alpha^2 - B\alpha + C \geq 0$$

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

Mặt khác để ý rằng :

$$A = \bar{x}^2 = \int x^2 |\psi|^2 dx = \int \psi^* x^2 \psi dx$$

$$\begin{aligned} B &= - \int x \frac{d}{dx} |\psi|^2 dx = - \int x \frac{d}{dx} (\psi^* \psi) dx \\ &= - x \psi^* \psi \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int (\psi^* \psi) dx = 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C &= \int \frac{d\psi^*}{dx} \frac{d\psi}{dx} dx = \psi^* \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} dx \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \bar{P}_X^2 \end{aligned}$$

Vậy ta có :

$$\frac{4}{\hbar^2} \bar{x}^2 \cdot \bar{P}_X^2 \geq 1$$

hay :

$$\overline{x^2} \cdot \overline{P_X^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Nếu ta chọn gốc tọa độ tại điểm với tọa độ  $\bar{x}$  thì  $\bar{x} = 0$ . Và giả sử rằng hệ chuyển động với vận tốc  $P_X/m$  thì  $\overline{P_X} = 0$ . Như vậy :

$$\langle \overline{\Delta x} \rangle^2 = \overline{x^2} - (\bar{x})^2 = \overline{x^2}$$

$$\langle \overline{\Delta P} \rangle^2 = \overline{P_X^2} - (\overline{P_X})^2 = \overline{P_X^2}$$

do đó ta có :

$$\langle \overline{\Delta x} \rangle^2 \langle \overline{\Delta P_X} \rangle^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

hay :

$$\langle \overline{\Delta x} \rangle \langle \overline{\Delta P_X} \rangle \geq \frac{\hbar}{2}$$

Thông thường hệ thức này viết gọn là :

$$\Delta x \cdot \Delta P_X \geq \frac{\hbar}{2}$$

Đây là biểu thức chính xác của hệ thức bất định mà ý nghĩa của nó ta đã thảo luận ở phần trên .

## §7 HÀM SÓNG . NGUYÊN LÝ CHỒNG CHẬP TRẠNG THÁI.

### I/. Hàm Sóng:

Thực chất của việc mô tả một cơ hệ nào đó gồm hai nội dung sau:

- Một là: Mô tả trạng thái của hệ cơ ở một thời điểm cố định đã cho
- Hai là: Mô tả sự biến đổi của trạng thái theo thời gian, hay nói cách khác là mô tả chuyển động của cơ hệ.

Như vậy cơ học cổ điển thực chất chủ yếu chỉ nghiên cứu mặt thứ hai của cơ hệ, tức là nghiên cứu chuyển động của nó, còn khía cạnh thứ nhất được thực hiện bằng việc xác định tọa độ (suy rộng) và vận tốc (suy rộng) của nó. Tùy bài toán cụ thể mà vận tốc hay tọa độ được xem xét một cách độc lập.

Khác biệt với cơ học cổ điển, cơ học lượng tử cho phép xem xét vấn đề thứ nhất một cách kỹ lưỡng hơn. (cũng cần lưu ý rằng tọa độ và vận tốc trong cơ học cổ điển là các hàm do đó chúng giao hoán với nhau). Trong cơ học lượng tử xác định đồng thời tọa độ và xung lượng là không thể được do đó để mô tả trạng thái của cơ học lượng tử người ta dùng một khái niệm mới đó là hàm sóng  $\psi(\vec{r}, t)$ . Khi đó  $|\psi|^2$

tỷ lệ với mật độ xác suất tìm thấy hạt ở chỗ xác định nào đó trong không gian. Xác suất tìm thấy hạt tại thể tích  $dV$  nào đó chứa điểm  $(x,y,z)$

$$d\omega(x,y,z) = |\psi(x,y,z)|^2 dx dy dz$$

Hàm sóng phải thỏa mãn bốn điều kiện sau:

- Liên tục
- Hữu hạn
- Đơn trị

$$\int_0^{+\infty} |\psi|^2 dV = 1$$

- chuẩn hóa bằng đơn vị; nghĩa là:

Điều này có nghĩa là việc tìm thấy hạt trong toàn không gian là chắc chắn.

### **II/. Nguyên lý chồng chập trạng thái:**

Nguyên lý chồng chập trạng thái là một trong số các nguyên lý cơ sở của vật lý học. Trong vật lý cổ điển- cụ thể trong lý thuyết sóng nhất là trong sóng điện từ- nguyên lý này có vai trò đặc biệt quan trọng.

Trong cơ học lượng tử nguyên lý này còn chiếm một vai trò quan trọng hơn liên quan đến khả năng mô tả cơ hệ lượng tử, khả năng giải thích ý nghĩa vật lý của công cụ của cơ học lượng tử – lý thuyết các toán tử Hermitic và tính độc lập của cơ hệ lượng tử với dụng cụ đo. Nội dung của nguyên lý chồng chập là:

Nếu tồn tại các trạng thái mô tả bằng các hàm sóng  $\psi_n(\vec{r}, t)$  thì cũng tồn tại trạng thái:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(\vec{r}, t)$$

Sự lựa chọn tập hợp các hàm  $\psi_n(\vec{r}, t)$  gắn liền với sự lựa chọn các đại lượng đặc trưng xác định của hệ lượng tử. Các hệ số  $a_n$  xác định phân bố xác suất của các đại lượng tương ứng.

Về phương diện toán học so với vật lý cổ điển nguyên lý chồng chập trạng thái lượng tử hoàn toàn tương tự, nghĩa là phương trình chuyển động xác định các trạng thái lượng tử cũng là phương trình tuyến tính.

Mặc dù vậy, về nội dung nguyên lý chồng chập lượng tử có những khác biệt quan trọng, khác hẳn với nguyên lý chồng chập trong vật lý cổ điển. Để thấy rõ điều này ta xét một ví dụ. Giả sử hàm  $\psi_1(x)$ ,  $\psi_2(x)$  mô tả trạng thái mà ở đó chúng ta đo đại lượng  $A$  và nhận được giá trị xác định  $A_1$  và  $A_2$  tương ứng. Chồng chập hai trạng thái này ta được trạng thái mới:

$$\psi_{12}(x) = a_1 \psi_1(x) + a_2 \psi_2(x)$$

Trong vật lý cổ điển khi đo đại lượng  $A$  ở trạng thái  $\psi_{12}(x)$  thì ta nhận được giá trị  $(A_1 + A_2)/2$  nào đó nghĩa là giá trị nhận được là trung bình cộng của các trạng thái thành phần.

Trong cơ học lượng tử tình trạng hoàn toàn khác: khi ta đo đại lượng  $A$  ở trạng thái  $\psi_{12}(x)$  thì ta nhận được giá trị hoặc  $A_1$  hoặc  $A_2$ . Không những thế ta còn không thể tiên đoán chính xác giá trị  $A_1$  hay  $A_2$  sẽ xuất hiện trong phép đo cụ thể

mà ta chỉ có thể nhận được xác suất nhận được A1 hay A2 tương ứng là  $|a_1|^2$  và  $|a_2|^2$

Như vậy có nghĩa là: Sự phân lập các giá trị của các đại lượng vật lý và sự bất định trong kết quả đo là đặc trưng cơ bản của nguyên lý chồng chập lượng tử.

Giải thích đặc điểm trạng thái của vi hạt Bohr đã phát biểu như sau: “Trạng thái của vi hạt không thể xét một cách tách biệt với phương tiện quan sát, mà phải kể đến điều ấy, các trạng thái của đối tượng vi mô được nghiên cứu nhất thiết nhờ các thiết bị vĩ mô mà chính các thiết bị ấy tuân theo các định luật của vật lý cổ điển.”

Cũng nói về nguyên lý chồng chập trạng thái P. Dirac đã viết: “Khi từ bỏ quyết định luận của vật lý cổ điển chúng ta đã phức tạp hóa sự mô tả thiên nhiên, song sự phức tạp hóa như vậy được đền bù một cách xứng đáng bởi sự đơn giản hóa do nguyên lý chồng chập trạng thái mang lại .”

## §8 PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

Phương trình Schrodinger là phương trình cơ bản của cơ học lượng tử vai trò của nó trong cơ học lượng tử giống như vai trò của phương trình Newton trong cơ học cổ điển. Phương trình Schrodinger là phương trình có dạng:

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

trong đó:  $\hat{H}$  là toán tử Hamilton hay Hamiltonien. Phương trình Schrodinger thiết lập mối quan hệ giữa trạng thái và biến động lực-hai khái niệm cơ bản của cơ học lượng tử.

### I/. Cách “Thiết lập” phương trình:

1/. Phương trình Schrodinger cho hạt tự do:

Từ dạng sóng mô tả chuyển động của hạt tự do:

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{-\frac{i}{\hbar} [\vec{p}\vec{r} - Et]} \quad (1)$$

Ta có: 
$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \psi \rightarrow E \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{1}{\hbar^2} (P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) \psi$$

từ hệ thức năng lượng: 
$$E = \frac{P^2}{2m}$$
 ta “suy ra”



$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \quad (2)$$

Phương trình Schrodinger có những tính chất sau:

+/ Phương trình đạo hàm riêng tuyến tính (liên quan đến nguyên lý chồng chập trạng thái).

+/ Phương trình chỉ chứa đạo hàm bậc nhất theo thời gian vì nó gắn liền với sự biểu hiện của nguyên lý nhân quả. (Từ  $\psi(\vec{r}, 0)$  suy ra  $\psi(\vec{r}, t)$  một cách đơn trị). Nhưng lưu ý rằng do ý nghĩa của hàm sóng chúng ta chỉ có thể hiểu nguyên lý nhân quả theo nghĩa thống kê.

Nghiệm của phương trình (2) có dạng:

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(r) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \quad (3)$$

thay (3) vào (2) ta có phương trình cho hàm chỉ phụ thuộc vào tọa độ là:

$$\Delta \varphi(r) + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(r) = 0 \quad (4)$$

Phương trình (4) xác định hàm  $\varphi(r)$  cho hạt tự do.

2/. Phương trình Schrodinger cho hạt chuyển động trong trường lực:

Thay E bằng  $(E-U)$  trong đó U là thế năng của hạt khi đó phương trình (4) trở thành:

$$\Delta \varphi(r) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \varphi(r) = 0 \quad (5)$$

Phương trình (5) là phương trình Schrodinger cho hạt chuyển động trong trường thế tùy ý không phụ thuộc thời gian.

Tổng quát hơn ta thay:

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

vào phương trình (5) và như vậy ta có phương trình:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \right] \psi(\vec{r}, t) \quad (6)$$

Nếu đặt :  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U$  thì phương trình có dạng gọn hơn là:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad (7)$$

Phương trình liên hợp phức của (7) là:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \hat{H} \psi^*$$

3/ Giả thiết về ý nghĩa xác suất của hàm sóng của M.Born:

Để đơn giản ta xét bài toán một chiều:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right] \psi(x,t)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right] \psi^*(x,t)$$

Nhân phương trình đầu với  $\psi^*(x,t)$  và phương trình sau với  $\psi(x,t)$  rồi trừ đi nhau ta có:

$$i\hbar \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \right]$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right)$$

hay:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 - \frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial}{\partial x} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) = 0$$

Tổng quát hóa, trong trường hợp ba chiều:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 + \nabla \cdot \left[ \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \right] = 0 \quad (8)$$

Như vậy nếu đặt:  $|\psi|^2 = \psi^* \psi = \rho$  là mật độ xác suất

Và:  $\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$  là mật độ dòng xác suất thì (8) có

dạng hệ như phương trình liên tục:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0$$

trong điện động lực học. (giả thiết Born).

Nếu ta chuẩn hóa:  $\int |\psi|^2 d\tau = 1$  thì xác suất của hạt nằm trong  $d\tau$  là:

$$d\omega = \psi^*(x,y,z,t) \psi(x,y,z,t) d\tau$$

Một điều cần lưu ý là trong trạng thái dừng mật độ xác suất không phụ thuộc vào thời gian. Cũng từ các kết quả này ta suy ra rằng: Cơ học lượng tử chỉ nghiên cứu các quá trình trong đó số hạt là bảo toàn.

4/ Phương trình Schrodinger dừng:

Ta xét trường hợp thế năng  $U$  không phụ thuộc thời gian khi đó phương trình:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \right] \psi \quad (9)$$

có thể được giải bằng phương pháp phân ly biến số. Thật vậy đặt:

$$\psi(\vec{r}, t) = A(t) \varphi(r)$$

rồi thay vào phương trình ta có thể tách (9) thành hai phương trình:

$$\hat{H}\varphi(r) = E\varphi(r)$$

$$i\hbar \frac{dA(t)}{dt} = EA(t)$$

trong đó E là hằng số tách (-trị riêng). Phương trình theo thời gian có nghiệm là:

$$A(t) = Ce^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Phương trình thứ nhất cho các nghiệm (hàm riêng) là:  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3 \dots \varphi_n \dots$  và các trị riêng tương ứng:  $E_1, E_2 \dots E_n \dots$

Như vậy nghiệm của (9) là:

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

hay tổng quát hơn là hàm:

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \sum_n C_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \varphi_n(x, y, z)$$

Xác xuất tìm thấy hạt tại điểm nào đó của không gian sẽ không phụ thuộc thời gian vì ta có:

$$\omega_n(r, t) = |\psi_n(\vec{r}, t)|^2 = \omega_n(r, 0) \quad \text{vì} \quad \left| e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \right| = 1$$

## §9 CÁC PHƯƠNG TRÌNH CHUYỂN ĐỘNG LƯỢNG TỬ

### I/ Nhận xét chung :

Ta biết rằng với Cơ học có hai khái niệm cơ bản đó là trạng thái và các biến động lực. Hai khái niệm này gắn liền với nhau một cách chặt chẽ cụ thể là nếu ta biết được các đại lượng động lực thì có thể biết được trạng thái của hệ và ngược lại. Khi mô tả sự tiến triển của hệ theo thời gian ta có thể dùng các phương trình chuyển động vì vậy các phương trình chuyển động có vai trò quan trọng.

Trong Cơ học cổ điển các phương trình chuyển động được viết qua các biến động là các phương trình Newton, phương trình Hamilton – Jacobi, phương trình chính tắc Hamilton và qua hàm trạng thái là phương trình Lagrange. Giải các phương trình này chúng ta sẽ tìm được các đại lượng động lực – là nghiệm của các phương trình đó – là các hàm số của thời gian:

$$\vec{r} = \vec{r}(t), \quad \vec{p} = \vec{p}(t), \quad E = E(t), \quad \vec{M} = \vec{M}(t).$$

Tuy nhiên để ý rằng trong các biến động lực đó thì  $\vec{r}$  và  $\vec{p}$  có vai trò cơ bản hơn so với E và  $\vec{M}$  vì hai đại lượng sau có thể biểu diễn qua hai đại lượng  $\vec{r}$  và  $\vec{p}$ , vì vậy tập hợp  $(\vec{r}, \vec{p})$  được gọi là trạng thái của cơ hệ :

Trong hình thức luận Hamilton, mà cơ sở của nó là phương trình chính tắc Hamilton :

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (9.1)$$

(Nếu đưa vào móc Poisson thì ta có thể viết các phương trình này dưới dạng đối xứng cho cả các tọa độ và các xung lượng liên hợp )

Bây giờ ta xét đến Cơ học lượng tử .

Trong Cơ học lượng tử trạng thái được mô tả bằng hàm sóng  $\psi(\vec{r}, t)$ . Biết được hàm sóng chúng ta sẽ thu được giá trị trung bình của bất cứ đại lượng nào tức là biết được đầy đủ về hệ . Phương trình chuyển động được viết qua hàm sóng chính là phương trình Schrodinger . Như ta đã biết :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

Như vậy xuất hiện một vấn đề là : trong Cơ học lượng tử có thể viết được các phương trình hoàn toàn tương tự như các phương trình chuyển động của cơ học cổ điển cho các biến động lực hay không ? Câu trả lời là có thể được . Tuy nhiên để làm được như vậy trước hết ta phải xây dựng vài định nghĩa mới đó là các móc Poisson lượng tử và khái niệm đạo hàm theo thời gian của các toán tử .

### III/ Các móc Poisson lượng tử :

1/ Các móc Poisson trong cơ học cổ điển :

Đạo hàm toàn phần theo thời gian của một hàm  $F(q,p,t)$  nào đó (phụ thuộc tọa độ  $q$ , xung lượng  $p$  và thời gian  $t$ ) trong vật lý học cổ điển có dạng :

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_K \left( \frac{\partial F}{\partial q_K} \cdot \frac{\partial q_K}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial p_K} \cdot \frac{\partial p_K}{\partial t} \right) \quad (9.2)$$

Nếu dùng các phương trình chính tắc Hamilton trong đó  $H = H(q,p)$  là hàm Hamilton – năng lượng toàn phần trong vật lý học cổ điển – biểu diễn qua xung lượng và tọa độ, thì khi đó ta có thể viết :

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_K \left( \frac{\partial H}{\partial p_K} \cdot \frac{\partial F}{\partial q_K} - \frac{\partial H}{\partial q_K} \cdot \frac{\partial F}{\partial p_K} \right) =$$

$$\text{hay} \quad \frac{dF}{dt} = \frac{dF}{dt} + (H, F)$$

Trong đó  $(H,F)$  là ký hiệu của tổng bên vế phải được gọi là móc Poisson cổ điển .

Tổng quát hơn móc Poisson không phải chỉ có thể định nghĩa cho H và F mà có thể định nghĩa cho hai hàm bất kỳ  $F(p, q)$  và  $G(p, q)$  – tức là cho các hàm phụ thuộc vào xung lượng và tọa độ như sau :

$$(F, G) = \sum_K \left( -\frac{\partial F}{\partial q_K} \frac{\partial G}{\partial p_K} + \frac{\partial G}{\partial q_K} \frac{\partial F}{\partial p_K} \right) \quad (9.3)$$

Nếu biến động lực F không phụ thuộc tường minh vào thời gian thì :

$$\frac{dF}{dt} = (H, F) \quad (do: \frac{dF}{dt} = 0) \quad (9.4)$$

Bằng ký hiệu móc Poisson ta có thể viết lại phương trình Hamilton có dạng :

$$\frac{dq_K}{dt} = (H, q_K) \quad \frac{dp_K}{dt} = (H, p_K) \quad (9.5)$$

Để ý rằng so với (7.1) các phương trình (6.5) hoàn toàn đối xứng đối với tọa độ và xung lượng .

Ta còn có vài móc Poisson đặc biệt khác nữa là :

$$(q_i, q_j) = 0 ; (p_i, q_j) = \delta_{ij} ; (p_i, p_j) = 0 \quad (9.6)$$

Từ định nghĩa móc Poisson ta suy ra các hệ quả sau đây :

a/ Tính phản xứng :

$$(F, G) = -(G, F)$$

Từ đó suy ra :  $(F, F) = 0$

b/ Nếu  $G = \text{const}$  thì :

$$(F, G) = (F, C) = 0$$

c/ Tuyến tính theo các phần tử :

$$(F_1 + F_2, G) = (F_1, G) + (F_2, G)$$

d/ Tính phân bố đối với phép nhân : (tương tự quy tắc lấy vi phân một tích) .

$$(F_1 F_2, G) = (F_1, G) F_2 + F_1 (F_2, G)$$

e/ Thỏa mãn đồng nhất thức Jacobi :

$$(F, (G, H)) + (G, (H, F)) + (H, (F, G)) = 0$$

2/ Móc Poisson lượng tử :

Ta chuyển sang bài toán Cơ học lượng tử . Ta định nghĩa móc Poisson lượng tử của hai toán tử F và G như sau :

$$[F, G]_q = \frac{i}{\hbar} (FG - GF) \quad (9.7)$$

Điều này có nghĩa là chúng ta chọn giao hoán tử với độ chính xác tới thừa số  $\frac{i}{\hbar}$  làm móc Poisson lượng tử, đơn vị ảo  $i$  là để đảm bảo tính Hermitic của các toán tử . Định nghĩa này được suy ra từ những lập luận cơ sở là :

- Các móc Poisson lượng tử thỏa mãn tất cả các đồng nhất thức của các móc Poisson cổ điển .

- Ta chọn các móc Poisson lượng tử sao cho giá trị bằng số của chúng trùng với trường hợp cổ điển ; ít nhất là khi chúng chứa các biến chính tắc tương ứng nhau . (Các biến động lực tương ứng ) .

Ví dụ : Khi xét :  $q = x$  ,  $p = px$  .

Với các móc Poisson cổ điển ta có :

$$(x, x) = 0 ; (P_x, P_x) = 0 ; (P_x, x) = 1 .$$

Với các móc Poisson lượng tử ta có :

$$[x, x]_q = 0$$

(9.8a)

$$[P_x, P_x]_q = 0$$

(9.8b)

$$[P_x, x] = \frac{i}{\hbar} [P_x x - x P_x] = 1$$

(9.8c)

Như vậy các giá trị của móc Poisson lượng tử trùng với giá trị của các móc Poisson cổ điển .

Các móc Poisson để cho tổ hợp các toán tử – tức là trường hợp phức tạp hơn trường hợp xét ở trên – có thể nhận được một cách tương tự . Như vậy từ đây ta thấy rất nhiều luận điểm cơ bản của Cơ học lượng tử có thể nhận được từ các luận điểm của cơ học cổ điển bằng cách sử dụng các móc Poisson .

Có thể nói thêm về các hệ thức (7.8) . Các hệ thức này rất quan trọng cho Cơ học lượng tử và có thể coi chúng như các điều kiện lượng tử hóa thay cho các điều kiện lượng tử hóa của lý thuyết Bohr –Zommerfeld . Với hệ thức :

$$P_x x - x P_x = \frac{\hbar}{i}$$

ta để ý rằng nó thỏa mãn nguyên lý tương ứng , cụ thể là khi  $\hbar \rightarrow 0$  thì bên phải bằng không và khi đó chúng ta nhận được điều kiện giao hoán đặc trưng cho các đại lượng của cơ học cổ điển .

### **III/ Đạo hàm theo thời gian của các toán tử :**

Để thiết lập các phương trình chuyển động lượng tử thì bước đầu tiên ta phải tìm được đạo hàm theo thời gian của các đại lượng động lực . Dễ dàng thấy rằng định nghĩa đạo hàm theo thời gian như là giới hạn theo tỷ số của sự biến đổi của chính biến động lực với khoảng thời gian tương ứng trong cơ học lượng tử là không thể được vì trong Cơ học lượng tử các đại lượng động lực nói chung không có giá trị xác định mà chỉ có các giá trị trung bình của các đại lượng động lực là có giá trị xác định .

Định nghĩa đạo hàm theo thời gian của biến động lực : Đạo hàm theo thời gian của một biến động lực F là một đại lượng mà giá trị trung bình của nó bằng đạo hàm theo thời gian của giá trị trung bình của nó .

Điều này có nghĩa là :

$$\overline{\dot{F}} = \dot{\overline{F}} \quad (9.9)$$

(dấu . chỉ đạo hàm theo thời gian , dấu – phía trên chỉ giá trị trung bình ) .

Với đại lượng F biểu thức cho giá trị trung bình của nó được cho bởi :

$$\bar{F} = \int \psi^* F \psi dV$$

để ý rằng :

$$i\hbar \frac{\partial \xi}{\partial t} = H \psi$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = H \psi^*$$

ta có thể viết được biểu thức cho đạo hàm của  $\bar{F}$  là  $\dot{\bar{F}}$  dưới dạng :

$$\begin{aligned} \dot{\bar{F}} &= \frac{d\bar{F}}{dt} = \int \left[ \frac{\partial \psi^*}{\partial t} F \psi + \psi^* F \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial F}{\partial t} \psi \right] dV = \\ &= \int \psi^* \left[ \frac{i}{\hbar} HF - \frac{i}{\hbar} FH + \frac{\partial F}{\partial t} \right] \psi dV = \\ &= \left\{ \text{Nhớ rằng: } (H, F) = \frac{i}{\hbar} (HF - FH) \right\} = \\ &= \int \psi^* \left\{ (H, F)_q + \frac{\partial F}{\partial t} \right\} \psi dV \equiv \dot{\bar{F}} \end{aligned}$$

Mặt khác :

$$\dot{\bar{F}} = \frac{d\bar{F}}{dt} = \int \psi^* \frac{dF}{dt} \psi dV$$

Như vậy từ sự so sánh :

$$\dot{\bar{F}} = \dot{\bar{F}}$$

ta có :

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + [H, F]_q = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [H, F] \quad (9.10)$$

Đây chính là biểu thức đạo hàm theo thời gian của toán tử F bất kỳ. Từ (9.10) dễ thấy rằng nếu toán tử không phụ thuộc tường minh vào thời gian thì:

$$\frac{dF}{dt} = [H, F]_q \quad (9.11)$$

Nhớ lại rằng trong cơ học cổ điển đạo hàm theo thời gian của một đại lượng cơ học có thể biểu diễn qua các móc Poisson cổ điển hoàn toàn tương tự như các công thức (9.10) và (9.11) :

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + (H, F) \quad , \quad \frac{dF}{dt} = (H, F)$$

Như vậy ở đây ta đã thiết lập được sự liên hệ giữa các móc Poisson lượng tử và các móc Poisson cổ điển. Điều này có nghĩa là cấu trúc móc Poisson chứng tỏ mối quan hệ mật thiết của cơ học cổ điển và cơ học lượng tử.

Mọi trường hợp đặc biệt cần lưu ý là : Có một số toán tử không phụ thuộc tường minh vào thời gian và giao hoán với Hamiltonien do đó : (nếu ký hiệu nó là F) :

$$\frac{dF}{dt} = 0$$

Những đại lượng động lực tương ứng với các toán tử này khi đó được gọi là các đại lượng bảo toàn – hay các tích phân chuyển động . Khi đó từ :

$$\dot{\bar{F}} = \bar{\dot{F}} = 0$$

ta suy ra :  $F = \text{const}$

và có nghĩa là giá trị trung bình của đại lượng này không đổi theo thời gian .

#### IV/ Các phương trình chuyển động lượng tử . Định lý Ehrenfest .

Bây giờ ta có thể viết các phương trình chuyển động lượng tử ở dạng mà trong đó các đạo hàm theo thời gian của chính các biến động lực . Vì trong Cơ học lượng tử các biến động lực được đối ứng với các toán tử xác định do đó phương trình cần tìm trong dạng tổng quát sẽ được viết cho các toán tử này cụ thể là  $p$  và  $q$  . Mặt khác do các toán tử này không phụ thuộc tường minh vào thời gian nên ta có :

$$\frac{dq}{dt} = [H, q]_q \quad (9.12)$$

$$\frac{dp}{dt} = [H, p]_q \quad (9.13)$$

Chúng có dạng giống hệt với dạng của cơ học cổ điển . Để tìm hiểu ý nghĩa các phương trình trên ta áp dụng vào một trường hợp cụ thể , đó là dạng Hamilton có dạng :

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

Nhớ rằng các toán tử tọa độ và xung lượng có dạng :

$$q = \hat{x} = x, \quad p = p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

Ta xét phương trình (9.12) :

$$\frac{dx}{dt} = [H, x]_q$$

Vì  $x$  và  $U$  giao hoán nên :

$$[H, x]_q = \frac{i}{2m\hbar} (P_x^2 x - x P_x^2)$$

Nhưng để ý rằng :

$$\begin{aligned} P_x^2 x - x P_x^2 &= -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} x - x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) = \\ &= -\hbar^2 \left( x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) = \\ &= -2\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x} = -2i\hbar P_x \end{aligned}$$



Vậy nên ta có :

$$[H, x]_q = \frac{i}{2m\hbar} (-2i\hbar P_X) = \frac{P_X}{m}$$

Nghĩa là ta có :

$$\frac{dx}{dt} = [H, x]_q = \frac{1}{m} P_X \quad (9.14)$$

Như vậy ta thấy rằng : toán tử vận tốc liên hệ với toán tử xung lượng bằng hệ thức giống hệt như các hệ thức trong cơ học cổ điển .

Ta xét đến phương trình (9.13) :

$$\frac{dP_X}{dt} = [H, P_X]_q$$

Nhưng do có :

$$[H, P_X]_q = \frac{i}{\hbar} (U_{P_X} - P_X U) = -\frac{\partial U}{\partial x}$$

Nên ta có kết quả là :

$$\frac{dP_X}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x} \quad (9.15)$$

Như vậy ta nhận được phương trình chuyển động của toán tử dưới dạng giống như phương trình Newton . Mặt khác lưu ý là ý nghĩa của việt đối ứng các toán tử với các biến động lực là ở chỗ biết các toán tử và hàm sóng chúng ta có thể tính các giá trị trung bình của các đại lượng cơ học tương ứng :

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{1}{m} \bar{P}_X, \quad \frac{d\bar{P}_X}{dt} = -\overline{\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)} \quad (9.16)$$

Các hệ thức (9.16) được gọi là các phương trình chuyển động Ehrenfest.

Biểu diễn  $P_X$  qua  $x$  ta suy ra :

$$m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = -\overline{\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)} \quad (9.17)$$

Phương trình này giống hệt phương trình Newton (định luật Newton thứ hai) .

Tóm lại là : Trong Cơ học lượng tử các hệ thức và các định luật phát biểu cho các giá trị trung bình giống hệt với dạng của các phương trình và định luật tương ứng trong cơ học cổ điển .

Do đó nhờ các phương trình (9.16) và (9.17) người ta giải thích được sự liên hệ giữa cơ học cổ điển và Cơ học lượng tử .

## §10 SỰ LIÊN HỆ GIỮA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ VỚI CƠ HỌC CỔ ĐIỂN VÀ QUANG HỌC

### I/ Sự chuyển từ phương trình Schrodinger hiện đại về phương trình Hamilton – Jacobi cổ điển :

Trong phần cuối của bài trước ta đã thiết lập được mối quan hệ giữa những phương trình chuyển động lượng tử và phương trình Newton . Và chính nhờ đó , ta đã thiết lập mối quan hệ giữa Cơ học lượng tử và Cơ học cổ điển . Ta có thể tìm thấy mối quan hệ này bằng một phương pháp khác cụ thể là ta có thể chứng minh rằng phương trình Hamilton – Jacobi cổ điển là trường hợp giới hạn của phương trình Schrodinger hiện đại .

Muốn chứng minh điều đó trước hết ta hãy nhắc lại một số vấn đề của phương trình Hamilton – Jacobi . Hơn nữa để cho bài toán được đơn giản ta giới hạn chỉ xét bài toán chuyển động của hạt có khối lượng m trong trường lực thế  $U(x,y,z,t)$  . Ta viết phương trình Hamilton – Jacobi nhờ hàm tác dụng  $S_0(x,y,z,t)$  , hàm số này có các tính chất là :

$$P_X = -\frac{\partial S_0}{\partial x} , \quad P_Y = -\frac{\partial S_0}{\partial y} , \quad P_Z = -\frac{\partial S_0}{\partial z} . \quad (10.1)$$

Trong đó  $P_X, P_Y, P_Z$  là các hình chiếu của xung lượng lên các trục tọa độ . Phương trình hamilton – Jacobi trong trường hợp này có dạng :

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left\{ \left( \frac{\partial S_0}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial S_0}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial S_0}{\partial z} \right)^2 \right\} + U(x, y, z, t) \quad (10.2)$$

Vì hàm số Hamilton  $H(P_X, P_Y, P_Z, x, y, z, t)$  có dạng :

$$H(P_X, P_Y, P_Z, x, y, z, t) = \frac{1}{2m} (P_X^2 + P_Y^2 + P_Z^2) + U(x, y, z, t) \quad (10.3)$$

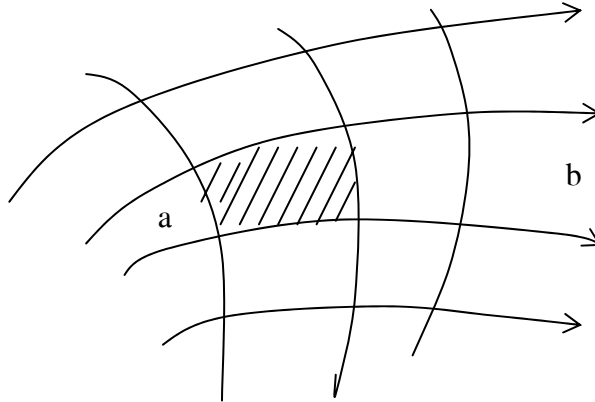
Nên từ (10.1) và (10.2) ta suy ra rằng phương trình Hamilton – Jacobi có thể viết dạng khác là :

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} = H \left( -\frac{\partial S_0}{\partial x}, -\frac{\partial S_0}{\partial y}, -\frac{\partial S_0}{\partial z}, x, y, z, t \right) \quad (10.4)$$

Nếu hàm Hamilton không phụ thuộc tường minh vào thời gian thì nó bằng năng lượng E của hạt . Khi đó từ (10.4) ta suy ra :

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} = E \quad \text{suy ra: } S_0 = Et - S_0(x, y, z) \quad (10.5)$$

Các đẳng thức (10.1) chứng tỏ rằng các quỹ đạo là những đường trực giao với các mặt  $S_0 = \text{const}$ . Nếu  $H$  không phụ thuộc tường minh vào thời gian thì dạng của những hạt này không thay đổi theo thời gian. Các mặt đó và các quỹ đạo khả dĩ của hạt được minh họa như hình vẽ sau :



Giả sử ta xét một hạt bất kỳ tại thời điểm  $t = 0$  nằm tại điểm  $a$ , sau đó hạt sẽ chuyển động theo quỹ đạo giả sử là  $ab$ . Ta hãy tưởng tượng một đám hạt có những tọa độ ban đầu  $x_0, y_0, z_0$  khác nhau giả sử trong một thể tích nguyên tố  $\Delta V$  ta có số hạt là :  $\Delta N = \rho \Delta V$ , trong đó  $\rho$  là mật độ hạt. Đến thời điểm  $t$  tất cả những hạt này rơi vào một miền khác nào đó của không gian nhưng tất nhiên số hạt sẽ không thay đổi. Do đó nếu theo dõi chuyển động của thể tích nguyên tố  $\Delta V$  chứa những hạt này thì số hạt trong thể tích đó cũng sẽ không đổi. Ký hiệu đạo hàm định xứ là  $\frac{D}{Dt}$ , ta có :

$$\frac{D\Delta N}{Dt} = \Delta V \frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{D\Delta V}{Dt} = 0$$

Nhưng để rằng :

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \cdot \vec{v}, \quad \frac{D\Delta V}{Dt} = \text{div}(\vec{v} \cdot \Delta V)$$

trong đó  $\vec{v}$  là vận tốc chuyển động của hạt. Như vậy thay các kết quả này vào biểu thức trên ta có kết quả :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \cdot \vec{v}) = 0 \quad (10.6)$$

Mặt khác từ (10.1) ta có :

$$\vec{v} = \frac{p}{m} = -\frac{1}{m} \nabla S \quad (10.7)$$

Do đó ta có thể viết (10.6) dưới dạng :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} - \frac{1}{m} \operatorname{div}(\rho \nabla S_0) = 0$$

hay

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{m} (\nabla_{\rho} \nabla S_0 + \rho \nabla^2 S_0) \quad (10.8)$$

Điều này có nghĩa là đám hạt chuyển động như một khối chất lỏng, thể tích mà ta xét không bị tan rã mà chỉ bị biến dạng thôi.

Ta có thể giải thích phương trình (10.8) một cách khác. Nếu ta chia số hạt  $\Delta N$

trong thể tích  $\Delta V$  cho tổng số hạt  $N$  thì ta có thể coi  $\left(\frac{\Delta N}{N}\right)$  như là xác suất để tìm thấy hạt trong thể tích  $\Delta V$  còn mật độ  $\rho$  có thể coi như mật độ xác suất.

Bây giờ ta hãy xét phương trình Schrodinger trong Cơ học lượng tử, cụ thể hơn ta chứng minh rằng phương trình này có thể quay về phương trình Hamilton – Jacobi khi tính gần đúng.

Muốn thế ta viết hàm sóng với dạng :

$$\psi = e^{-\frac{i}{\hbar} S} \quad (10.9)$$

trong đó  $S$  là một hàm số nào đó chưa xác định. Từ (7.9) ta có :

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial x} \psi,$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 \psi - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \psi$$

Thay hai kết quả này vào phương trình schrodinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad \text{Với } H = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z, t)$$

ta có phương trình cho hàm số  $S$  :

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{m} \left\{ \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2 \right\} + U(x, y, z, t) + \frac{i\hbar}{2m} \Delta S \quad (10.10)$$

Ta phân tích  $S$  theo những lũy thừa của  $i\hbar$  :

$$S = S_0 + (i\hbar)S_1 + (i\hbar)^2 S_2 + \dots \quad (10.11)$$

Thay (10.11) vào (10.10) và so sánh các lũy thừa cùng bậc của  $\hbar$  ta có các phương trình :

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left\{ \left( \frac{\partial S_0}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial S_0}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial S_0}{\partial z} \right)^2 \right\} + U(x, y, z, t) \quad (10.12a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_1}{\partial t} &= \frac{1}{2m} \left\{ 2 \frac{\partial S_0}{\partial x} \frac{\partial S_1}{\partial x} + 2 \frac{\partial S_0}{\partial y} \frac{\partial S_1}{\partial y} + 2 \frac{\partial S_0}{\partial z} \frac{\partial S_1}{\partial z} + \nabla^2 S_0 \right\} \\ &= \frac{1}{2m} (2 \nabla S_0 \nabla S_1 + \Delta S_0) \end{aligned} \quad (10.12b)$$

Phương trình đầu của (10.12a) trùng với phương trình Hamilton – Jacobi, còn phương trình thứ hai (10.12b) bằng một vài phép biến đổi không phức tạp có thể đưa về phương trình liên tục.

Lưu ý là trong các biến đổi trên ta đã bỏ qua lượng  $\frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S$ . Ta có thể làm như thế nếu:

$$\frac{1}{2m} (\nabla S_0)^2 \gg \left| \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S \right| \quad (10.13)$$

hay sử dụng (10.1) thì (10.13) trở thành:

$$\frac{p^2}{2m} \gg \frac{\hbar}{2m} |\operatorname{div} \vec{p}| \quad (10.14)$$

Hệ thức này có nghĩa là động năng phải lớn còn biến đổi của xung lượng phải nhỏ. Trong trường hợp một chiều ta có:

$$p^2 \gg \hbar \frac{dp}{dx} \quad (10.14')$$

Nhưng nếu đưa vào bước sóng De Broglie:

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{2\pi \hbar}{p} \\ \text{ta thu được:} \\ \frac{d\lambda}{dx} &\ll 2\pi \end{aligned} \quad (10.15)$$

Kết quả quan trọng này có nghĩa là: bước sóng phải là một hàm số thay đổi chậm theo tọa độ.

### II/ Cơ học lượng tử và quang học :

Về mặt lịch sử, sự song song giữa quang hình học và cơ học do Hamilton xây dựng nên là một trong những nguồn gốc của Cơ học lượng tử De Broglie là người đầu tiên đã đưa những điều tương tự bị bỏ quên này vào vật lý học hiện đại và nhờ những điều tương tự này mà Cơ học lượng tử hay chính xác hơn là cơ học sóng đã tiến được những bước tiến đầu tiên. Người ta thường nói rằng Schrodinger đã xây dựng một môn cơ học lượng tử tương tự với quang học sóng.

Nhưng ta cần lưu ý rằng đây chỉ là sự tương tự, phương trình của Schrodinger không hề trùng với phương trình nào trong số những phương trình truyền sóng mà từ trước tới nay ta đã biết. Những phương trình truyền sóng luôn là những phương trình đạo hàm riêng cấp hai theo thời gian trong khi đó thì phương trình Schrodinger lại là phương trình cấp một theo thời gian và ngoài ra còn nhiều sự khác nhau nữa giữa hai phương trình đó.

Tuy nhiên, so sánh phương trình Schrodinger với các phương trình sóng vẫn là việc đáng lưu ý. Giả sử rằng ta xét một môi trường đồng nhất nào đó, trong đó vận tốc truyền của một sóng – có độ dịch chuyển  $f$  nào đó – là  $v$ . Phương trình truyền của độ dịch chuyển  $f$  sẽ là :

$$\Delta f - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = 0 \quad (10.16)$$

Đối với những sóng có tần số góc là  $\omega$ , ta đặt :

$$f = U e^{-i\omega t} \quad (10.17)$$

Khi đó từ (10.16) ta có :

$$\Delta U + k^2 U = 0, \quad k^2 = \frac{\omega^2}{v^2} \quad (10.18)$$

(  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  là số sóng, còn  $\lambda$  là bước sóng ). Ta đưa vào lượng được gọi là chiết suất :

$$n(x, y, z) = \frac{k}{k_0} = \frac{\lambda}{\lambda_0} \quad (10.19)$$

trong đó  $\lambda_0$  là bước sóng trong chân không. Khi đó phương trình (10.18) dưới dạng mới :

$$\Delta U + k_0^2 n^2 U = 0 \quad (10.20)$$

Phương trình (10.20) là phương trình sóng, nghĩa là các phương trình dạng này đều mô tả quá trình truyền sóng và ngược lại mọi sóng được mô tả bằng phương trình có dạng như thế.

Bây giờ ta xét phương trình schrodinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U(x, y, z)\psi \quad (10.21)$$

Nếu ta đặt :

$$\psi = u e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad (10.22)$$

thì phương trình (10.21) sẽ có dạng :

$$\Delta u + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)u = 0 \quad (10.23)$$

Bây giờ ta giả sử  $U = C = \text{Const}$  trong miền nào đó , và ký hiệu số sóng khi đó là  $k_0$  . Ta sẽ có :

$$k_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - C)$$

ký hiệu chiết suất của các sóng đối với miền này là :

$$n^2 = \frac{E - U}{E - C} = \frac{k^2}{k_0^2} \quad (10.24)$$

khi đó phương trình (10.23) có dạng :

$$\Delta U + k_0^2 n^2 u = 0 \quad (10.25)$$

Phương trình này hoàn toàn trùng với phương trình (10.20) .

## §11 CÁC CÁCH PHÁT BIỂU CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

### I/ Cơ học lượng tử của Schrodinger:

Cơ học lượng tử được manh nha từ thời kỳ 1923 - 1924. Năm 1926 Schrodinger đã phát triển và tổng quát hóa khái niệm sóng vật chất của De Broglie và đã tìm được phương trình truyền sóng cho hạt tự do:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \quad (11.1)$$

và cho hạt trong trường thế:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \right] \psi(\vec{r}, t) \quad (11.2)$$

Cơ học lượng tử của Schrodinger được gọi là cơ học sóng-Nghiệm của phương trình sóng mô tả một sóng nên được gọi là hàm sóng.

Cơ học lượng tử của Schrodinger tuy cơ sở xây dựng không chặt chẽ nhưng ưu điểm nổi bật của nó là trực quan và công cụ toán học đơn giản. Vì vậy cho tới nay trong các giáo trình cơ học lượng tử cơ học sóng vẫn chiếm vị trí chủ yếu.

### II/ Cơ học ma trận Heisenberg:

Ngược với cơ học sóng, khi xây dựng cơ học của mình Heisenberg chỉ sử dụng các đại lượng đo được từ thực nghiệm. Cần lưu ý là vào thời kỳ đó các đại lượng quan sát được đặc trưng cho chuyển động bên trong của nguyên tử chỉ là tần số và cường độ bức xạ mà nguyên tử phát ra. Khi phân tích các đại lượng đó Heisenberg nhận thấy chúng có tính gián đoạn. Ví dụ tần số bức xạ của nguyên tử được xác định phụ thuộc hai chỉ số:  $\nu_{12}$ ,  $\nu_{21}$ ,  $\nu_{22}$  ... v.m.n. Như vậy tần số không phải xếp thành hàng mà thành các bảng mà sau này ta gọi là các ma trận.

Theo Heisenberg tất cả các đại lượng đặc trưng cho chuyển động bên trong nguyên tử đều có thể biểu diễn dưới dạng những ma trận như ma trận tọa độ, ma trận xung lượng.v.v.

Dựa trên lý thuyết của mình Heisenberg đã tìm lại được các kết quả như phương trình Schrodinger tìm ra và đã tìm được hệ thức bất định.

Cơ học ma trận có sự chính xác cao về mặt toán học nhưng tính trừu tượng quá mức của nó là khó khăn không nhỏ cho người học. Chính vì vậy nó ít được trình bày trong các giáo trình.

### III/ Cơ học lượng tử của P.Dirac :

Cơ học lượng tử của P.Dirac là sự thống nhất cả hai hình thức trên thành một hệ thống duy nhất, mà nội dung toán học là bài toán trị riêng của các toán tử Hermitic trong không gian Hilbert.

Không gian Hilbert là không gian tuyến tính phức vô hạn chiều.

Dirac đưa vào một số ký hiệu mới:

Ket-vector :  $|\psi\rangle$  = vector cột,  $|\psi\rangle = \langle\psi|^+$

Bra vector :  $\langle\psi|$  = vector hàng,  $\langle\psi| = |\psi\rangle^+$

Tích vô hướng hai vector :

$$(\varphi, \psi) = \varphi^+ \psi = \langle\varphi|\psi\rangle$$

Chuẩn vector :

$$|\psi| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$$

Hệ cơ sở trực chuẩn của L và L<sup>+</sup> (không gian liên hợp của L) là :

$$|1\rangle, |2\rangle, \dots |n\rangle \in L$$

$$\langle 1|, \langle 2|, \dots \langle n| \in L^+$$

Khai triển vector theo cơ sở:

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^n \psi_j |j\rangle ; \psi_j = \langle j|\psi\rangle$$

hay:



$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^n |j\rangle \langle j|\psi\rangle \quad (11.3)$$

$$\langle\psi| = \sum_{j=1}^n \tilde{\psi}_j \langle j|; \tilde{\psi}_j = \langle\psi|j\rangle = \langle j|\psi\rangle^* = \psi_j^*$$

$$\langle\psi| = \sum_{j=1}^n \langle\psi|j\rangle \langle j|$$

Ma trận đơn vị : (ứng với toán tử đơn vị):

$$I = \sum_{j=1}^n |j\rangle \langle j| \quad (11.4)$$

Hệ thức này là điều kiện đủ của cơ sở trực chuẩn.

Sử dụng điều kiện đủ ta có thể viết:

$$|\psi|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|I|\psi\rangle = \sum_{j=1}^n \langle\psi|j\rangle \langle j|\psi\rangle =$$

$$\sum_{j=1}^n \psi_j^* \psi_j = \sum_{j=1}^n |\psi_j|^2$$

Các phần tử ma trận của toán tử  $\hat{F}$  trong ký hiệu Dirac:

$$\hat{F}|\psi\rangle = |\psi'\rangle \quad (11.5)$$

Nhân hai vế với  $\langle j|$  và sử dụng điều kiện đủ ta có:

$$\langle j|\psi'\rangle = \langle j|\hat{F}|\psi\rangle = \langle j|\hat{F}I|\psi\rangle =$$

$$= \sum_{k=1}^n \langle j|\hat{F}|k\rangle \langle k|\psi\rangle = \sum_{k=1}^n \langle j|\hat{F}|k\rangle \psi_k$$

$$\langle j|\psi'\rangle = \psi'_j = \sum_{k=1}^n \langle j|\hat{F}|k\rangle \psi_k$$

Vậy:

Nghĩa là:

(11.6)

$$a_{ik} = \langle j|\hat{F}|k\rangle.$$

Với các ký hiệu mới, cơ học lượng tử của Dirac được phát biểu dưới dạng tiên đề. Hệ tiên đề như sau:

Tiên đề 1: Các trạng thái của cơ học lượng tử được mô tả bằng các vector  $|\psi\rangle$  của không gian Hilbert trừu tượng.

Tiên đề 2: Trong cơ học lượng tử các biến động lực được đối ứng với các toán tử Hermitic  $\hat{F}$  tác dụng trong không gian Hilbert các vector trạng thái.

Như vậy trong hệ cơ sở xác định toán tử đối ứng với ma trận:

$$\left(\hat{F}\right)_{jk} = \langle j|\hat{F}|k\rangle = f_{jk}$$

Tiên đề 3: Các kết quả khả dĩ duy nhất của việc đo đại lượng động lực nào đó ở trạng thái cho trước là các giá trị riêng của toán tử đối ứng  $\hat{F}$ .

Như vậy muốn biết các giá trị nào là khả dĩ nhận được khi đo đại lượng vật lý nào đó thì ta phải giải bài toán trị riêng  $\hat{F}|f\rangle = f|f\rangle$ .

Tiên đề 4: Xác suất nhận giá trị  $f$  khi đo biến động lực  $\hat{F}$  ở trạng thái  $|\psi\rangle$  được cho bằng công thức:

$$W_{\psi}(f) = |\langle f|\psi\rangle|^2 = |\psi_f|^2 \quad (11.7)$$

Tiên đề 5: Các tọa độ  $X_j$  và xung lượng  $P_j$  ( $j$  là ký hiệu bậc tự do) của cơ hệ lượng tử tương ứng với các toán tử  $X_j$  và  $P_j$  thỏa mãn hệ thức giao hoán:

$$X_j P_K - P_K X_j = i\hbar \delta_{jK} \quad (11.8)$$

Tiên đề 6 (Tiên đề động lực học): Đối với bất kỳ hệ vật lý nào sự biến đổi giá trị trung bình của biến động lực  $\hat{F}$  ở trạng thái  $|\psi\rangle$  được xác định bằng phương trình:

$$\frac{d\langle \hat{F} \rangle_{\psi}}{dt} = \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle_{\psi} + \langle [HF]_P \rangle \quad (11.9)$$

trong đó:

$$[H, F]_P = \frac{i}{\hbar} (HF - FH)$$

#### **IV/ Cơ học lượng tử của R. Feynman :**

Một cách trình bày khác rất hiện đại Cơ học lượng tử là cách trình bày cơ học lượng tử bằng hình thức tích phân quỹ đạo của R. Feynman hay còn gọi là tích phân lộ trình. (Thuật ngữ tích phân lộ trình được dùng để tránh được từ quỹ đạo có thể gây hiểu lầm về quỹ đạo của vi hạt mà nguyên lý bất định Heisenberg đã loại bỏ) Nội dung của cách trình bày này của Feynman có thể xây dựng từ lập luận khá đơn giản như sau :

Ta xét hệ chuyển động một chiều với chuyển động một chiều với phương trình chuyển động  $x(t)$ . Giả sử hệ chuyển động từ  $a$  đến  $b$ , và giả sử :

$$x(t_a) \equiv x_a.$$

$$x(t_b) \equiv x_b.$$

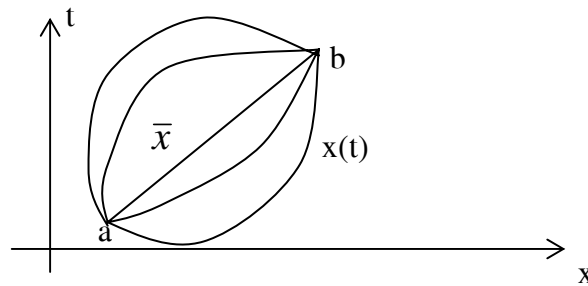
Vấn đề đặt ra là tìm xác suất chuyển từ  $a$  đến  $b$  của hạt  $P(a \rightarrow b)$  :

$$P(a \rightarrow b) = |K(a, b)|^2$$

trong đó  $K(a, b)$  là biên độ xác suất.

Trong Cơ học cổ điển chỉ có một quỹ đạo của hệ là quỹ đạo thỏa mãn nguyên lý tác dụng tối thiểu. (cần lưu ý là  $a, b$  tổng quát là trạng thái và "quỹ đạo" cũng

phải hiểu theo nghĩa tổng quát). Trong Cơ học lượng tử hạt có thể đi theo vô số đường khác nhau để thực hiện phép dời chuyển từ  $a$  đến  $b$ .



Ta có thể hình dung lại thí nghiệm bắn điện tử qua màn chắn với việc cho các vị trí khác nhau của lỗ trên màn. Thực tế chứng tỏ rằng dù cho lỗ ở bất kỳ vị trí nào ta vẫn thu được điện tử ở phía bên kia của màn chắn. Đó là một đặc trưng lượng tử của hạt vi mô.

Như vậy biên độ xác suất toàn phần có thể viết:

$$K(a, b) = \sum_{\text{mọi quỹ đạo từ } a \rightarrow b} \varphi[x(t)]$$

trong đó:  $\varphi[x(t)]$  là phiếm hàm. Feynman thừa nhận dạng  $\varphi[x(t)]$  như là một tiên đề:

$$\varphi[x(t)] = e^{\frac{i}{\hbar} S[b, a]}$$

với:

$$S[b, a] = \int_{t_a}^{t_b} L(x, \dot{x}, t) dt$$

là hàm tác dụng cổ điển. (Nếu  $x = \bar{x}$  thì  $dS = 0$ )

Từ việc thừa nhận tiên đề này ta có thể tìm lại nhiều kết quả của Cơ học lượng có được bằng các cách trình bày trước đây.

Mặc dù có nhược điểm không nhỏ là việc tính toán khá phức tạp (đặc biệt là gặp phải các tích phân Gauss) nhưng trong giai đoạn những năm cuối thế kỷ 20 phương pháp tích phân quỹ đạo của Feynman phát triển rất mạnh và thậm chí trở thành công cụ chủ yếu của Vật lý lý thuyết hiện đại. Và đạt nhiều kết quả rực rỡ trong việc nguyên cứu lý thuyết các trường lượng tử.

## §12 CÁC CÁCH MÔ TẢ SỰ PHỤ THUỘC THỜI GIAN CỦA HỆ VI MÔ

**1/ Bức tranh Schrodinger :**

Cách mô tả này xem trạng thái của vi hệ phụ thuộc thời gian với quy luật biến đổi được xác định bằng phương trình Schrodinger.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

Cách mô tả này thường được gọi là bức tranh Schrodinger.

Nếu toán tử H không phụ thuộc tường minh vào thời gian ta có thể thay phương trình Schrodinger bằng phương trình:

$$\psi(t) = U(t, t_0) \psi(t_0) \quad (12.1)$$

$$U(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)\right]$$

trong đó:

(12.2)

Thật vậy từ (7.1) lấy đạo hàm hai vế theo thời gian ta có:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} &= \frac{dU(t, t_0)}{dt} \psi(t_0) = -\frac{i}{\hbar} H \exp\left[-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)\right] \psi(t_0) \\ &= -\frac{i}{\hbar} H U(t, t_0) \psi(t_0) \end{aligned}$$

$$U(t, t_0) = \frac{\psi(t)}{\psi(t_0)}$$

Mà từ (12.1) ta có : Nên thay vào ta có:

$$\frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} H \psi \quad \text{hay :} \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

Nghĩa là ta lại quay về phương trình Schrodinger.

Với toán tử U(t,t0) ta có thể chứng tỏ nó là toán tử Unita.

Thật vậy do H là Hermitic nên ta có:

$$U^+(t, t_0) = \exp\left[\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)\right] = U^-(t, t_0)$$

như vậy ta có:

$$U^+(t, t_0) U(t, t_0) = U(t, t_0) U^+(t, t_0) = I$$

nghĩa là toán tử U(t,t0) là toán tử Unita. Điều này là cần thiết do yêu cầu bảo toàn chuẩn trong phép biến đổi(12.1).

Với toán tử U(t,t0), nó thỏa mãn phương trình:

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = HU$$

Trong bức tranh Schrodinger, các toán tử động lực không phụ thuộc tường minh vào thời gian là các đại lượng cố định, hệ hàm riêng của các toán tử này cũng là các hệ hàm cố định trong không gian Hilbert.

**2/ Bức tranh Heisenberg:**

Một cách khác mô tả sự phụ thuộc thời gian của vi hệ-được gọi là bức tranh Heisenberg- là xem trạng thái có dạng:

$$\psi_H \equiv U^+(t, t_0) \psi_S(t) \quad (12.3)$$

(chữ H và S ở các hàm sóng và toán tử chỉ rằng hàm sóng và toán tử được cho trong bức tranh Heisenberg hay Schrodinger ).

Từ (12.3) do tính Unitar của U và do (12.1) ta có :

với hàm sóng

$$\psi_H = U^+(t, t_0) U(t, t_0) \psi_S(t_0) = \psi_S(t_0)$$

và với các toán tử :

$$L_S \rightarrow L_H \equiv U^+(t, t_0) L_S U(t, t_0)$$

(12.4)

(Ma trận của  $L_S$  đồng dạng với ma trận  $L_H$  ).

Như vậy trong bức tranh Heisenberg, các trạng thái là các vector cố định trong không gian Hilbert còn các toán tử động lực sẽ là các lượng biến đổi theo thời gian.

**3/ Bức tranh tương tác :**

Cách thứ ba-được gọi là bức tranh tương tác-là cách trung gian giữa hai bức tranh trên mà trong đó cả vector trạng thái lẫn các toán tử động lực đều phụ thuộc thời gian. Bức tranh tương tác thường gắn liền với phương pháp nhiễu loạn trong đó có sự phân chia Hamiltonien :

$$H = H_0 + H_1$$

trong đó: H là Hamiltonien toàn phần,  $H_0$  là Hamiltonien không tương tác,  $H_1$  là Hamiltonien nhiễu loạn.

**4/ So sánh hai bức tranh cơ bản: (bức tranh Schrodinger và bức tranh Heisenberg ).**

a/ Hai bức tranh trên là tương đương nhau do việc chuyển từ bức tranh này sang bức tranh kia được thực hiện nhờ phép biến đổi Unitar, do đó phép biến đổi này hoàn toàn không thay đổi các trị riêng của các toán tử động lực. Do đó, các giá trị trung bình của các đại lượng động lực là bất biến.

b/ Về phương diện tính toán bức tranh Schrodinger thuận tiện hơn do trong trường hợp này ta chỉ cần xác định một vector là vector trạng thái-một ma trận cột-nếu dùng một cơ sở xác định của không gian Hilbert các trạng thái. Còn trong bức tranh Heisenberg ta phải tính toán trên những ma trận biểu diễn của các toán tử động lực để tìm các quy luật biến đổi của chúng theo thời gian. Các tính toán này là khá phức tạp.

Tuy nhiên bức tranh Heisenberg cho ta thấy về mặt hình thức có một sự tương đồng giữa cơ học lượng tử và cơ học kinh điển. (cụ thể là cơ học kinh điển trong hệ

hình thức Hamilton). Nói rõ hơn là cấu trúc toán học của chúng đều là cấu trúc đại số Lie, do các giao hoán tử và các móc Poisson đều là các phần tử của đại số Lie.

### §13 CÁC BIỂU DIỄN TRONG CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

Trong cơ học lượng tử trạng thái của vi hạt được mô tả bằng vector trạng thái – là vector trong không gian Hilbert. Nhưng ta biết rằng trong không gian Hilbert các trạng thái này chúng ta có thể dùng các cơ sở khác nhau để xét bài toán. Thông thường người ta chọn các cơ sở này là các hàm riêng trực chuẩn của các toán tử động lực. (các toán tử Hecmitie).

Nếu ta xem hàm sóng là hàm  $\psi = \psi(\vec{r}, t)$  thì các toán tử động lực có dạng:  
 $\hat{r} \equiv \hat{r}$  ;  $\hat{P} \equiv -i\hbar\nabla$  ;  $L \equiv -i\hbar[\vec{r} \times \nabla]$ .

cách mô tả này được gọi là biểu diễn tọa độ (của hàm sóng và các toán tử động lực).

Nếu hệ cơ sở trực chuẩn là hệ  $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$  - các hàm riêng của toán tử momen xung lượng- thì cách mô tả này của hàm sóng và các toán tử động lực được gọi là biểu diễn momen xung lượng.

Tương tự như thế nếu dùng cơ sở là hệ trực chuẩn của toán tử xung lượng hay của toán tử năng lượng ta sẽ có biểu diễn xung lượng hay biểu diễn năng lượng tương ứng.

Tất nhiên, do các cơ sở là bình đẳng, nên tất cả các biểu diễn đều tương đương nhau. Vì vậy việc chọn biểu diễn này hay biểu diễn khác chỉ xuất phát từ bài toán cụ thể cho thuận tiện việc tính toán.

Hơn nữa về mặt toán học khi chuyển cơ sở trực chuẩn sang một cơ sở trực chuẩn khác bằng một phép biến đổi Unitar nào đó thì ma trận các toán tử sẽ biến thành ma trận đồng dạng, các phép biến đổi khi đó được gọi là các phép biến đổi chính tắc. Mặt khác ta cũng biết rằng nếu cơ sở là một hệ hàm riêng tiêu chuẩn của toán tử  $\hat{F}$  nào đó thì ma trận biểu diễn của  $\hat{F}$  trong cơ sở đó sẽ có dạng chéo.

#### I/ Cơ học lượng tử trong $\hat{F}$ -biểu diễn :

Ta chọn một biến động lực xác định nào đó và xét toán tử  $\hat{F}$  Hermitic tương ứng với nó. Bài toán trị riêng tương ứng cho  $\hat{F}$  là:

$$\hat{F}|f\rangle = f|f\rangle \quad (13.1)$$

Ta chọn hệ cơ sở trực chuẩn là các vector riêng của toán tử  $\hat{F}$  thỏa mãn điều kiện (trực chuẩn và đủ):

$$\langle f' | f'' \rangle = \delta_{f' f''} \quad (13.2)$$

$$\sum_f |f\rangle \langle f| = I \quad (13.3)$$

1/ Trạng Thái  $|\psi\rangle$  trong  $\hat{F}$  - Biểu diễn :

Vector bất kỳ  $|\psi\rangle$  khi triển theo hệ cơ sở  $|f\rangle$  như sau:

$$|\psi\rangle = \sum_f \psi_f |f\rangle$$

(13.4)

trong đó:

$$\psi_f = \langle f | \psi \rangle \quad (13.5)$$

là một tập hợp các số (do  $\langle f | \psi \rangle$  là một tích vô hướng). Xác định đơn vị vector  $|\psi\rangle$  và được gọi là hàm sóng của trạng thái  $|\psi\rangle$  trong  $\hat{F}$  biểu diễn.

2/ Toán Tử  $\hat{Q}$  trong  $\hat{F}$  - Biểu diễn:

Ta xét toán tử  $\hat{Q}$  nào đó chuyển vector  $|\psi\rangle$  thành vector  $|\varphi\rangle$ . Nghĩa là :

$$\hat{Q}|\psi\rangle = |\varphi\rangle \quad (13.6)$$

Khi đó ta nhân trái hai vế với  $\langle f' |$  sẽ được:

$$\langle f' | \varphi \rangle = \langle f' | \hat{Q} | \psi \rangle = \sum_f \langle f' | \hat{Q} | \psi \rangle \langle f | \psi \rangle$$

hay :

$$\varphi_{f'} = \sum_f Q_{f'f} \psi_f$$

Nghĩa là toán tử  $\hat{Q}$  trong  $\hat{F}$  - biểu diễn được đối ứng với ma trận  $Q_{f'f}$  :

$$Q_{f'f} = \langle f' | \hat{Q} | f \rangle$$

(13.7)

3/ Bài toán trị riêng của toán tử  $\hat{Q}$  trong  $\hat{F}$  - biểu diễn:

Xét bài toán:

$$\hat{Q}|q\rangle = q|q\rangle \quad (13.8)$$

Nhân trái với  $\langle f |$  ta có:

$$\langle f | \hat{Q} | q \rangle = q \langle f | q \rangle$$

Nhưng để ý rằng, với vế trái ta có:

$$\langle f|Q|q\rangle = \sum_{f'} \langle f|Q|f'\rangle \langle f'|q\rangle = \sum_{f'} Q_{ff'} q_{f'}$$

với vế phải:

$$q\langle f|q\rangle = q\sum_{f'} \langle f|f'\rangle \langle f'|q\rangle = q\sum_{f'} \delta_{ff'} \langle f'|q\rangle = q\sum_{f'} \delta_{ff'} q_{f'}$$

Vậy ta có:

$$\sum_{f'} Q_{ff'} q_{f'} - q\sum_{f'} \delta_{ff'} q_{f'} = 0$$

hay:

$$\sum_{f'} (Q_{ff'} - q\delta_{ff'}) q_{f'} = 0 \quad (13.9)$$

Vậy ta nhận được hệ vô tận các phương trình để xác định phổ của toán tử  $\hat{Q}$ .

4/ Chuyển từ  $\hat{F}$ -biểu diễn sang G-biểu diễn:

Giả sử ta có hai biểu diễn:  $\hat{F}$ -biểu diễn và G-biểu diễn

Nghĩa là ta có:

$$\begin{aligned} \text{a/ Trong } \hat{F}\text{-biểu diễn: } \hat{F}|f\rangle &= f|f\rangle \\ |\psi\rangle &= \sum_f \psi_f |f\rangle \quad \text{với } \psi_f = \langle f|\psi\rangle \end{aligned}$$

Với toán tử  $\hat{Q}$  nào đó :

$$Q_{ff'} = \langle f'|Q|f''\rangle$$

Trong  $\hat{G}$ -biểu diễn:

$$\begin{aligned} \hat{G}|g\rangle &= g|g\rangle \\ |\psi\rangle &= \sum_g \psi_g |g\rangle \quad \text{với } \psi_g = \langle g|\psi\rangle \end{aligned}$$

Với toán tử  $\hat{Q}$ :

$$Q_{g'g''} = \langle g'| \hat{Q} |g''\rangle$$

b/ vấn đề là biểu diễn  $\psi_g$  và  $Q_{g'g''}$  qua hệ hàm riêng của toán tử  $\hat{F}$ .

Ta có:

$$\psi_g = \langle g|\psi\rangle = \sum_f \langle g|f\rangle \langle f|\psi\rangle = \sum_f g_f^* \psi_f \quad (13.10)$$



$$\begin{aligned}
Q_{g',g''} &= \langle g' | \hat{Q} | g'' \rangle = \sum_{f',f''} \langle g' | f' \rangle \langle f' | \hat{Q} | f'' \rangle \langle f'' | g'' \rangle = \\
&= \sum_{f',f''} g_{f',f''}^{*'} Q_{f',f''} g_{f',f''}'' = \sum_{f',f''} g_{f',f''}^{*'} g_{f',f''}'' Q_{f',f''}
\end{aligned} \tag{13.11}$$

Như vậy để thực hiện được phép chuyển từ  $\hat{F}$  sang  $\hat{G}$ -biểu diễn phải biết được hàm sóng

$$g_f = \langle f | g \rangle = \langle g | f \rangle^*$$

trong  $\hat{F}$ -biểu diễn tức là hàm sóng mô tả trạng thái tương ứng với vector riêng của toán tử  $\hat{G}$ .

### III/ Vài biểu diễn cụ thể:

1/ Biểu diễn tọa độ:

-Vị trí (hay tọa độ) của hạt được cho là các trị riêng x của bài

toán:  $X|x\rangle = x|x\rangle$

- Điều kiện:

$$\langle x' | x'' \rangle = \delta(x' - x'')$$

$$\int |x\rangle \langle x| dx = I$$

- Hàm trạng thái:

$$|\psi\rangle = \sum_x \psi_x |x\rangle$$

Với :

$$\psi_x = \langle x | \psi \rangle \quad \text{là hàm sóng.} \tag{13.12}$$

-Toán tử  $\hat{Q}$  bất kỳ tương ứng với ma trận:

$$Q_{x',x''} = \langle x' | \hat{Q} | x'' \rangle \tag{13.13}$$

-Toán tử  $\hat{X}$  có ma trận dạng chéo:

$$X_{x',x''} = \langle x' | \hat{X} | x'' \rangle = x'' \delta(x' - x'') = x' \delta(x' - x'') \tag{13.14}$$

-Toán tử xung lượng tương ứng với ma trận:

$$P_{x',x''} = \langle x' | \hat{P} | x'' \rangle = -i\hbar \delta'(x' - x'') \tag{13.15}$$

và nó đưa đến quy luật tác dụng lên hàm sóng là phép lấy đạo hàm:

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

(13.16)

- Hàm riêng của Toán tử tọa độ:

Xuất phát từ bài toán trị riêng:

$$\hat{X}\psi_{x_0}(x) = x_0\psi_{x_0}(x)$$

hay:

$$(x - x_0)\psi_{x_0}(x) = 0 = (x - x_0)\delta(x - x_0)$$

Do đó :

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0) \quad (13.17)$$

-Tương tự từ bài toán trị riêng:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi_p(x)}{dx} = p\psi_p(x)$$

ta có thể tìm được hàm riêng của toán tử xung lượng tương ứng với trị riêng  $p$  trong x-biểu diễn:

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{1}{\hbar} px} \quad (13.18)$$

2/ Biểu diễn xung lượng:

Một biểu diễn hay dùng là biểu diễn xung lượng. Trong đó hệ cơ sở là hệ hàm riêng  $|p\rangle$  của toán tử xung lượng  $\hat{P}$ .

Bài toán trị riêng:

$$\hat{P}|p\rangle = p|p\rangle \quad (13.19)$$

Điều kiện cho hàm riêng:

$$\langle P' | P'' \rangle = \delta(P' - P'') \quad ; \quad \int |P\rangle \langle P| dp = I \quad (13.20)$$

Trạng thái được mô tả bằng hàm sóng:

$$\psi_P = \langle P | \psi \rangle = \psi_P^+$$

Bình phương môđun của hàm này xác định mật độ xác suất hạt có xung lượng nhận giá trị  $p$ .

-Toán tử xung lượng  $\hat{P}$  có trị riêng tương ứng là  $p$ .

-Toán tử tọa độ:

$$\hat{X}_P = -i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$$

Hoàn toàn tương tự như hai biểu diễn trên, có thể xét bài toán trong biểu diễn Moment xung lượng, biểu diễn năng lượng, tùy bài toán cụ thể.

## CHƯƠNG II. MỘT SỐ BÀI TOÁN CƠ BẢN CỦA PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

### § 1 CHUYỂN ĐỘNG TỰ DO

Chuyển động tự do là bài toán mà hàm Hamilton của hạt chỉ có phần “động năng” để đơn giản trước hết ta giả sử hạt chuyển động tự do theo trục  $\overline{OX}$ . Mặc dù đơn giản nhưng bài toán này có ý nghĩa hết sức quan trọng về mặt lý thuyết vì nó là “ thử thách “ đầu tiên của những ý tưởng mới trong cơ học lượng tử.

Khi Hamilton có dạng:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} \quad \text{mà} \quad \hat{P} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

nên có phương trình :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = E\varphi(x)$$

Các nghiệm là :

$$\varphi_{1,2}(x) = Ae^{\pm\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x} = Ae^{\pm\frac{i}{\hbar}px}$$

Các nghiệm này thỏa mãn điều kiện hữu hạn và liên tục trong toàn không gian với bất kỳ các giá trị nào của  $E > 0$  hay  $E < 0$ . Như vậy phổ các giá trị riêng của năng lượng là liên tục (từ  $0 \rightarrow \infty$ ).

$$H\varphi_1(x) = E\varphi_1(x)$$

$$H\varphi_2(x) = E\varphi_2(x)$$

Với mỗi giá trị bất của năng lượng ta có hai hàm sóng , vậy E suy biến hai lần

Mặt khác  $\varphi_1(x)$  và  $\varphi_2(x)$  cũng là hàm riêng của toán tử xung lượng mà:

$$\sqrt{2mE} = mv = p$$

Nên ta cũng có hai phương trình tương ứng:

$$-i\hbar \frac{\partial\varphi_1(x)}{\partial x} = -i\hbar \frac{d}{dx} e^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} = \sqrt{2mE} \varphi_1(x) = p\varphi_1(x)$$

$$-i\hbar \frac{\partial\varphi_2(x)}{\partial x} = -i\hbar \frac{d}{dx} e^{-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} = -\sqrt{2mE} \varphi_2(x) = -p\varphi_2(x)$$

Như vậy với mỗi E tương ứng với cặp (p, -p) nghĩa là xung lượng của hạt là rất định hướng, hay nói cách khác: chuyển động tự do là chuyển động bất định hướng trong không gian.

Ta tìm điều kiện chuẩn hóa các hàm sóng.

Nếu cứ theo cách thông thường thì:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^* \varphi dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p-p)x} dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx = \infty$$

Đây là điều vô nghĩa. Vì vậy ta phải tìm cách khác. Giả thiết chuyển động của hạt xảy ra ở miền V hữu hạn nhưng rất lớn như vậy hạt phải thỏa mãn điều kiện tuần hoàn do nó bị giam trong "hố thế":

$$\varphi(x) = \varphi(x+L)$$

Khi đó:

$$A \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) = A \exp\left[\frac{i}{\hbar} p(x+L)\right] = A \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} pL\right)$$

suy ra:

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} pL\right) = 1 = \cos\left(\frac{pL}{\hbar}\right) + i \sin\left(\frac{pL}{\hbar}\right)$$

nghĩa là:

$$\begin{cases} \cos\left(\frac{pL}{\hbar}\right) = 1 \\ \sin\left(\frac{pL}{\hbar}\right) = 0 \end{cases}$$

Suy ra:

$$\frac{pL}{\hbar} = 2n\pi \rightarrow P_n = \frac{2n\pi\hbar}{L}$$

Như vậy với giả thiết thu hẹp bài toán, trị riêng p đã trở thành p<sub>n</sub> nghĩa là đã bị lượng tử hóa do đó năng lượng cũng bị lượng tử hóa:

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2} n^2$$

$$\Delta E = E_1 - E_0 = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}$$

Chuyển qua giới hạn  $L \rightarrow \infty$  khi đó:  $\Delta p$  và  $\Delta E \rightarrow 0$ , nghĩa là phổ năng lượng trở thành liên tục. Khi đó ta chuẩn hóa như sau:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^* \varphi dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(p''-p')x} dx = 2\pi\hbar |A|^2 (p'' - p') = 1$$

do đó:

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

Vậy:

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} px}$$

Trong trường hợp ba chiều, chuyển động tự do ứng với hàm sóng :

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} pr\right)$$

Vậy nghiệm tổng quát :

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(pr - Et)\right]$$

Hay sử dụng hệ thức :

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}, E = \hbar\omega$$

ta có :

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \exp\left[i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)\right]$$

Đây là biểu thức của sóng mà De Broglie đã giả thiết trước đây. Như vật từ phương trình Schrodinger ta đã tìm lại được sóng phẳng De Broglie. Điều này chứng tỏ tính đúng đắn trong các lập luận của cơ học lượng tử.

## §2 BÀI TOÁN MỘT CHIỀU

Nhận xét mở đầu:

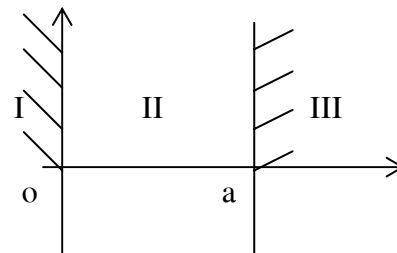
Các bài toán một chiều là những mô hình đơn giản cho phép tìm được một vài đặc điểm quan trọng sẽ gặp sau này trong các bài toán phức tạp, nghiên cứu được các nghiệm một cách kỹ lưỡng.

Nhiều bài toán phức tạp sau những phép biến đổi tương ứng sẽ dẫn đến việc giải các phương trình tương tự như phương trình Schrodinger trong bài toán một chiều.

### I/ Hạt trong hố thế ( giếng thế ) sâu vô hạn :

Thế năng có dạng:

$$u(x) = \begin{cases} \infty & \text{với } x < 0 \\ 0 & \text{với } 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{với } x > a \end{cases}$$



Phương trình Schrodinger có dạng :

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2m(E - u)}{\hbar^2} \varphi(x) = 0$$

Các điều kiện :

+/ Trong miền I và III thì  $\varphi(x) = 0$

+/ Điều kiện biên :  $\varphi(0) = \varphi(a) = 0$

Trong miền :  $0 < x < a$  phương trình có dạng :

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + k^2 \varphi(x) = 0 \quad \text{với} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Phương trình này có nghiệm :

$$\varphi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

Điều kiện :

$$\varphi(0) = 0 \quad \text{nên : } B = 0$$

vậy :

$$\varphi(x) = A \sin kx$$

Điều kiện :

$$\varphi(a) = 0$$

nên ta có :

$$\varphi(a) = A \sin ka = 0 \rightarrow \sin ka = \sin n\pi$$

$$\text{Vậy : } ka = n\pi \quad (n = 1, 2, \dots)$$

Như vậy :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 = E_n$$

Nghĩa là năng lượng đã bị lượng tử hóa. Các hàm sóng có dạng :

$$\varphi_n(x) = A \sin \frac{n\pi x}{a}$$

Hằng số  $A$  xác định từ điều kiện chuẩn hóa .

$$\int_0^a \varphi_n^2(x) dx = 1 \rightarrow \int_0^a A^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Suy ra :

Cuối cùng ta có :

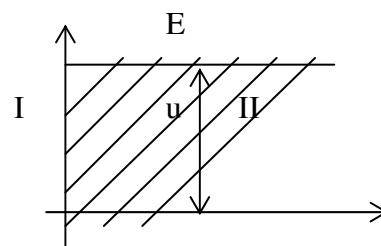
$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} ; \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$$

### III/ Thế bậc thang:

Ta xét thế năng có dạng :

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{nếu } x < 0 \\ u = \text{const} & \text{nếu } x > 0 \end{cases}$$

x



Ta tìm nghiệm tại hai miền :

Miền I :

$$\frac{d^2 \varphi_1(x)}{dx^2} + k_1^2 \varphi_1(x) = 0, \quad k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Nghiệm :

$$\varphi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

(Hàm sóng = sóng tới + sóng phản xạ).

Miền II :

$$\frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} + k_2^2 \varphi_2(x) = 0,$$

$$k_2^2 = \frac{2m(E-u)}{\hbar^2}$$

Nghiệm :

$$\varphi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$$

Hàm sóng = sóng truyền qua ( không có sóng từ phải qua trái)

Như vậy  $D = 0$  và :

$$\varphi_2(x) = Ce^{ik_2x}$$

Từ điều kiện liên tục của  $\varphi(x)$  và  $\varphi'(x)$  tại  $x = 0$  cho ta các quan hệ :

$$A + B = C \quad (\text{do } \varphi(x) \text{ liên tục})$$

$$k_1(A - B) = k_2C \quad (\text{do } \varphi'(x) \text{ liên tục})$$

Từ đây ta có :

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A; \quad C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A$$

Do đó :

$$\varphi_1(x) = A \left( e^{ik_1x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1x} \right)$$

$$\varphi_2(x) = A \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2x}$$

Ta tính vec tơ mật độ dòng ( trong miền I):

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left( \varphi_1 \frac{d\varphi_1^*}{dx} - \varphi_1^* \frac{d\varphi_1}{dx} \right) = \frac{\hbar k_1}{m} (A^* A - B^* B)$$

$$j = \frac{\hbar k_1}{m} A^* A - \frac{\hbar k_1}{m} B^* B = j_o + j_r$$

Hay : Mật độ dòng = mật độ dòng tới + mật độ dòng phản xạ. Vectơ mật độ dòng truyền qua (trong miền II)

$$j_d = \frac{i\hbar}{2m} \left( \varphi_2 \frac{d\varphi_2^*}{dx} - \varphi_2^* \frac{d\varphi_2}{dx} \right) = \frac{\hbar k_2}{m} CC^*$$

Ta xét trường hợp  $E > U$ :

Từ kết quả trên ta tính được:

$$R = \frac{j_r}{j_o} = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 = \left| \frac{1 - \sqrt{(E-u)/E}}{1 + \sqrt{(E-u)/E}} \right|^2 \equiv \text{Hệ số phản xạ}$$

$$D = \frac{j_d}{j_o} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Ta tính tổng:

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

Điều này có nghĩa là : Cường độ dòng phản xạ và truyền qua bằng cường độ dòng tới .

$$R = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2 = 1$$

Ta xét khi  $E < U$  . Khi đó

Hơn nữa ta nhận thấy : D là ảo nhưng  $k_2 = ik$  cũng là ảo .

Như vậy :

$$\begin{aligned} \omega_2(x) = \varphi_2^* \varphi_2 &= \left| \frac{2k_1}{k_1 + ik} A e^{-kx} \right|^2 \\ &= \frac{4k_1^2}{k_1 + k_2} \exp \left[ -\frac{2x}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)} \right] = \omega_2(o) e^{-\frac{2x}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)}} \end{aligned}$$

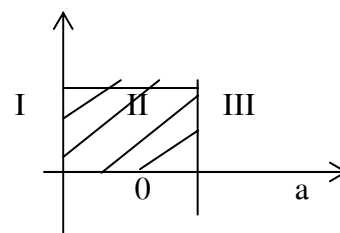
Điều này cho thấy xác suất khác không nhưng giảm theo qui luật hàm mũ, giảm càng nhanh nếu  $(U - E)$  và khối lượng hạt càng lớn .

**III/ Sự truyền qua hàng rào thế có bề rộng hữu hạn:**

Giả sử  $U(x)$  có dạng như hình vẽ :

Khi đó nếu viết phương trình cho các miền I, II và III ta có thể tìm được nghiệm dưới dạng sóng phẳng. Từ điều kiện về tính liên tục ta tìm được các hệ thức giữa các hệ số.

E



x



a/ Nếu  $E > U$  ta sẽ thấy có sự phản xạ (do hàm sóng có hai phần). Lưu ý rằng trong vật lý cổ điển hạt đi qua một cách tự do.

b/ Nếu  $E < U$ , xác suất đi qua hàng rào là khác không.

Xác suất tỷ đối:

$$W_{a,o} = \exp\left\{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}\right\} = \frac{\omega_2(a)}{\omega_2(o)}$$

Đây là biểu thức gần đúng cho ta xác suất để hạt có năng lượng toàn phần  $E$  xuyên qua hàng rào có độ cao  $U$  và độ rộng  $a$ .

Hệ số trong suốt của hàng rào (còn gọi là độ xuyên qua của hàng rào thế) được cho bằng lượng :

$$D = \frac{j_d}{j_o} = \frac{4k_1^2}{k_1^2 + k^2} \exp\left\{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}\right\} = D_o \exp\left\{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}\right\}$$

( $D_o \approx 1$ )

Nếu hàng rào có dạng tùy ý (ở trên là hàng rào dạng chữ nhật) thì độ trong suốt của hàng rào là :

$$D \approx D_o \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x)-E]} dx\right\}$$

Sự chuyển từ miền I qua miền III xảy ra qua miền II là miền mà tại đó năng lượng toàn phần nhỏ hơn thế năng điều này có thể xem như hạt “chui qua đường ngầm”, hiệu ứng này thường được gọi là hiệu ứng đường ngầm.

Cơ học lượng tử giải thích như sau:

- Khi giải phương trình Schrodinger, ta thấy xác suất tồn tại hạt bên ngoài bức tường tuy nhỏ như vẫn khác không, như vậy hạt tồn tại phía sau tường là hợp lý.

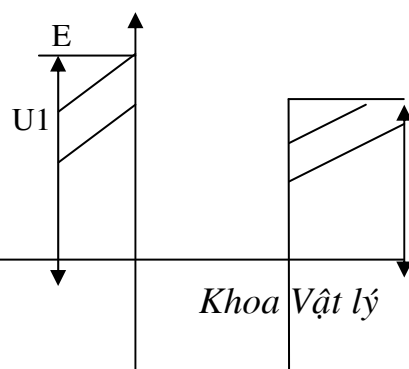
- Hệ thức bất định : nếu  $\Delta x > a$  thì có khả năng hạt ở trong và ngoài bức tường. Với  $\Delta x$  đủ lớn đến mức  $\Delta v$  đủ lớn sao cho  $\Delta E = m(\Delta v)^2$  có thể làm cho hạt vượt tường.

- Khi sóng ánh sáng đến mặt phân cách giữa hai môi trường thì có hiện tượng phản xạ và khúc xạ. Như vậy với sóng De Broglie cũng tương tự. Sự tương đương này càng chứng tỏ bản chất sóng của hạt vi mô.

**IV/ Hố thế năng có các thành cao hữu hạn**

Xét dạng hố thế như hình vẽ

$$\left\{ \begin{array}{l} U_1 \quad \text{khi } x < 0 \end{array} \right.$$



III U2  $U(x) = 0$  khi  $0 \leq x \leq a$   
 $U_2$  khi  $x > a$

Ta xét bài toán trong ba miền :

Miền I :

$\varphi_3$  b/

Phương trình :

$$\frac{d^2 \varphi_1}{dx^2} - k_1^2 \varphi_1 = 0, \quad k_1^2 = \frac{2m(u_1 - E)}{\hbar^2}$$

Nghiệm :

$$\varphi_1 = A_1 \exp(k_1 x) + B_1 \exp(-k_1 x)$$

Miền II :

Phương trình :

$$\frac{d^2 \varphi_2}{dx^2} - k_2^2 \varphi_2 = 0, \quad k_2^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Nghiệm :

$$\varphi_2 = A_2 \exp(ik_2 x) + B_2 \exp(-ik_2 x)$$

Miền III :

Phương trình :

$$\frac{d^2 \varphi_3}{dx^2} - k_3^2 \varphi_3 = 0, \quad k_3^2 = \frac{2m(u_2 - E)}{\hbar^2}$$

Nghiệm :

$$\varphi_3 = A_3 \exp(k_3 x) + B_3 \exp(-k_3 x)$$

Các điều kiện biên dẫn tới kết quả :  $B_1 = A_3 = 0$ .

Vậy cuối cùng ta có :

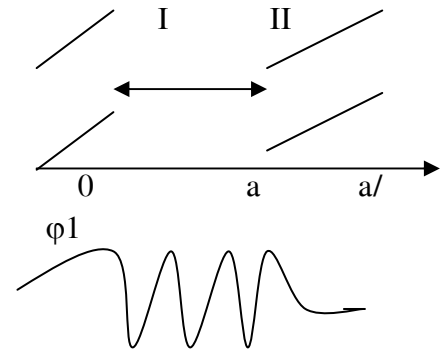
$$\varphi_1(x) = A_1 \exp(k_1 x)$$

$$\varphi_2(x) = A_2 \exp(ik_2 x) + B_2 \exp(-ik_2 x)$$

$$\varphi_3(x) = B_3 \exp(-k_3 x)$$

Dạng định lượng của  $\varphi_1(x)$ ,  $\text{Re}\{\psi_2(x)\}$  và cho trên đồ thị b/ của hình vẽ. Như vậy ta thấy bên ngoài độ rộng của giếng thế năng xác suất tìm thấy hạt vẫn khác không và xác suất này giảm nhanh khi đi sâu vào thành giếng.

Để xác định các hệ số  $A_1, A_2, B_2, B_3$  ta sử dụng điều kiện liên tục của ba hàm và đạo hàm của chúng tại các điểm biên. Khi đó ta có :



$$\begin{cases} \varphi_1(0) = \varphi_2(0) \\ \varphi_2(a) = \varphi_3(a) \\ \varphi_1'(0) = \varphi_2'(0) \\ \varphi_2'(a) = \varphi_3'(a) \end{cases}$$

hay

$$\begin{cases} A_1 = A_2 + B_2 \\ A_2 \exp(ik_2 a) + B_2 \exp(-ik_2 a) = B_3 \exp(-k_3 a) \\ k_1 A_1 = ik_2 (A_2 - B_2) \\ ik_2 A_2 \exp(ik_2 a) - ik_2 B_2 \exp(-ik_2 a) = -k_3 B_3 \exp(-k_3 a) \end{cases}$$

Để hệ phương trình có nghiệm định thức của hệ phải bằng không. Tuy nhiên phương trình đó khá phức tạp. Để đơn giản ta viết lại  $\varphi_2(x)$  dưới dạng gọn hơn tương đương:

$$\varphi_2(x) = C \sin(k_2 x + b)$$

Khi đó hệ phương trình trên trở thành:

$$\begin{cases} A_1 = C \sin b \\ C \sin(k_2 a + b) = B_3 \exp(-k_3 a) \\ k_1 A_1 = k_2 C \cos b \\ k_2 C \cos(k_2 a + b) = -k_3 B_3 \exp(-k_3 a) \end{cases}$$

Chia phương trình thứ ba cho phương trình đầu và phương trình thứ tư cho phương trình thứ hai ta được:

$$\begin{cases} k_1 = k_2 \cot gb. \\ k_3 = -k_2 \cot g(k_2 a + b). \end{cases}$$

Từ phương trình đầu của hệ này ta có:

$$\cot gb = \frac{k_1}{k_2} \quad \text{hay} \quad \sin b = (1 + \cot^2 gb)^{-1/2} = \frac{k_2 \hbar}{\sqrt{2mU_1}}$$

Tương tự ta có:

$$\sin(k_2 a + b) = -\frac{k_2 \hbar}{\sqrt{2mU_2}}$$

Từ hai kết quả đó ta tìm được phương trình xác định các giá trị của k (và tương ứng là các mức năng lượng) dưới dạng ẩn:

$$k_2 a = n\pi - \arcsin \frac{k_2 \hbar}{\sqrt{2mU_1}} - \arcsin \frac{k_2 \hbar}{\sqrt{2mU_2}}$$

Trong đó n là các số nguyên  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Giải phương trình này bằng phương pháp đồ thị ta có các nghiệm là các giá trị năng lượng. Cụ thể ta đặt:  $k_2^1 \approx \pi a$

Vậy :

$$E_1 \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

Kết quả này trùng với kết quả khi áp dụng hệ thức bất định

### §3 DAO ĐỘNG TỬ ĐIỀU HÒA

Nhận xét mở đầu :

+/ Trong vật lý cổ điển :

$$\vec{F} = -k\vec{x}.$$

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$$

Vật sẽ dao động theo quy luật điều hòa :

+/ trong lý thuyết Bohr (bán lượng tử)

Các mức năng lượng được suy ra từ quy tắc lượng tử :

$$\oint P_x dx = 2n\pi\hbar$$

Kết quả: Năng lượng là gián đoạn :  $E_n = n \cdot \hbar\omega$  và bức xạ chỉ có thể xảy ra khi dao động tử chuyển mức năng lượng .

Trong cơ học lượng tử bài toán dao động tử điều hòa là bài toán với “thế năng” :

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + U(x)$$

Thay vào biểu thức của ta có :

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

Phương trình Sch có dạng :

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \varphi(x) = 0$$

Đưa vào biến mới :

$$\xi = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

Phương trình trở thành :

$$\varphi''(\xi) + (\lambda - \xi^2)\varphi(\xi) = 0$$

Phương trình này có cùng dạng với phương trình cho đa thức Hecmit-gauss :

$$y'' + (2n + 1 - x^2)y = 0$$

Trong đó  $n = 0, 1, 2, \dots$  và các nghiệm của nó là các đa thức

Hecmit-Gauss :

$$y_n(x) \equiv h_n(x)$$

với :

$$h_n(x) = (2^n n! \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}$$

Và điều kiện trực chuẩn tương ứng cho  $h_n(x)$  là :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} h_{n_1}(x) h_{n_2}(x) dx = \delta_{n_1 n_2}$$

Như vậy có nghĩa là ta có :  $\lambda = 2n + 1$ , do đó :

$$E = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

và nghiệm  $\varphi(\xi)$  có dạng :

$$\varphi(\xi) = A h_n(\xi)$$

Thừa số A được xác định từ điều kiện chuẩn hóa :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^2(x) dx = 1$$

hay là:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^2(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^2(x) \frac{dx}{d\xi} d\xi \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^2(\xi) d\xi = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} h_n^2(\xi) \xi \end{aligned}$$

sử dụng điều kiện trực chuẩn của các đa thức  $h_n(\xi)$

ta có kết quả :

$$A^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = 1 \quad \text{do đó :} \quad A = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

Như vậy cuối cùng ta có nghiệm :

$$\begin{aligned}\varphi_n &= 4\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot h_n(\xi) \\ &= 4\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)\end{aligned}$$

Trở về biến  $x$  ta có một vài nghiệm đầu tiên :

$$\varphi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0 \sqrt{\pi}}} \exp(-x^2/2x_0^2)$$

$$\varphi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0 \sqrt{\pi}}} \exp(-x^2/2x_0^2) \frac{2x}{x_0}$$

$$\varphi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{8x_0 \sqrt{\pi}}} \exp(-x^2/2x_0^2) \left( \frac{4x^2}{x_0^2} - 2 \right)$$

trong các công thức này :

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

## §4 CHUYỂN ĐỘNG TRONG TRƯỜNG XUYÊN TÂM. NGUYÊN TỬ HYDRO

### 1/ Momen góc : (Momen động lượng).

1/ Momen góc. Các hệ thức giao hoán .

Từ hệ thức :  $\hat{M} = [\hat{r} \times \hat{p}]$  ta có các thành phần :

$$\hat{M}_x = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$\hat{M}_y = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$\hat{M}_z = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

(4.1)

Toán tử bình phương được định nghĩa bằng hệ thức :

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2 \quad (4.2)$$

Các hệ thức trên (trong hệ tọa độ Descartes) có thể có dạng thuận tiện hơn trong hệ tọa độ cầu cho các tính toán cho các bài toán xuyên tâm. Hai hệ tọa độ này có liên hệ:

$$\begin{aligned}x &= r \sin \theta \cos \varphi \\y &= r \sin \theta \sin \varphi \\z &= r \cos \theta\end{aligned}\quad (4.3)$$

Như vậy :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} &= \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \varphi} \\&= -\frac{\partial \psi}{\partial x} r \sin \theta \sin \varphi + \frac{\partial \psi}{\partial y} r \sin \theta \cos \varphi \\&= \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi\end{aligned}$$

$$\hat{M}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Theo (4.1) ta có :

Tính tương tự ta có :

$$\begin{aligned}\hat{M}_x &= -i\hbar \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{M}_y &= -i\hbar \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)\end{aligned}$$

Thay các kết quả này vào (4.2) ta có :

$$\hat{M}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \quad (4.4)$$

Với các thành phần Momen ta có thể chứng minh:

$$\begin{aligned}\left[ \hat{M}_i, \hat{r}_j \right] &= i\hbar \sum_k e_{ijk} \hat{r}_k \\ \left[ \hat{M}_i, \hat{P}_j \right] &= i\hbar \sum_k e_{ijk} \hat{P}_k \\ \left[ \hat{M}_i, \hat{M}_j \right] &= i\hbar \sum_k e_{ijk} \hat{M}_k\end{aligned}\quad (4.5)$$

trong đó  $e_{ijk}$  là tenxơ đơn vị hoàn toàn phản xứng hạng 3.  
 $e_{123} = e_{231} = e_{312} = 1$ ,  $e_{132} = e_{321} = e_{213} = -1$  còn lại 21 thành phần bằng không .

2/ Hàm riêng và trị riêng của  $\hat{M}_z$  và  $\hat{M}^2$

Từ phương trình :

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = \hat{M}_z \psi \quad (4.6)$$

$$\psi(\varphi) = A \exp\left(\frac{iM_z \varphi}{\hbar}\right)$$

Nghiệm có dạng :

(4.7)

Hàm  $\Psi(\varphi)$  là tuần hoàn :  $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$  nên:

$$M_z = \hbar m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.8)$$

Như vậy hình chiếu momen bị lượng tử hóa.

Hằng số A được xác định từ điều kiện :

$$\int_0^{2\pi} \psi_m^* \psi_m d\varphi = 1 \quad \text{do đó :} \quad A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Như vậy :

$$\Psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (4.9)$$

Ta tìm hàm riêng và trị riêng của  $\hat{M}^2$ . Từ kết quả :

$$\hat{M}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right]$$

ta có phương trình trị riêng :

$$\hat{M}^2 \psi = M^2 \psi$$

trở thành :

$$-\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} \right) \right] = M^2 \psi$$

(4.10)

Phương trình này được gọi là phương trình cho các hàm cầu . Nó chỉ có nghiệm khi :

$$M^2 = \hbar^2 \ell(\ell + 1) \quad \ell = 0, 1, 2, \dots \quad (4.11)$$

và khi đó nghiệm có dạng :



$$\psi_{\ell m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(\ell - |m|)!(2\ell + 1)}{4\pi(\ell + |m|)!}} P_{\ell}^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

(4.12)

trong đó

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$$

Có thể chứng minh rằng :

$$[\hat{M}^2, \hat{M}_i] = 0$$

điều này có nghĩa là hai toán tử  $\hat{M}^2$  và  $\hat{M}_i$  có chung một hệ hàm riêng là các hàm cầu (4.10).

Trong toán học –phần các hàm đặt biệt –người ta chứng minh rằng các đa thức Legendre liên kết có dạng :

$$P_{\ell}^m(x) = (1-x^2)^{\frac{1}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_{\ell}(x)$$

trong đó  $P_{\ell}(x)$  là các đa thức Legendre có dạng :

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

Với các hàm cầu, có thể chứng minh là chúng thỏa mãn hệ thức trực giao :

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \psi_{\ell m}^*(\theta, \varphi) \psi_{\ell' m'}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{\ell \ell'} \delta_{m m'} \quad (4.13)$$

### III/ Hạt trong trường đối xứng cầu (chuyển động xuyên tâm)

Ta xét bài toán trong hệ tọa độ cầu. Trong hệ đó toán tử  $\Delta$  có dạng :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi} \quad (4.14)$$

trong đó:

$$\Delta_{\theta, \varphi} = \left[ \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \quad (4.15)$$

Như vậy phương trình Sch có dạng :

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi} \psi + \frac{2m[E - U(r)]}{\hbar^2} \psi = 0$$

(4.16)

Dùng phương pháp tách biến. Đặt :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\phi(\theta, \varphi)$$

(4.17)

Thay vào (4.15) ta có :

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + r^2 \frac{2m[E - U(r)]}{\hbar^2} R(r) = - \frac{\Delta_{\theta, \varphi} \phi}{\phi(\theta, \varphi)} = \lambda$$

(4.18)

Vậy ta có :

$$-\Delta_{\theta, \varphi} \phi(\theta, \varphi) = \lambda \phi(\theta, \varphi)$$

So sánh với phương trình (4.10) và (4.11) ta có :

$$\lambda = \ell(\ell + 1) \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

$$\begin{aligned} \phi(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{(2\ell + 1) \cdot (\ell - |m|)!}{4\pi (\ell + |m|)!}} P_{\ell}^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi} \\ &\equiv Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm \ell \end{aligned} \quad (4.19)$$

Các hàm  $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$  được gọi là các hàm điều hòa cầu. Ta có một số hàm cấp thấp là:

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_{1, \pm 1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left( \frac{2}{3} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$$

$$Y_{2, \pm 1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$$

$$Y_{2, \pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$$

Cần nhấn mạnh là phần góc của hàm sóng không phụ thuộc vào dạng cụ thể của thế năng  $U(r)$ . Đây là hệ quả trực tiếp và quan trọng của thế đối xứng cầu.

Bây giờ ta xét tiếp phần xuyên tâm của hàm sóng, tức là hàm  $R(r)$ . Từ (4.18) và chú ý :

$$\lambda = \ell(\ell + 1)$$

ta có:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U_\ell(r)] R(r) = 0 \quad (4.20)$$

trong đó :

(4.21)

Phương trình (4.20) có thể đưa về phương trình Sch một chiều với điều kiện biên đặt biệt tại  $r=0$ .

cụ thể là ta đặt :

$$\varphi(r) = rR(r)$$

với điều kiện :  $\varphi(0) = 0$  (do tính hữu hạn của  $R(r)$ )

Thay hàm  $\varphi(r)$  trong (4.22) vào (4.20) ta có phương trình Sch một chiều :

$$\frac{d^2 \varphi}{dr^2} + \frac{2m[E - u_\ell(r)]}{\hbar^2} \varphi(r) = 0$$

(4.23)

Điều kiện biên  $\varphi(0) = 0$  tương ứng với giếng thế có bức tường trái cao vô tận (tại  $r=0$ ).

Sự nghiên cứu sâu hơn phương trình (4.23) đòi hỏi dạng cụ thể của hàm  $U(r)$ .

### III/ Nguyên tử Hydrogen :

Bài toán nguyên tử Hydrogen là bài toán điển hình của lớp bài toán quan trọng chuyển động của electron trong trường Coulomb đối xứng cầu. Trong nguyên tử Hydrogen, Hamiltonian có dạng :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r}$$

(4.24)

Dùng phương pháp tách biến như trường hợp trường xuyên tâm ta có thể tìm được các trị riêng của toán tử Hamilton có dạng :

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.25)$$

Các hàm riêng có dạng :

$$\psi_{nlm} = R_{nl} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (4.26)$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, (n-1),$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$$

Trong đó :  $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$  là các hàm cầu, dạng của hàm cầu này không thuộc vào dạng cụ thể của thế đối xứng cầu. Còn các hàm xuyên tâm  $R_{n\ell}(r)$  được xác định bởi phương trình :

$$\frac{d^2 \varphi}{dr^2} + \frac{2m[E - u_{\ell}(r)]}{\hbar^2} \varphi(r) = 0$$

với thế  $U(r) = -\frac{e^2}{r}$  là thế Coulomb của hạt nhân nguyên tử Hydrogen.

Dạng của  $R_{n\ell}(r)$  được cho bởi :

$$R_{n\ell}(r) = -\frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{[(n+1)!]^3}} e^{-\frac{r}{n}} \cdot \left(\frac{2r}{n}\right)^{\ell} \cdot L_{n+1}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{n}\right)$$

(4.27)

trong đó :  $L_{n+1}^{2\ell+1}(x)$  là đa thức Laguerre tổng quát.

Những hàm laguerre này thỏa mãn điều kiện chuẩn hóa :

$$\int_0^{\infty} R_{n\ell}^2(r) r^2 dr = 1$$

Ta có thể viết một số hàm xuyên tâm đầu tiên :

$$R_{10} = 2r_1^{-\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r}{r_1}\right)$$

$$R_{20} = (2r_1^3)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{r}{2r_1}\right) \left(1 - \frac{r}{2r_1}\right)$$

(4.28)

$$R_{21} = (2\sqrt{6r_1^3})^{-1} \exp\left(-\frac{r}{2r_1}\right) \frac{r}{r_1}$$

Như vậy ta dễ dàng viết được một số hàm riêng của toán tử Hamilton (4.24) là :

$$\begin{aligned}
\psi_{100} &= (\pi r_1^3)^{-1/2} \exp\left(-\frac{r}{r_1}\right) \\
\psi_{200} &= (8\pi r_1^3)^{-1/2} \exp\left(-\frac{r}{2r_1}\right) \left(1 - \frac{r}{2r_1}\right) \\
\psi_{211} &= (8\sqrt{\pi} r_1^3)^{-1} \exp\left(-\frac{r}{2r_1}\right) \sin\theta e^{i\varphi} \left(\frac{r}{r_1}\right) \\
\psi_{210} &= (4\sqrt{2\pi} r_1^3)^{-1} \exp\left(-\frac{r}{2r_1}\right) \cos\theta \left(\frac{r}{r_1}\right)
\end{aligned} \tag{4.29}$$

Sự phân lập (hay suy biến) của các mức năng lượng:

Để ý rằng các mức năng lượng của một electron trong nguyên tử Hydrogen chỉ phụ thuộc vào  $n$  :

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} \quad n = 1, 2, \dots$$

trong khi đó các hàm sóng – tức là các trạng thái lại được xác định bởi ba số lượng tử :  $n$ ,  $l$  và  $m$ . Ngoài ra khi xác định các trạng thái của electron là còn phải kể đến một số lượng tử khác nữa là  $\sigma$  không có mặt trong các biểu thức ở đây. Vì ứng với mỗi  $n$  số lượng tử  $l$  nhận các giá trị từ 0 đến  $(n-1)$ , và với mỗi  $l$  số lượng tử  $m$  nhận  $(2l+1)$  giá trị nên số trạng thái ứng với mỗi mức Năng lượng  $E_n$  là :

$$g_n = 2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2$$

(4.30)

(thừa số 2 là hai trạng thái của Spin).

Điều này có nghĩa là các trị riêng  $E_n$  suy biến bậc  $2n^2$ . Sự phân lập (hay suy biến) của các mức năng lượng là một quy luật liên quan đến tính đối xứng trong hệ nguyên tử. Ví dụ : Đối xứng cầu của các trường trong nguyên tử gây ra sự suy biến của hai số lượng tử  $m$  và  $\sigma$  - năng lượng không phụ thuộc vào sự định hướng của momen quỹ đạo và momen spin của electron.

Sự suy biến của số lượng tử  $l$  liên quan đến bản chất đặc trưng của trường Coulomb. Trong các trường khác (không Coulomb) năng lượng của electron phụ thuộc cả vào  $n$  và  $l$ .

### CHƯƠNG III. LÝ THUYẾT SPIN CỦA PAULI

Spin là momen cơ (mômen xung lượng) riêng của hạt và là một tính chất cơ bản của hạt giống như khối lượng của nó. Quan niệm rằng Spin là momen cơ do sự quay của hạt quanh trục riêng của nó tuy rất thuận lợi nhưng là một mô hình sai. Song mẫu như vậy cho phép liên tưởng đến hầu hết các tính chất của con quay cơ học lượng tử và đặc biệt là để hiểu tại sao (mặc dù ở mức độ đại khái) ở các hạt tích điện với Spin cũng có mômen từ nội tại. Sự nghiên cứu cơ học lượng tử tính chất Spin của hạt cơ bản cho các kết luận sau đây (Spin là một đại lượng vector (giả vector)).

- Độ lớn của mômen cơ Spin của hạt là số lượng tử Spin  $S$ , mà nó có thể nhận các giá trị dương nguyên hay bán nguyên và đặc trưng trạng thái hạt đã cho một cách đơn trị. Bình phương vector Spin  $\vec{S}^2$ .

$$S^2 = S(S+1)\hbar^2 \quad \text{đối với } e^- : S^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$$

- Sự định hướng của mômen cơ Spin bị lượng tử hóa (bị giới hạn bởi những góc xác định) giống hệt như tất cả các mômen cơ khác. Sự định hướng này được

xác định bởi giá trị của số lượng tử Spin từ mS ; độ lớn mS cho ta giá trị của hình chiếu Spin trên một trục tùy ý trong không gian (thường trục này được chọn theo trục Z ).

$$\text{đối với } e^- : S_Z = \pm \frac{1}{2} \hbar$$

- Spin là bậc tự do nội tại của hạt và luôn luôn bằng const đối với mỗi hạt .

Dựa vào Spin người ta chia các hạt cơ bản thành hai loại : các hạt có Spin nguyên gọi là các bôzôn , các hạt có Spin bán nguyên gọi là các fermiôn

## §1 SPIN CỦA ELECTRON

$$\text{Mômen Spin của electron} = \frac{\hbar}{2}$$

### 1/ Các toán tử spin :

a/ Hàm sóng của hạt cùng với Spin không chỉ phụ thuộc vào ba thành phần không gian của nó , mà còn phụ thuộc vào tọa độ thứ tự đặc trưng cho trạng thái nội tại của hạt . Tọa độ thứ tự người ta thường chọn độ lớn của hình chiếu Spin trên trục Z . Lúc đó hàm sóng có thể viết :

$$\psi = \psi(\vec{r}, S_Z, t)$$

Khác với các tọa độ không gian  $\vec{r}$  tọa độ spin “ SZ chỉ nhận các giá trị rời

rạc . đối với electron  $S_Z = \pm \frac{\hbar}{2}$  . Do đó ta có thể viết hàm sóng của electron .

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi(\vec{r}, \frac{\hbar}{2}, t) \\ \Psi(\vec{r}, -\frac{\hbar}{2}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \quad (1)$$

Ở đây  $|\Psi_i|^2 dV$  giải thích như xác suất để tại thời điểm t electron ở trong yếu tố thể tích dV và có hình chiếu Spin trên trục Z bằng  $\frac{\hbar}{2}$  nếu i = 1 và bằng  $-\frac{\hbar}{2}$  nếu i = 2 . Hàm sóng  $\Psi(\vec{r}, s_Z, t)$  được chuẩn hóa .

$$\begin{aligned} \sum_{s_Z = -\hbar/2}^{\hbar/2} \int |\Psi(\vec{r}, s_Z, t)|^2 dV = \\ = \int \left| \Psi(\vec{r}, \frac{\hbar}{2}, t) \right|^2 dV + \int \left| \Psi(\vec{r}, -\frac{\hbar}{2}, t) \right|^2 dV = 1 \end{aligned} \quad (2)$$

Nếu bây giờ ta bỏ qua sự tương tác momen Spin từ của electron với từ trường của các dòng do chuyển động khối tâm của electron tạo nên thì ( bỏ qua sự tương tác giữa Spin và chuyển động quỹ đạo ) hàm sóng .

$$\Psi(\vec{r}, S_Z, t) = \Psi(\vec{r}, t) \varphi(S_Z);$$

$$\varphi(S_Z) = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

(3)

Trong đó  $\Psi$  hàm sóng tọa độ thông thường ,  $\varphi$  là hàm sóng Spin .

Cho ta xác suất để hình chiếu Spin  $S_Z$  bằng  $\frac{\hbar}{2}$  nếu  $i = 1$  và bằng  $-\frac{\hbar}{2}$  nếu  $i = 2$  . Điều kiện chuẩn hóa hàm sóng suy ra

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$$

b. Sau khi xác định khái niệm hàm sóng Spin chúng ta cần định nghĩa các toán tử Spin tác dụng lên nó . Nói chung sự tác dụng của toán tử lên hàm Spin

$\varphi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$  dẫn đến việc thay các thành phần  $c_1, c_2$  thành các tổ hợp tuyến tính của nó.

$$\varphi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{tác dụng của toán tử Spin}} \varphi' = \begin{pmatrix} a_{11}c_1 + a_{12}c_2 \\ a_{21}c_1 + a_{22}c_2 \end{pmatrix} \quad (4)$$

Phù hợp với điều này toán tử Spin có thể biểu diễn dưới dạng ma trận tổng quát :

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad (5)$$

Ta hãy tìm dạng của ba toán tử  $\hat{\sigma}_X, \hat{\sigma}_Y, \hat{\sigma}_Z$  tương ứng với các đại lượng vật lý mới , Các hình chiếu của Spin lên các trục tọa độ . Ta hãy chuẩn hóa các hàm riêng của các toán tử này thế nào để các trị riêng của chúng bằng  $\pm 1$ . Từ đây suy ra điều kiện :

$$\hat{\sigma}_X^2 = \hat{\sigma}_Y^2 = \hat{\sigma}_Z^2 = 1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6)$$

$$(\alpha \hat{\sigma}_X + \beta \hat{\sigma}_Y + \gamma \hat{\sigma}_Z)^2 = 1$$

(7)



Trong đó  $\alpha, \beta, \gamma$  là các cosin chỉ phương của vector Spin. Từ (7) suy ra các qui tắc phản giao hoán cho các thành phần toán tử Spin :

$$\{\hat{\sigma}_X, \hat{\sigma}_Y\} = 0 \quad ; \quad \{\hat{\sigma}_X, \hat{\sigma}_Z\} = 0 \quad ; \quad \{\hat{\sigma}_Y, \hat{\sigma}_Z\} = 0 \quad (8)$$

Ta hãy chọn hệ cơ sở mà trong đó ma trận của toán tử  $\hat{\sigma}_Z$  có dạng chéo .

$$\hat{\sigma}_Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (9)$$

Dạng tổng quát của ma trận toán tử  $\hat{\sigma}_Z$  suy ra từ điều kiện ecmitic của nó :

$$\hat{\sigma}_X = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad ; \quad \hat{\sigma}_X = \hat{\sigma}_X^+ = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12}^* & a_{22} \end{pmatrix} \quad (10)$$

Từ điều kiện  $\{\hat{\sigma}_X, \hat{\sigma}_Z\} = \hat{\sigma}_X \hat{\sigma}_Z + \hat{\sigma}_Z \hat{\sigma}_X = 0$  suy ra .

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12}^* & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12}^* & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2a_{11} & 0 \\ 0 & -2a_{22} \end{pmatrix} = 0$$

Từ đây ta có :  $a_{11} = a_{22} = 0$   
vậy .

$$\hat{\sigma}_X = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{12}^* & 0 \end{pmatrix} \quad (11)$$

Mặt khác :  $\hat{\sigma}_X^2 = 1$

$$\hat{\sigma}_X^2 = \begin{pmatrix} |a_{12}|^2 & 0 \\ 0 & |a_{12}|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow |a_{12}|^2 = 1$$

Vậy ma trận của toán tử  $\hat{\sigma}_X$  cần có dạng :

$$\hat{\sigma}_X = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix}$$

Ta hãy chọn pha của vectơ cơ sở thế nào để có  $\alpha = 0$ . Lúc đó :

$$\hat{\sigma}_X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Lý luận tương tự ta có thể tìm được  $\hat{\sigma}_Y$ . Vậy ta có ba ma trận :

$$\hat{\sigma}_X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \hat{\sigma}_Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} ; \quad \hat{\sigma}_Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (12)$$

Các ma trận này thường được gọi là các ma trận Pauli .

## 2. Các tính chất của các toán tử Pauli

Từ (12) ta suy ra :

$$\hat{\sigma}_X^2 = \hat{\sigma}_Y^2 = \hat{\sigma}_Z^2 = 1$$

$$\hat{\sigma}^2 = \hat{\sigma}_X^2 + \hat{\sigma}_Y^2 + \hat{\sigma}_Z^2 = 3$$

$$\{\hat{\sigma}_X, \hat{\sigma}_Y\} = \{\hat{\sigma}_X, \hat{\sigma}_Z\} = \{\hat{\sigma}_Y, \hat{\sigma}_Z\} = 0$$

$$\hat{\sigma}_X \hat{\sigma}_Y = i \hat{\sigma}_Z ; \quad \hat{\sigma}_Y \hat{\sigma}_Z = i \hat{\sigma}_X ; \quad \hat{\sigma}_Z \hat{\sigma}_X = i \hat{\sigma}_Y$$

$$[\hat{\sigma}_X, \hat{\sigma}_Y] = 2i \hat{\sigma}_Z ;$$

$$[\hat{\sigma}_Y, \hat{\sigma}_X] = 2i \hat{\sigma}_X ;$$

$$[\hat{\sigma}_Z, \hat{\sigma}_X] = 2i \hat{\sigma}_Y$$

hoặc dưới dạng tổng quát :

$$[\hat{\sigma} \times \hat{\sigma}] = 2i \hat{\sigma} \quad (13)$$

Để thuận tiện tất cả các tính chất này có thể diễn tả dưới dạng một công thức dễ nhớ .

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = i \varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k + \delta_{ij}$$

Trong đó  $\varepsilon_{ijk}$  là ký hiệu Levy – Civita

## 3. Vectơ Spin

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}$$

Ta hãy xét vecto

(15)

$$\left[ \hat{S}_x, \hat{S}_y \right] = i\hbar \hat{S}_z$$

Từ (13) suy ra

(16)

Hệ thức này giống hệt các hệ thức cho momen xung lượng, do đó đại lượng vecto

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}$$

có thể xem là momen xung lượng riêng của electron. rõ ràng là các trị riêng

$$\hat{S}_x = \hat{S}_y = \hat{S}_z = \pm \frac{1}{2} \hbar$$

Ngoài ra

$$\begin{aligned} \vec{S}^2 &= S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \vec{\sigma}^2 \\ &= \frac{3}{4} \hbar^2 = \hbar^2 \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) \end{aligned}$$

(17)

Rõ ràng biểu thức (17) giống biểu thức của  $\hat{L}^2$ .

$$\text{Kết luận : Momen Spin của electron} = \frac{\hbar}{2}$$

( $\hbar = c = 1$  thì Spin =  $\frac{1}{2}$ )

Từ hiệu ứng thực nghiệm Zeemann suy ra rằng Spin phải tương ứng với momen từ

$$\vec{\mu} = \mu_0 \vec{\sigma}, \quad \mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc}$$

là manhe tôn Bohr

Chú ý tới các hệ thức

$$\frac{\text{Momen từ}}{\text{Momen xung lượng}} = \begin{cases} \mu_0 & \text{đối với momen quỹ đạo} \\ \frac{\mu_0}{\hbar} & \text{đối với Spin} \end{cases}$$

Bổ xung : Các trị riêng của toán tử  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$  đều bằng  $\pm \frac{\hbar}{2}$ . Xét bài toán trị riêng của toán tử  $\hat{S}_x$ :

$$\hat{S}_X \varphi = S_X \varphi = \left\{ S_X = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ; \varphi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \right\}$$

từ đây ta có đẳng thức

$$\begin{cases} \frac{\hbar}{2} c_2 = S_X c_1 \\ \frac{\hbar}{2} c_1 = S_X c_2 \end{cases}$$

$$\frac{\hbar^2}{4} c_1 c_2 = S_X^2 c_1 c_2 \Rightarrow S_X^2 = \frac{\hbar^2}{4}$$

$$S_X = \pm \frac{\hbar}{2}$$

Trị riêng của toán tử hình chiếu Spin như chúng ta chờ đợi là bằng  $\pm \frac{\hbar}{2}$ . Khi  $S_X = +\frac{\hbar}{2}$  thì ta có :

$$\frac{\hbar}{2} c_2 = S_X c_1 = \left( S_X = \pm \frac{\hbar}{2} \right) = \frac{\hbar}{2} c_1 \Rightarrow c_2 = c_1 = c$$

Từ điều kiện chuẩn hóa

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \Rightarrow 2|c_1|^2 = 1 \quad |c| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Vậy :

$$\varphi_{S_x = +\frac{\hbar}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha_1} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Hằng số pha  $\alpha_1$  tùy ý

$$= \varphi_{+\frac{\hbar}{2}} \quad (\text{có thể chọn } \alpha_1 = a).$$

Kết luận :

Toán tử hình chiếu Spin	$+\frac{\hbar}{2}$	$-\frac{\hbar}{2}$
$\hat{S}_X = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi_{S_x} = \varphi_{\frac{\hbar}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\varphi_{S_x} = \varphi_{-\frac{\hbar}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$
$\hat{S}_Y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi_{S_y} = \varphi_{\frac{\hbar}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$	$\varphi_{S_y} = \varphi_{-\frac{\hbar}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$
$\hat{S}_Z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\varphi_{S_z} = \varphi_{\frac{\hbar}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\varphi_{S_z} = \varphi_{-\frac{\hbar}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\varphi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

Hàm sóng hai thành phần , mà các ma trận Pauli tác dụng lên chúng , được gọi là các Spinor và trong phép quay hệ tọa độ chúng biến đổi theo biểu diễn tuyến tính lưỡng trị của nhóm quay . Khi quay một góc nhỏ  $\theta$  quanh trục

$\vec{n}$  ( trong đó  $\vec{n}$  là vecto đơn vị ) các thành phần của spinor  $\varphi_\alpha$ , với  $\alpha = \pm \frac{1}{2}$  ( đơn vị  $\hbar = 1$  ) sẽ biến đổi theo cách dưới đây :

$$\varphi'_\alpha = \left( \sigma_{\alpha\beta} - \frac{i\theta (\vec{\sigma} \cdot \vec{n})\alpha\beta}{2} \right) \varphi_\beta ;$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{n})\alpha\beta = \sigma_X n_X + \sigma_Y n_Y + \sigma_Z n_Z$$

$\varphi'_\alpha$  là các thành phần của Spinor trong hệ tọa độ mới .

\* Trong trường hợp hạt với Spin bằng một vecto Spin có dạng :

$$\hat{S} = \left( \hat{S}_X , \hat{S}_Y , \hat{S}_Z \right)$$

$$\hat{S}_X = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} ;$$

$$\hat{S}_Y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_Z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Trong lý thuyết Pauli sự mô tả Spin mang đặc tính hiện tượng luận . Thực ra sự tồn tại Spin của hạt là hiệu ứng tương đối tính và giải thích được chỉ trong Cơ học lượng tử tương đối tính . Từ phương trình Dirac tương đối tính suy ra sự tồn tại Spin và kèm theo momen từ . Thêm vào đó trong giới hạn vận tốc nhỏ phương trình Dirac chuyển thành phương trình Pauli cho hạt không tương đối tính với Spin .

## §2 PHƯƠNG TRÌNH PAULI

Phương trình Pauli là phương trình Cơ học lượng tử mô tả dáng điệu của hạt với Spin  $\frac{1}{2}$  ( thí dụ electron ) trong trường điện từ với điều kiện vận tốc của hạt là nhỏ so với vận tốc ánh sáng . Phương trình Pauli có dạng phương trình Schrodinger ( mô tả hạt với Spin bằng không ) song hàm sóng  $\Psi$  trong phương trình Pauli không phải là một vô hướng mà là Spinor hai thành phần và được viết dưới dạng :

$$\Psi = \Psi(\vec{r} , S_Z , t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{r} , \frac{\hbar}{2} , t) \\ \Psi_2(\vec{r} , -\frac{\hbar}{2} , t) \end{pmatrix}$$

Vì hạt có Spin nên nó có momen từ , khi đặt vào từ trường ngoài hạt sẽ có thêm năng lượng phụ bằng năng lượng của lưỡng cực từ trong một từ trường  $\vec{H}$  .

$$\Delta U = -(\vec{\mu} \vec{H}) = \left( \text{do momen từ của } e^- \text{ bằng } \vec{\mu} = -\frac{e}{mc} \vec{S} \right)$$

$$= \frac{\hbar e}{2mc} \vec{\sigma} \vec{H}$$

Ta biết Hamiltonien của phương trình Schrodinger

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(r)$$

trong trường điện từ ta dùng phép thế sau đây :

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$$

$$U \rightarrow U + e\varphi$$

Kể thêm Spin thì có thêm năng lượng phụ  $\Delta U$  :

$$\Delta U = \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \vec{H}$$

Kết quả ta có phương trình :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r, S_z, t)}{\partial t} = \left[ \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi(r) + U(r) + \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \vec{H} \right] \psi(\vec{r}, S_z, t)$$

$\varphi$ ,  $\vec{A}$  là các thế vô hướng và thế vectơ của trường điện từ. Đây là phương trình Pauli. Nhờ phương trình này ta có thể giải thích được hiệu ứng Zeemann thực chất phương trình Pauli là hai phương trình cho hai hàm  $\psi_1$  và  $\psi_2$  được viết gộp lại dưới dạng ma trận cột.

## CHƯƠNG IV. PHƯƠNG PHÁP NHIỄU LOẠN

Nghiệm chính xác của phương trình Schrodinger chỉ có tìm được trong một số bài toán đơn giản, như bài toán một chiều trong hố thế, dao động tử điều hòa, nguyên tử hydroger. Nhưng ngay cả trong những trường hợp đó lời giải cũng phức tạp.

Trong hầu hết những bài toán khác thực tế không tìm được nghiệm chính xác, do đó phải dùng đến phương pháp gần đúng – còn gọi là lý thuyết nhiễu loạn mà nội dung cơ bản là: đưa các bài toán này về những bài toán đơn giản có thể tìm nghiệm chính xác sau đó tìm những hiệu chỉnh tương ứng.

### §1 LÝ THUYẾT NHIỄU LOẠN DÙNG KHÔNG SUY BIẾN.

Trong bài toán:

$$\hat{H}\psi^{(n)} = E^{(n)}\psi^{(n)} \quad (1.1)$$

Ta biểu diễn  $\hat{H}$  dưới dạng:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{u}$$



Trong đó  $\hat{u}$  là số hạng bé không phụ thuộc tường minh vào thời gian và được gọi là toán tử nhiễu loạn bổ sung vào toán tử không nhiễu loạn  $\hat{H}_o$ . Với  $\hat{H}_o$  ta có :

$$\hat{H}_o \psi_o^{(n)} = E_o^{(n)} \psi_o^{(n)} \quad (1.2)$$

(coi như đã có), trong đó hệ  $\{\psi_o^{(n)}\}$  là trực chuẩn. Để thuận tiện hơn ta viết :

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \varepsilon \hat{u}$$

Trong đó  $\varepsilon$  là hằng số rất bé. Ta khai triển hàm sóng và năng lượng theo các bậc của  $\varepsilon$  :

$$\left. \begin{aligned} \psi^{(n)} &= \psi_o^{(n)} + \varepsilon \psi_1^{(n)} + \varepsilon^2 \psi_2^{(n)} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \psi_k^{(n)} \\ E^{(n)} &= E_o^{(n)} + \varepsilon E_1^{(n)} + \varepsilon^2 E_2^{(n)} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k E_k^{(n)} \end{aligned} \right\} \quad (1.3)$$

Thay (1.3) vào (1.1) ta có :

$$\begin{aligned} &(\hat{H}_o + \varepsilon \hat{u})(\psi_o^{(n)} + \varepsilon \psi_1^{(n)} + \varepsilon^2 \psi_2^{(n)} + \dots) = \\ &= (E_o^{(n)} + \varepsilon E_1^{(n)} + \varepsilon^2 E_2^{(n)} + \dots)(\psi_o^{(n)} + \varepsilon \psi_1^{(n)} + \dots) \end{aligned}$$

So sánh các hệ số của  $\varepsilon$  có cùng bậc lũy thừa ta có hệ phương trình:

$$\hat{H}_o \psi_o^{(n)} = E_o^{(n)} \psi_o^{(n)} \quad (1.4)$$

$$\hat{H}_o \psi_1^{(n)} - E_o^{(n)} \psi_1^{(n)} - E_1^{(n)} \psi_o^{(n)} = -\hat{u} \psi_o^{(n)} \quad (1.5)$$

$$\hat{H}_o \psi_2^{(n)} - E_o^{(n)} \psi_2^{(n)} - E_2^{(n)} \psi_o^{(n)} = -\hat{u} \psi_1^{(n)} + E_1^{(n)} \psi_1^{(n)} \quad (1.6)$$

Ta thấy phương trình (1.4) trùng với phương trình (1.2). Tiếp tục khai triển  $\psi_k^{(n)}$  theo chuỗi của hàm riêng  $\psi_o^{(n)}$  :

$$\psi_k^{(n)} = \sum_{m(\neq n)} C_{nm}^{(k)} \psi_o^{(m)}, \quad (k=1,2,3\dots) \quad (1.7)$$

Thay (1.7) vào (1.5) và (1.6) ta có :

$$\sum_{m(\neq n)} C_{nm}^{(1)} (E_o^{(m)} - E_o^{(n)}) \psi_o^{(m)} - E_1^{(n)} \psi_o^{(n)} = -\hat{u} \psi_o^{(n)} \quad (1.8)$$

$$\sum_{m(\neq n)} C_{nm}^{(2)} (E_o^{(m)} - E_o^{(n)}) \psi_o^{(m)} - E_2^{(n)} \psi_o^{(n)} = -\hat{u} \psi_1^{(n)} + E_1^{(n)} \psi_1^{(n)} \quad (1.9)$$

Ký hiệu phần tử ma trận của số hạng nhiễu loạn bổ sung  $u_{mn}$  bằng :

$$\begin{aligned} u_{mn} &= (\psi_o^{(m)} | \hat{u} | \psi_o^{(n)}) = \langle m | u | n \rangle = \\ &= \int \psi_o^{(m)*} \hat{u} \psi_o^{(n)} dV = \psi_o^{+(m)} \hat{u} \psi_o^{(n)} \end{aligned} \quad (1.10)$$

Ta hãy tìm bổ sung cấp một của năng lượng  $E_1^{(n)}$ . Muốn vậy ta nhân trái phương trình (1.8) với  $\psi_o^{+(n)}$  và dùng tính trực giao của hệ các hàm riêng gần đúng bậc không thì có :

$$E_1^{(n)} = (\psi_o^{+(n)} \hat{u} \psi_o^{(n)}) = u_{nm} \quad (1.11)$$

Điều này có nghĩa là :Số hạng nhiễu loạn cấp 1 của các giá trị riêng của năng lượng bằng giá trị trung bình của toán tử  $\hat{u}$  theo các trạng thái không nhiễu loạn .

Nếu ta nhân trái phương trình (1.8) với  $\psi_o^{+(m)}$  thì ta được biểu thức của các hệ số khai triển :

$$C_{nm}^{(1)} = \frac{u_{mn}}{E_o^{(n)} - E_o^{(m)}} \quad (1.12)$$

Như vậy các hàm riêng trong phép gần đúng cấp một là :

$$\sum_{m(\neq n)} \frac{u_{mn}}{E_o^{(n)} - E_o^{(m)}} \psi_o^{(m)} \quad (1.13)$$

Làm tương tự như trên , với phương trình (1.9)ta có :

$$E_2^{(n)} = \sum_{m(\neq n)} \frac{u_{nm} u_{mn}}{E_o^{(n)} - E_o^{(m)}} = \sum_{m(\neq n)} \frac{|u_{nm}|^2}{(E_o^{(n)} - E_o^{(m)})} \quad (1.14)$$

$$C_{nm}^{(2)} = \sum_{s(\neq n, m)} \frac{u_{ms} u_{sn}}{(E_o^{(n)} - E_o^{(s)})(E_o^{(s)} - E_o^{(m)})} - \frac{u_{mn} u_{nn}}{(E_o^{(n)} - E_o^{(m)})^2} \quad (1.15)$$

Như vậy trong gần đúng bậc hai lời giải của phương trình có dạng :  
+/- Năng lượng :(cho  $\mathcal{E} = 1$  )

$$E^n = E_o^{(n)} + \varepsilon E_1^{(n)} + \varepsilon^2 E_2^{(n)} = E_o^{(n)} + u_{nn} + \sum_{m(\neq n)} \frac{|u_{nm}|^2}{(E_o^{(n)} - E_o^{(m)})}$$

(1.16)

+/ Hàm sóng tương ứng : ( $\varepsilon = 1$ )

$$\begin{aligned} \psi^{(n)} = \psi_o^{(n)} + \varepsilon \psi_1^{(n)} + \varepsilon^2 \psi_2^{(n)} = \psi_o^{(n)} + \sum_{m(\neq n)} \frac{u_{nm}}{(E_o^{(n)} - E_o^{(m)})} \psi_o^{(n)} + \\ + \sum_{m(\neq n)} C_{nm}^{(2)} \psi_o^{(m)} \end{aligned}$$

(1.17)

Từ kết quả (1.17) ta thấy : thành phần hiệu chỉnh thực sự nhỏ khi :

$$|u_{nm}| \ll \left| (E_o^{(n)} - E_o^{(m)}) \right|$$

Điều này có nghĩa là phương pháp này áp dụng tốt khi các yếu tố ma trận của toán tử nhiễu loạn là nhỏ so với khoảng cách giữa các miền năng lượng của hệ không nhiễu loạn .

## §2 HIỆU ỨNG ZEEMANN

Hiệu ứng Zeemann là sự tách các mức năng lượng của nguyên tử , phân tử và tinh thể trong từ trường mà biểu hiện của nó là sự tách các vạch phổ . Cần phân biệt hai hiện tượng:

+ Hiệu ứng Zeemann bình thường: là hiện tượng tách các vạch phổ ở từ trường mạnh. Hiện tượng này thường quan sát được đối với nguyên tử khi không để ý đến Spin.

+ Hiệu ứng Zeemann dị thường là hiện tượng tách các vạch phổ ở từ trường yếu. Hiện tượng này thường quan sát được đối với các nguyên tử có momen Spin khác không.

Tên gọi như vậy là do lịch sử về hiệu ứng Zeemann bình thường được phát hiện ra trước.

Để xét bài toán ta xuất phát từ phương trình Pauli mô tả trạng thái của hạt cùng với Spin trong điện từ trường:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left\{ \frac{1}{2m_e} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi + u(r) + \frac{e\hbar}{2m_e c} \vec{\sigma} \cdot \vec{H} \right\} \psi(\vec{r}, t)$$

(2.1)

Ta xét hiệu ứng Zeemann bình thường do đó ta bỏ qua Spin của hạt và số hạng mô tả điện trường.

Như vậy phương trình (2.1) có dạng gọn hơn:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left\{ \frac{1}{2m_e} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + u(r) \right\} \psi(\vec{r}, t) \quad (2.2)$$

Để ý rằng:

$$\left( \vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 = \left( P_x - \frac{e}{c} A_x \right)^2 + \left( P_y - \frac{e}{c} A_y \right)^2 + \left( P_z - \frac{e}{c} A_z \right)^2$$

Mà ta có :

$$\left( p_x - \frac{e}{c} A_x \right)^2 = p_x^2 - \frac{e}{c} (p_x A_x - A_x p_x) + \frac{e^2}{c^2} A_x^2$$

$$p_x A_x \psi = p_x (A_x \psi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (A_x \psi) = -i\hbar \psi \frac{\partial A_x}{\partial x} - i\hbar A_x \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

Vậy :

$$(P_x A_x - A_x p_x) = -i\hbar \frac{\partial A_x}{\partial x} ; \left( \forall i \quad -i\hbar A_x \frac{\partial \psi}{\partial x} = A_x p_x \right)$$

Kết quả ta có :

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{e}{m_e c} \vec{A} \vec{p} + \frac{ie\hbar}{2m_e c} \nabla \vec{A} + \frac{e^2}{2m_e c^2} \vec{A}^2 + u(r)$$

Từ điều kiện Lerentz ta có :  $\nabla \vec{A} = 0$  và như vậy nếu bỏ qua số hạng bậc hai :  $\vec{A}^2$  thì  $\hat{H}$  có dạng :

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} + u(r) - \frac{e}{m_e c} \vec{A} \vec{p} = \hat{H}_o + \text{Năng lượng nhiễu loạn}$$

Nghĩa

là Năng lượng nhiễu loạn là số hạng :  $-\frac{e}{m_e c} \vec{A} \vec{p}$ .

Như vậy khi không có từ trường phương trình không nhiễu loạn là:

$$\hat{H}_o \varphi_{(\vec{r})}^{(o)} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + u(r) \right] \varphi_{(\vec{r})}^{(o)} = E_{nl}^{(o)} \varphi_{(\vec{r})}^{(o)}$$

Phương trình này có nghiệm là :

$$\varphi_{(r)}^o = \varphi_{nlm}^o(r, \theta, \varphi) = R_{ne}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = R_{nl}(r) p_\ell^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

Coi số hạng nhiễu loạn là :  $\frac{i\hbar e}{mc} \vec{A} \vec{\nabla}$  ta có thể tìm được :

$$E_1^{(nl)} = \left\langle n\ell \left| \frac{i\hbar e}{m_e c} \vec{A} \vec{\nabla} \right| n\ell \right\rangle = \int \varphi_{nlm}^{*(o)} \left( \frac{i\hbar e}{m_e c} \vec{A} \vec{\nabla} \right) \varphi_{nlm}^{(o)} dv$$

Giả sử từ trường là đều và không thay đổi, hướng dọc theo trục z khi đó ta có :  $H_x = H_y = 0$ ,  $H_z = H$

Từ  $\vec{H} = \text{rot} \vec{A}$  suy ra :

$$\left\{ \begin{array}{l} A_x = \frac{1}{2} y H \\ A_y = \frac{1}{2} x H \\ A_z = 0 \end{array} \right.$$

Do đó :

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar e}{mc} \vec{A} \vec{\nabla} &= -\frac{e}{m_e c} (A_x p_x + A_y p_y + A_z p_z) = \\ &= -\frac{e}{m_e c} \left( -\frac{1}{2} y p_x + \frac{1}{2} x p_y \right) H \\ &= -\frac{e\hbar}{2m_e c} (x p_y - y p_x) = -\frac{e\hbar}{m_e c} M_z \end{aligned}$$

Mặt khác do :

$$M_z = i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

nên ta có :

$$\frac{\partial \varphi_{nlm}^{(o)}(r, \theta, \varphi)}{\partial \varphi} = im \varphi_{nlm}^{(o)}(r, \theta, \varphi)$$

vậy ta có kết quả :

$$E_1^{(nl)} = -\frac{e\hbar}{2m_e c} \hbar m \int |\varphi_{nlm}^{(o)}|^2 dv = -\frac{e\hbar^2}{2m_e c} m$$

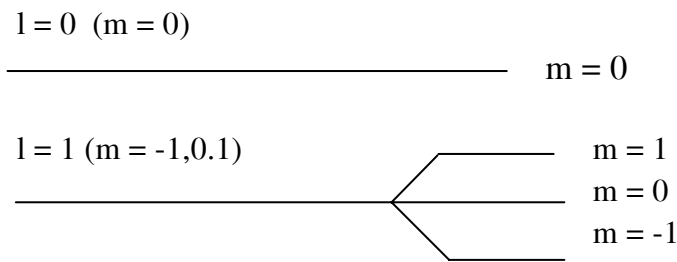
Bây giờ ta xét các hàm riêng : muốn vậy ta phải tính các phần tử ma trận:

$$\begin{aligned} \left\langle n\ell m \left| \frac{i\hbar e}{m_e c} \vec{A} \vec{\nabla} \right| n\ell m' \right\rangle &= \frac{i\hbar e}{2m_e c} \hbar \int \varphi_{nlm}^{*(o)} \frac{\partial}{\partial \varphi} \varphi_{nlm'}^{(o)} dv \\ &= -\frac{e\hbar^2}{2m_e c} m' \int \varphi_{nlm}^{*(o)} \varphi_{nlm'}^{(o)} dv = 0 \end{aligned}$$

Như vậy nghĩa là từ trường không làm thay đổi các hàm riêng của bài toán không nhiễu loạn ( $\psi = \varphi_{nlm}^{(o)}$ ) và số hiệu chính trong phép gần đúng cấp một bằng không, còn các mức năng lượng tách ra phụ thuộc vào m qua biểu thức :

$$E_{nlm} = E_{nl}^{(0)} - \frac{e\mathcal{A}\hbar}{2m_e c} m$$

Trên sơ đồ mức năng lượng hiện tượng này được minh họa như sau:



### §3 LÝ THUYẾT NHIỀU LOẠN DỪNG CÓ SUY BIẾN HIỆU ỨNG STARK

#### I/ Lý thuyết nhiễu loạn dừng có suy biến :

Để ý rằng lý thuyết ở phần trên sẽ vô nghĩa nếu :

$$E_o^{(n)} - E_o^{(m)} = 0$$

hay xấp xỉ một lượng rất bé. Vì vậy ta phải điều chỉnh lý thuyết sao cho có thể giải quyết được trường hợp đó .

Trước hết ta viết lại hệ hàm riêng. Giả sử :

+/  $\psi_o^{(1)}, \psi_o^{(2)} \dots \psi_o^{(g)}$  là các hàm cùng ứng với một trị riêng .

+/  $\psi_o^{(g+1)}, \psi_o^{(g+2)} \dots$  là mỗi hàm ứng với một trị riêng.

Trong phép gần đúng cấp 1 nghiệm của bài toán được tìm dưới dạng:

$$\psi = \sum_{s=1}^g c_s \psi_o^{(s)} + \sum_{\alpha=g+1}^{\infty} C_\alpha \psi_o^{(\alpha)} \quad (3.1)$$

trong đó :  $C_\alpha$  là các lượng bé và  $c_s$  là các lượng khá lớn.

Hamiltonian viết dưới dạng:  $\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{\mathcal{H}}$  còn năng lượng (trị riêng) tương ứng viết là :  $E = E_o + \varepsilon$  trong đó  $\varepsilon$  là hệ số chính bậc nhất của giá trị riêng – tức là năng lượng của hệ.

Phương trình Schrodinger trở thành:

$$\sum_1^g c_s (\hat{H} - E) \psi_o^{(s)} + \sum_{g+1}^{\infty} C_\alpha (\hat{H}_o - E_o) \psi_o^{(\alpha)} = 0 \quad (3.2)$$

Nhưng để ý rằng:

$$\hat{H}_o \psi_o^\alpha = E_o^\alpha \psi_o^\alpha$$

nên trong phép gần đúng cấp 1 phương trình (3.2) có thể viết là :

$$\sum_1^g C_s (\hat{H} - E) \psi_o^{(s)} + \sum_{g+1}^{\infty} C_\alpha (E_o^{(\alpha)} - E_o) \psi_o^{(\alpha)} = 0 \quad (3.3)$$

Nhân trái phương trình này với  $\psi_o^{+(\ell)}$  ( $\ell = 1, 2, \dots, g$ )

và sử dụng tính trực chuẩn của các hàm trong gần đúng cấp không ta có:

$$\sum_{s=1}^g C_s (H_{ls} - E) = 0$$

hay :

$$\sum_{s=1}^g C_s (H_{ls} - E \delta_{ls}) = 0 \quad (3.4)$$

trong đó :  $H_{ls} = \int \psi_o^{+(l)} \hat{H} \psi_o^{(s)} dv$  Phương trình (3.4) được gọi là phương trình thế kỷ . Dưới dạng khai triển phương trình này viết là :

$$C_1 (H_{11} - E) + C_2 H_{12} + \dots + C_g H_{1g} = 0$$

.....

$$C_1 H_{g1} + C_2 H_{g2} + \dots + C_g (H_{gg} - E) = 0$$

Điều kiện của hệ này là định thức của hệ phải bằng không:

$$\text{Det}(E) = \begin{vmatrix} (H_{11} - E) & H_{12} & \dots & H_{1g} \\ H_{21} & (H_{22} - E) & \dots & H_{2g} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{g1} & H_{g2} & \dots & (H_{gg} - E) \end{vmatrix} = 0$$

$$(\text{Det}(E) = |H_{es} - E \delta_{es}| = 0)$$

đây là phương trình đại số bậc g để xác định năng lượng E là

$E^{(1)}, E^{(2)} \dots E^{(g)}$  tương ứng với g trạng thái ban đầu suy biến hoặc chuẩn suy biến của hệ không nhiễu loạn . Thay các giá trị này của E vào phương trình (3.4) ta tìm được các hiệu chỉnh của hàm sóng trong phép gần đúng cấp 1 của lý thuyết nhiễu loạn . Do có nhiễu loạn nên mức năng lượng suy biến ban đầu nói chung sẽ không suy biến nữa và ta nói rằng : nhiễu loạn đã làm mất suy biến . Sự mất suy biến có thể là hoàn toàn có thể là bộ phận.

### **III/ Hiệu ứng Stark trong nguyên tử Hydrogen :**

Hiệu ứng Stark là sự biến đổi các mức năng lượng của nguyên tử, phân tử và tinh thể dưới tác dụng của điện trường , mà biểu hiện của nó là sự dịch chuyển và sự tách các vạch phổ .

Hiệu ứng Stark có hai trường hợp :

Hiệu ứng Stark tuyến tính :

Là sự tách các mức năng lượng tỷ lệ tuyến tính với E .

Hiệu ứng Stark bình phương là sự tách các mức năng lượng tỷ lệ với  $E^2$ . Trong giáo trình này chỉ hạn chế xét hiệu ứng Stark tuyến tính.

1/ Hiệu ứng Stark tuyến tính trong nguyên tử hydrogen :

Với nguyên tử hydrogen ta có công thức :

$$E_n^{(0)} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

điều này có nghĩa là năng lượng của hệ chỉ phụ thuộc vào số lượng tử chính  $n$ . Như vậy độ bậc suy biến của mức năng lượng  $E_n$  là  $n^2$  vì mức năng lượng suy biến theo  $l$  và  $n$  :

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2$$

Nếu ta đặt nguyên tử Hydrogen vào một điện trường có cường độ  $E = \text{const}$  thì các mức năng lượng của nguyên tử sẽ tách ra tỷ lệ với  $E$ .

Để đơn giản ta giả sử điện trường hướng theo trục  $z$ . Do đó Hamiltonien nhiễu loạn ( năng lượng tương tác của electron với trường ngoài ) sẽ bằng :

$$U = e\xi z$$

Trong đó  $\xi$  là cường độ của trường ngoài.

2/ Với  $n = 1$  : khi đó năng lượng có dạng:

$$E_1^{(0)} = -\frac{me^4}{2\hbar^2}$$

mà từ qui tắc với các số lượng tử :

$$n = 1, 2, \dots$$

$$l = 0, 1, 2, \dots (-1)$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm l$$

Nghĩa là với  $n = 1$  chỉ có một trạng thái  $\psi_{100}$ . Như vậy khi  $n = 1$  không có suy biến (một mức năng lượng ứng với một hàm sóng).

$$E_1^{(0)} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{4}$$

3/ Với  $n = 2$  Mức năng lượng

Nhưng khi đó sẽ có 4 hàm sóng là:

$$+/ 2s_0 : n = 2, \ell = 0, m = 0$$

$$+/ 2p_{-1} : n = 2, \ell = 1, m = -1$$

$$+/ 2p_0 : n = 2, \ell = 1, m = 0$$

$$+/ 2p_1 : n = 2, \ell = 1, m = 1$$

Như vậy năng lượng suy biến bậc 4. Nhưng lưu ý là tọa độ  $z$  giao hoán với

$\hat{L}_z$  cho nên với  $U = e\xi z$  (U tỷ lệ với  $z$ ) ta cũng có :

$$[\hat{U}, \hat{L}_z] = 0$$



Nghĩa là nhiễu loạn chỉ ảnh hưởng đến các trạng thái với cùng số lượng tử từ  $m$ , tức là các trạng thái  $2S_0$  và  $2P_0$  (xáo trộn chúng), còn hai mức kia  $2P_1$  và  $2P_{-1}$  vẫn không bị ảnh hưởng gì. Bốn trạng thái này được cho bằng hàm sóng như sau:

$$\begin{aligned}
 2S_0 &\rightarrow \psi_o^{(1)} = \psi_{200} = R_{20}(r)Y_{10} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{20}(r) = f(r) \\
 +/ \\
 2P_0 &\rightarrow \psi_o^{(2)} = \psi_{210} = R_{21}Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{21}(r) \cos\theta = F(r) \frac{z}{r} \\
 +/ \\
 2P_1 &\rightarrow \psi_o^{(3)} = \psi_{211} = R_{21}Y_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} R_{21}(r) \sin\theta e^{i\varphi} \\
 +/ \\
 &= F(r) \frac{x+iy}{2} \\
 2P_{-1} &\rightarrow \psi_o^{(4)} = \psi_{21-1} = R_{21}Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{21}(r) \sin\theta e^{-i\varphi} \\
 +/ \\
 &= F(r) \frac{x-iy}{2}
 \end{aligned}$$

Trong đó:

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a^3}} e^{-\frac{r}{2a}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right)$$

$$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{6a^3}} e^{-\frac{r}{2a}} \left(\frac{r}{2a}\right) \left(a = \frac{\hbar^2}{me^2} = \text{bán kính Bohr}\right)$$

Như vậy trạng thái tổng quát ứng với  $n = 2$  là :

$$\varphi = \sum_{\alpha=1}^4 C_{\alpha} \psi_{\alpha}^{(o)}$$

Dưới tác dụng của nhiễu loạn mức năng lượng sẽ tách ra thành bốn mức con, mỗi mức ứng với một hàm sóng (khử suy biến hoàn toàn) hay vẫn có một vài hàm sóng ứng với một mức năng lượng (khử suy biến một phần).

4/ để xác định các mức năng lượng và các hàm sóng khi tồn tại điện trường ngoài  $\xi$  theo lý thuyết nhiễu loạn ta phải giải phương trình thế kỷ :

$$\sum_{s=1}^g C_s (H_{ls} - E \sigma_{ls}) = 0$$

Biểu thức  $\hat{H} - E$  dưới dạng tổng :

$$\hat{H} - E = (\hat{H}_o - E^o) + (\hat{U} - E^{(1)})$$

Ta có kết quả là :

$$\sum_{s=1}^4 C_s (U_{ls} - E^{(1)} \sigma_{ls}) = 0$$

Trong đó  $u_{ls}$  là:

$$\hat{U}_{ls} = \int \psi_l^{*(o)} \psi_s^{(o)} dv = e\xi \int \psi_l^{*(o)} z \psi_s^{(o)} dv$$

Thay các hàm sóng vào yếu tố ma trận  $U_{ls}$  ta thấy chỉ có hai tích phân khác không là :

$$\begin{aligned} U_{12} = U_{21} &= e\xi \int f(r)F(r) \frac{z^2}{r} dv = (dv = r^2 \sin \theta dr d\varphi) = \\ &= \frac{e\xi\sqrt{3}}{4\pi} \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} R_{20}(r)R_{21}(r) \cos \theta z r^2 \sin \theta d\varphi \\ &= \frac{e\xi\sqrt{3}}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{12}} \frac{1}{a^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{-\frac{r}{2a}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}} \frac{r}{2a} z^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \\ &= \frac{e\xi\sqrt{3}}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{12}} \frac{1}{a^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{-\frac{r}{2a}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) \frac{r^2}{2a} z^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \end{aligned}$$

$$\text{Cuối cùng ta có kết quả : } U_{12} = U_{21} = -3e\xi a$$

Thay vào phương trình thế kỷ ta có :

$$-E^{(1)}c_1 - 3e\xi a c_2 + oc_3 + oc_4 = 0$$

$$-3e\xi a c_1 - E^{(1)}c_2 + oc_3 + oc_4 = 0$$

$$oc_1 + oc_2 - E^{(1)}c_3 + oc_4 = 0$$

$$oc_1 + oc_2 - E^{(1)}c_4 + oc_3 = 0$$

Để cho các  $c_i$  khác không thì định thức  $\det(E^{(1)}) = 0$  :

$$\det(E^{(1)}) = \begin{vmatrix} E^{(1)} & 3e\xi a & 0 & 0 \\ 3e\xi a & E^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E^{(1)} \end{vmatrix} =$$

$$= (E^{(1)})^2 (E^{(1)})^2 - (3e\xi a)^2 = 0$$

Từ đây suy ra :

$$E_1^{(1)} = 3e\xi a, \quad E_2^{(1)} = -3e\xi a, \quad E_3^{(1)} = 0 = E_4^{(1)}$$

Như vậy sự suy biến chỉ mất một phần và nếu năng lượng  $E_2^{(o)}$  chỉ tách ra thành ba mức khác nhau. Trên số đó mức năng lượng điều này được mô tả như bảng sau : (sự tách mức năng lượng  $n = 2$  ).

Không có điện trường ngoài	Có điện trường ngoài.
$E_2^{(o)} = -\frac{me^4}{2\hbar^2}$	$E_2 = E_2^{(o)} + 3e\xi a$ $E_3 = E_4^{(o)} = E_2^{(o)}$ $E_1 = E_2^{(o)} - 3e\xi a$
	$\varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1^{(o)} - \psi_2^{(o)})$ $\varphi_3 \neq \varphi_4 \quad \left\{ \begin{array}{l} \varphi_3 = \psi_3^{(o)} \\ \varphi_4 = \psi_4^{(o)} \end{array} \right.$ $\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1^{(o)} + \psi_2^{(o)})$

5/ tính các hàm sóng tương ứng với các mức năng lượng :

Ta tính các hàm sóng trong gần đúng cấp không gắn liền với các mức năng lượng  $E_1, E_2, E_3, E_4$ . thay  $E_3^{(1)} = E_4^{(1)} = 0$  vào phương trình thế kỷ ta có :

$$\begin{cases} oc_1 + 3e\xi ac_2 + oc_3 + oc_4 = 0 \\ oc_2 + 3e\xi ac_1 + oc_3 + oc_4 = 0 \\ oc_1 + oc_2 + oc_3 + oc_4 = 0 \\ oc_1 + oc_2 + oc_3 + oc_4 = 0 \end{cases}$$

Phương trình có nghiệm :  $c_1 = c_2 = 0, c_3 \neq 0, c_4 \neq 0$

Như vậy với mức năng lượng không bị xê dịch trạng thái tổng quát nhất được mô tả bằng hàm sóng :

$$\varphi(\vec{r}) = c\psi_3^{(o)} + c_4\psi_4^{(o)}$$

Tương ứng với mức  $E_3 = E_4 = E_2^{(o)}$   $c_3$  và  $c_4$  là tùy ý (sự suy biến vẫn còn) . Ta có thể chọn hàm sóng :

$$\varphi_3(r) = \psi_3^{(o)} = \psi_{211}(r) \quad m = 1$$

$$\varphi_4(r) = \psi_4^{(o)} = \psi_{21,-1}(r) \quad m = -1$$

Hay tổ hợp tuyến tính củ chúng vì hệ với  $m = \pm 1$  vẫn còn suy biến thậm chí khi có điện trường ngoài .

Thay  $E_1^{(1)}$  vào phương trình thế kỷ ta có :

$$c_3 = c_4 = 0, c_1 = -c_2 = c$$

do đó :

$$\varphi_2(\vec{r}) = c(\psi_1^{(o)} - \psi_2^{(o)})$$

hay

$$\varphi_2(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1^{(o)} - \psi_2^{(o)})$$

Thay  $E_2^{(1)} = -3e\xi a$  vào ta có :

$$c_3 = c_4 = 0, \quad c_1 = -c_2 = c$$

do đó :

$$\varphi_1(\vec{r}) = c(\psi_1^{(o)} + \psi_2^{(o)}) \quad \text{hay} \quad \varphi_1(r) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1^{(o)} + \psi_2^{(o)})$$

## CHƯƠNG V. HỆ CÁC HẠT ĐỒNG NHẤT

Các hạt đồng nhất trong cơ học lượng tử cũng được hiểu về cơ bản như trong vật lý cổ điển nghĩa là: các hạt hoàn toàn giống nhau, tức là các hạt có các đặc trưng  $e, m, s \dots$  hoàn toàn như nhau. Ví dụ như electron, các hạt photon ..v.v.là các hạt đồng nhất.

Tuy nhiên cần lưu ý là: khái niệm hạt đồng nhất trong quá trình phát triển của vật lý vi mô cũng như cơ học lượng tử ngày càng được mở rộng hơn-hay về mặt toán học có thể nói là đối xứng giữa các hạt vi mô ngày càng cao hơn. Cụ thể là: các hạt như proton và nơtron hoàn toàn khác nhau nhưng trong tương tác mạnh nó có thể được xem như là các hạt đồng nhất.

Trong vật lý học cổ điển vấn đề phân biệt các hạt đồng nhất là không có gì khó khăn vì ta có thể dựa vào quỹ đạo của các hạt để phân biệt chúng với nhau.

Nhưng trong cơ học lượng tử khái niệm quỹ đạo bị bác bỏ do nguyên lý bất định Heisenberg nên vấn đề không thể giải quyết theo cách như trong cơ học cổ điển được. Trong cơ học lượng tử các hạt đồng nhất hoàn toàn mất tính "cá thể", chúng hoàn toàn như nhau, không thể bằng bất kỳ cách nào đánh dấu được chúng. Đó là nội dung của nguyên lý không phân biệt các hạt đồng nhất.

### §1 TOÁN TỬ HOÁN VI. NGUYÊN LÝ PAULI

#### 1/ Toán tử hoán vị

Bây giờ ta tìm cách thể hiện nguyên lý không phân biệt các hạt đồng nhất bằng các tính chất của hàm sóng của hệ hạt đồng nhất.

Toán tử  $\hat{P}_{kj}$  được gọi là toán tử hoán vị khi nó tác dụng lên hàm sóng  $\psi(r_1, r_2, \dots)$  nó cho ta một hàm khác trong đó tọa độ của hạt thứ  $k$  và thứ  $j$  đổi chỗ cho nhau:

$$\hat{P}_{kj} \psi(r_1, r_2, \dots, r_k, \dots, r_j, \dots, r_N) = \psi(r_1, \dots, r_k, \dots, r_j, \dots, r_N) \quad (1)$$

Đối với hàm riêng ta có thể viết:

$$\hat{P}_{kj} \psi(r_1, \dots, r_k, \dots, r_j, \dots, r_N) = \lambda \psi(r_1, \dots, r_k, \dots, r_j, \dots, r_N)$$

Khi đó:

$$\hat{P}^2 \psi = \lambda^2 \psi = \psi$$

do đó:

$$\lambda^2 = 1 \rightarrow \lambda = \pm 1 \quad (2)$$

Các hàm không đổi dấu khi hoán vị được gọi là các hàm đối xứng – hay các hàm chẵn.

Các hàm đổi dấu khi hoán vị được gọi là các hàm phản đối xứng – hay các hàm lẻ.

Tính chẵn lẻ là một tích phân chuyển động vì toán tử hoán vị giao hoán với Hamiltonian. Sở dĩ như vậy là vì tác dụng của  $\hat{P}_{kj}$  lên  $\hat{H}$  chỉ đưa tới việc hoán vị các phần tử mà thôi.

$$\hat{H}(r_1 \dots r_k \dots r_j \dots r_N) = \hat{H}(r_1 \dots r_j \dots r_k \dots r_N)$$

## 2/ Các hạt Bose và các hạt Fermi (các boson và các Fermion)

Thực nghiệm chứng tỏ rằng tính chất đối xứng của hàm sóng có liên hệ với bản chất của các hạt. Các hạt có các hàm sóng  $\Psi$  đối xứng – ký hiệu là  $\Psi_s$  - được gọi là các Boson, Các hạt có các hàm sóng phản đối xứng – ký hiệu là  $\Psi_a$  - được gọi là các hạt Fermi hay các Fermion.

Các hạt được xếp vào loại nào là tùy thuộc vào Spin của chúng. Các Fermion có Spin bán nguyên, các Boson có Spin nguyên.

## 3/ Hàm sóng của hệ đồng nhất không tương tác. Nguyên lý Pauli.

Phương trình Schrodinger đối với các trạng thái dừng của các hạt không tương tác có dạng:

$$\sum_{i=1}^N \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + U(r) \right] \psi(\vec{r}_1, r_2 \dots r_N) = E \psi(\vec{r}_1, r_2 \dots r_N) \quad (3)$$

Nghiệm của phương trình này là:

$$\psi(r_1, r_2 \dots r_N) = \psi_{K_1}(r_1) \psi_{K_2}(r_2) \dots \psi_{K_N}(r_N) \quad (4)$$

Trong đó  $K_i$  ( $i=1, 2, \dots, N$ ) là tập hợp các số lượng tử của các trạng thái mà ở đó hạt tồn tại. Như vậy mỗi một khi  $K_i$  là một tập hợp đầy đủ đặc trưng cho trạng thái của từng hạt riêng lẻ. các hàm  $\psi_{K_i}(r)$  là nghiệm của phương trình Schrodinger để cho từng hạt riêng lẻ.

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \psi_{K_i}(r_i) + U(r_i) \right] \psi_{K_i}(r_i) = E_{K_i} \psi_{K_i}(r_i) \quad (5)$$

Nhưng để ý rằng hàm (4) không thỏa đòi hỏi đối xứng, hay nói chính xác hơn nó chưa phải là hàm đối xứng cũng như phản đối xứng. Nhưng lưu ý rằng phương

trình (3) là phương trình tuyến tính do đó sự chồng chất các nghiệm dạng (4) sẽ là một nghiệm của nó. Dựa vào nhận xét này ta có thể xây dựng tính đối xứng cho nghiệm của (3).

Để đơn giản ta xét hệ hai hạt không tương tác với nhau. Khi đó dễ thấy rằng: các hàm không đối xứng có dạng sau:

$$\begin{aligned}\psi_1(r_1, r_2) &= \psi_1(r_1)\psi_2(r_2) \\ \psi_2(r_1, r_2) &= \psi_2(r_1)\psi_1(r_2)\end{aligned}\quad (6)$$

Trong đó các chỉ số 1 và 2 trong các hàm sóng đánh dấu hai trạng thái khác nhau của hạt. Các hàm sóng  $\psi_1(r_1, r_2)$ ,  $\psi_2(r_1, r_2)$  tương ứng với cùng một giá trị năng lượng của hệ. Từ các hàm này ta có thể xây dựng hai tổ hợp đối xứng tương ứng với giá trị năng lượng đó.

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) + \psi_2(r_1)\psi_1(r_2)] \quad (7)$$

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2!}} [\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) - \psi_2(r_1)\psi_1(r_2)] \quad (8)$$

(Hệ số  $\frac{1}{\sqrt{2!}} = \frac{1}{\sqrt{2}}$  được suy ra từ điều kiện chuẩn hóa hàm sóng). Ta có thể tổng quát hóa hai công thức (7) và (8) cho trường hợp tổng quát bao gồm lượng tùy ý các hạt không tương tác.

Đối với hệ các Boson, trạng thái được mô tả bằng các hàm đối xứng:

$$\psi_s = \left( \frac{n_1! n_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum_P \psi_{K_1}(r_1) \psi_{K_2}(r_2) \dots \psi_{K_N}(r_N) \quad (9)$$

trong đó tổng lấy theo mọi cách hoán vị khả dĩ của các chỉ số khác nhau  $k_1, k_2, \dots, k_N$ ;  $n_i$  ký hiệu số chỉ số nhân cùng một giá trị. Nghĩa là các số  $n_i$  cho thấy có bao nhiêu hạt ở trạng thái  $\psi_i$  đã cho, hơn nữa:  $\sum n_i = N$

Tương tự cho các Fermion ta có hàm sóng:

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{K_1}(r_1) \psi_{K_1}(r_2) \dots \psi_{K_1}(r_N) \\ \psi_{K_2}(r_1) \psi_{K_2}(r_2) \dots \psi_{K_2}(r_N) \\ \dots \\ \psi_{K_N}(r_1) \psi_{K_N}(r_2) \dots \psi_{K_N}(r_N) \end{vmatrix} \quad (10)$$

Định thức trong vế phải được gọi là định thức Slater. Tùy theo loại hạt mà ta chọn hàm sóng dạng (9) hay (10).

Ta xét hệ các hạt Fermion. Giả sử có hai hạt của hệ cùng ở một trạng thái lượng tử có nghĩa là  $K_1 = K_2$ . Điều này có nghĩa là hai hạt có cùng một tập hợp đủ các số lượng tử. Ví dụ trong chuyển động của hạt ở trong trường xuyên tâm đối xứng là:  $n, \ell, m, S_2$ ; trong chuyển động tự do là:  $S_x, S_y, S_z$ , lúc đó định thức Slater (10) bằng không.

Như vậy với các Fermion không thể tồn tại trạng thái của hệ mà trong đó hai hạt đồng nhất (hoặc nhiều hơn) ở trong cùng một trạng thái.

Đó là nội dung của nguyên lý Pauli được thiết lập trên cơ sở phân tích các số liệu thực nghiệm trước khi xuất hiện cơ học lượng tử.

## §2 NĂNG LƯỢNG TRAO ĐỔI VÀ NGUYÊN TỬ HELI

Bài toán cơ học lượng tử cho một hệ hạt đồng nhất là bài toán khó khăn nhất mà tiếc thay nó lại là bài toán thường gặp nhất do ý nghĩa thực tiễn cũng như lý thuyết và cho tới nay còn rất nhiều vấn đề vẫn chưa được giải quyết trọn vẹn. Mặc dù vậy để làm sáng tỏ cho vấn đề này ta cũng có thể xét một bài toán cụ thể đó là bài toán nguyên tử Heli.

Cơ sở để xét bài toán này là một khái niệm hoàn toàn Cơ học lượng tử xuất phát từ nguyên lý không phân biệt các hạt đồng nhất: Khái niệm năng lượng trao đổi.

### I/. Định nghĩa năng lượng trao đổi :

Năng lượng trao đổi – hay tương tác trao đổi là sự tương tác đặc biệt của các hạt đồng nhất gắn liền với tính chất đối xứng nhất định của hàm sóng của hệ hạt đối với sự hoán vị “tọa độ” của chúng và thể hiện như kết quả của một tương tác đặc biệt nào đó.

Tương tác trao đổi là một hiệu ứng thuần túy cơ học lượng tử nghĩa là nó không hề có một sự tương tự nào trong cơ học cổ điển.

Hiệu ứng trao đổi là cơ sở để giải thích một hiện tượng chẳng hạn như sự tạo thành một liên kết đồng trị, sự tạo thành vùng năng lượng trong các tinh thể ...

### II/. Nguyên tử Heli :

Để làm ví dụ cụ thể ta xét nguyên tử Heli. Trong trường hợp này Hamiltonien có dạng :

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{2e^2}{r_{12}} \quad (2.1)$$

Như thế có nghĩa là đã giả thiết hạt nhân là đứng yên còn tương tác từ trường không xét đến Spin của electron (vì trong miền không tương đối tính hiệu ứng Spin coi như không đáng kể).

Để tính toán ta áp dụng phương pháp nhiễu loạn. Với toán tử nhiễu loạn chính là năng lượng tương tác giữa hai electron :



$$u = \frac{e^2}{\vec{r}_{12}}$$

$$\vec{H} = \vec{H}_o + u$$

$$\vec{H}_o = \vec{H}_1 + \vec{H}_2, \quad \vec{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - \frac{2e^2}{r_i}; \quad i=1,2. \quad (2.2)$$

Từ đó ta có phương trình Schrodinger :

$$H_i \varphi_n(\vec{r}_i) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - \frac{2e^2}{r_i} \right) \varphi_n(\vec{r}_i) = E_n(r_i) \quad (2.3)$$

Trước hết ta giải bài toán đơn giản :

$$H_o \psi_{o1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (H_1 + H_2) \psi_{o1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_o \psi_{o1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (2.4)$$

Hiển nhiên ta có thể viết  $H_o(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  dưới dạng :

$$\psi_{o1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2)$$

và hàm sóng này ứng với mức năng lượng :

$$E_o = E_1 + E_2$$

Dĩ nhiên ta cũng có thể viết hàm sóng dưới dạng :

$$\psi_{o2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_2) \psi_2(\vec{r}_1)$$

Nghĩa là các hạt trao đổi trạng thái cho nhau : hạt thứ nhất ở trạng thái thứ hai còn hạt thứ hai nằm trong trạng thái thứ nhất .

Vì  $E_o$  suy biến bội hai nên hàm riêng của bài toán nhiễu loạn sẽ được tìm dưới dạng :

$$\psi = C_1 \psi_{o1} + C_2 \psi_{o2} \quad (2.5)$$

Thay hàm sóng này vào phương trình :

$$(H_o + U - E) \psi = 0$$

Và đặt :

$$E = E_o + \varepsilon$$

Ta được phương trình thế kỷ sau (trong gần đúng cấp 1) :

$$\sum_{s=1}^2 C_s (U_{\ell s} - \varepsilon \delta_{\ell s}) = 0 \quad (2.6)$$

trong đó :

$$U_{\ell s} = \int \psi_{o\ell}^* \hat{U} \psi_{os} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

Từ đây ta có thể tính được :

$$\begin{aligned} U_{11} &= \int \psi_{o1}^* U \psi_{o1} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \left( U = \frac{e^2}{r_{12}} \right) \\ &= e^2 \int \psi_1^*(\vec{r}_1) \psi_2^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_1(\vec{r}_2) \psi_2(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \\ &= \int \psi_{o2}^* \frac{e^2}{r_{12}} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = U_{22} = K \end{aligned} \quad (2.7)$$

Đại lượng K được định nghĩa như năng lượng tương tác Coulomb giữa hai điện tích phân bố với các mật độ tương ứng là :

$$\rho_1 = e|\psi_1(\vec{r}_1)|^2 \quad ; \quad \rho_2 = e|\psi_2(\vec{r}_2)|^2 \quad (2.8)$$

Tương tự ta có các phần tử ma trận còn lại (không chéo) là :

$$\begin{aligned} U_{11} &= e^2 \int \psi_{o1}^* \frac{1}{r_{12}} \psi_{o2} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \\ &= e^2 \int \psi_1^*(\vec{r}_1) \psi_2^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_1(\vec{r}_2) \psi_2(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \\ &= U_{21} = U_{12}^* = U_{21}^* = A \end{aligned} \quad (2.9)$$

Kết quả viết như trên chứng tỏ các giá trị của yếu tố ma trận là thực .

Như vậy phương trình (6) trở thành :

$$\begin{cases} (K - \varepsilon)C_1 + AC_2 = 0 \\ AC_1 + (K - \varepsilon)C_2 = 0 \end{cases} \quad (2.10)$$

Để hệ phương trình có nghiệm không tầm thường thì định thức của hệ phải bằng không nghĩa là :

$$K - \varepsilon = \pm A$$

Trường hợp :

$$\varepsilon = K + A.$$

Thay giá trị vào phương trình (10) ta có :

$$C_1 = C_2 = C.$$

Như vậy mức năng lượng  $E = E_o + \varepsilon = E_o + K + A$  ứng với hàm sóng :

$$\psi' = C(\psi_{o1} + \psi_{o2}) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) + \psi_1(\vec{r}_2) \psi_2(\vec{r}_1)] \quad (2.10)$$

$\frac{1}{\sqrt{2}}$  là hệ số chuẩn hóa).

Trường hợp  $\varepsilon = K - A$  và tính toán như trên ta có :  $C_1 = -C_2$  . Vậy mức năng lượng :

$$\psi'' = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) - \psi_1(\vec{r}_2) \psi_2(\vec{r}_1)] \quad (2.12)$$



## BÀI KẾT

Khi trình bày các nguyên lý cơ bản của cơ học lượng tử – như trong giáo trình này và trong đa số các giáo trình cơ học lượng tử khác – không thể trình bày theo một hệ thống chặt chẽ, hợp lý và sáng sủa về logic được. Bởi lẽ nếu trình bày như thế sẽ vấp phải một nhược điểm không phải là nhỏ là tính trừu tượng quá mức của khái niệm, nó che lấp các cơ sở vật lý của môn học (như giáo trình của Dirac). Vì vậy để khắc phục phần nào nhược điểm của cách trình bày của chúng ta, ở phần cuối này ta tổng kết một cách ngắn gọn các nguyên lý và các bài toán cơ bản cũng như giới hạn áp dụng của cơ học lượng tử – hay chính xác hơn là cơ học lượng tử không tương đối tính.

### I/. Các nguyên lý và bài toán cơ bản của cơ học lượng tử :

Cơ học lượng tử nghiên cứu cá tập hợp thống kê các hạt vi mô và giải ba toán chủ yếu:

1. Xác định các giá trị khả dĩ của các đại lượng cơ học (Xác định phổ của các đại lượng ).
  2. Tính xác suất của một đại lượng nào đó trong số các đại lượng của tập hợp các hạt vi mô.
  3. Sự biến đổi của tập hợp theo thời gian (chuyển động của hạt vi mô).
- Các nguyên lý cơ bản của cơ học lượng tử

#### 1/. Hàm Sóng Và Nguyên Lý Chồng Chất Trạng Thái.

Các hạt vi mô của một tập hợp xác định trong cơ học lượng tử được đặc trưng bởi hàm số sóng  $\psi$ .

Hàm  $\psi$  là hàm số của tập hợp xác định các đại lượng mà ta ký hiệu là  $x$  ( $x$  ở đây không chỉ là tọa độ hay các tọa độ, rộng hơn ta có thể hiểu là một tập hợp bất kỳ các biến số gián đoạn hay liên tục tạo thành một tập hợp đủ nào đó ). Số các đại lượng của tập hợp đủ được xác định bởi bản chất của hệ và bằng số bậc tự do của hệ. Tùy theo cách chọn tập hợp các đại lượng là đối số của hàm số sóng mà ta nói rằng hàm sóng ở trong biểu diễn này hay biểu diễn khác của trạng thái. Cụ thể hơn nếu  $x$  là các tọa độ ta nói trạng thái trong biểu diễn tọa độ, nếu  $x$  là xung lượng ta nói trạng thái trong biểu diễn xung lượng ... Hàm số sóng còn có chỉ số  $n$  (thường được bỏ đi không ghi) khi đó viết là  $\psi_n(x)$  – để chỉ hàm số sóng đã được xác định trên tập hợp nào.

Một tập hợp thống kê được mô tả bởi một hàm số sóng được xác định gọi là một tập hợp thuần nhất (hay tinh khiết). Tập hợp không có một hàm số sóng được xác định gọi là tập hợp hỗn hợp. Nó được đặc trưng bởi ma trận mật độ. thay cho hàm số sóng .

Tính chất cơ bản của các tập hợp lượng tử tinh khiết được biểu thị trong nguyên lý: Nếu hai trạng thái khả dĩ được biểu diễn bằng các hàm số sóng  $\psi_1$  và  $\psi_2$  thì tồn tại một trạng thái thứ ba được biểu diễn bởi hàm số sóng:

$$\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2 .$$

trong đó  $C_1$  và  $C_2$  được gọi là các biên độ trạng thái.

Tất cả những hệ thức giữa các đại lượng vật lý trong cơ học lượng tử được biểu diễn bằng các toán tử tuyến tính tự liên hợp sao cho mỗi một đại lượng vật lý thực  $L$  được đối ứng với một toán tử tuyến tính tự liên hợp biểu diễn nó.

## 2/ Giá Trị Trung Bình:

Sự biểu diễn các đại lượng nhờ các toán tử liên hệ với các đại lượng đo được nhờ các công thức xác định giá trị trung bình của đại lượng ở trạng thái  $\psi$ :

$$\bar{L} = (\psi, L\psi)$$

Với điều kiện chuẩn hóa:

$$(\psi, \psi) = 1$$

Cách định nghĩa giá trị trung bình này cho phép ta tìm được phổ của lượng  $L$ , nghĩa là tìm được các giá trị khả dĩ của nó. Muốn thế ta tìm các trạng thái mà ở đó lượng  $L$  chỉ có một giá trị xác định, nghĩa là tìm những trạng thái mà:

$$\Delta L^2 = 0$$

## 3/ Bài toán trị riêng và các giá trị đo được của các đại lượng vật lý trong thực nghiệm

Phương trình xác định các hàm số riêng của toán tử  $\hat{L}$ :

$$\hat{L}\psi_L(x) = L\psi_L(x)$$

Từ đó ta tìm được phổ của toán tử  $\hat{L}$  (liên tục hay gián đoạn) và các trạng thái riêng tương ứng  $\psi_L(x)$ . Ta thừa nhận rằng: các giá trị riêng của toán tử  $\hat{L}$  là các giá trị của đại lượng  $L$  quan sát được trong thực nghiệm.

Vì các hàm số riêng lập thành một hệ hàm số trực giao nên một hàm số sóng bất kỳ  $\psi(x)$  có thể khai triển theo các hàm số riêng  $\psi_L(x)$  của phổ:

$$\psi(x) = \sum_L C(L)\psi_L(x)$$

trong đó:

$$C(L) = (\psi_L, \psi)$$

Nếu phổ là liên tục thì dấu tổng phải được thay thế bằng dấu tích phân:  $\int dL$ .

Xác xuất tìm thấy giá trị của đại lượng bằng  $L$  trong tập hợp được đặc trưng bởi hàm số sóng  $\psi(x)$  là bằng  $|C(L)|^2$  (trong trường hợp phổ biến liên tục  $|C(L)|^2$  là mật độ xác xuất).

Lưu ý rằng  $C(L)$  là hàm số sóng cũng như tập hợp này nhưng lấy trong  $L$ -biểu diễn. Như vậy  $C(L)$  và  $\psi(x)$  cũng biểu diễn một tập hợp.

## 4/ Phương trình cơ bản:

Sự biến đổi theo thời gian của hàm số sóng miêu tả hạt được cho bằng phương trình Schrodinger

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

trong đó toán tử  $\hat{H}$  là Hamiltonien của hệ chỉ phụ thuộc vào bản chất của hệ và phụ thuộc vào ngoại trường tác dụng lên hệ. Toán tử  $\hat{H}$  sẽ là toán tử năng lượng toàn phần của hệ nếu ngoại trường không phụ thuộc thời gian:

Thông thường có thể viết:

$$\hat{H} = T + U$$

Từ phương trình Schrodinger và định nghĩa giá trị trung bình ta suy ra rằng:

$$\frac{\partial \bar{L}}{\partial t} = \left( \psi, \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \psi \right) + \left( \psi, [\hat{H}, \hat{L}] \psi \right)$$

Do đó toán tử  $\frac{d\hat{L}}{dt}$  biểu diễn đạo hàm toán tử  $\hat{L}$  theo thời gian có dạng:

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{L}]$$

trong đó:  $[\hat{H}, \hat{L}] = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}\hat{L} - \hat{L}\hat{H}]$  là móc Poisson lượng tử.

Tích phân chuyển động được cho bởi hệ thức:

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = 0$$

Khi không có ngoại lực các tích phân chuyển động quan trọng là năng lượng, xung lượng toàn phần:

$$P = \sum_K P_K = -i\hbar \sum_K \nabla_K$$

và momen xung lượng:

$$M = \sum_K [r_K \times P_K] + \sum_K S_K$$

trong đó  $S_K$  là momen Spin của hạt thứ K.

### **5/ Nguyên lý không phân biệt các hạt đồng nhất:**

Theo nguyên lý này thì sự trao đổi của một cặp hạt giống nhau không dẫn đến một trạng thái mới nào về mặt vật lý. Về phương diện toán học điều này được cho bằng một điều kiện cho hàm số sóng:

$$PK_j \psi = \lambda \psi$$

trong đó  $\lambda = \pm 1$  là các trị riêng của toán tử hoán vị  $PK_j$ .

Từ đó hàm sóng được chia thành hai loại:

- loại mô tả các trạng thái đối xứng  $\psi_s$ .

- loại mô tả các trạng thái phản đối xứng  $\psi_a$

Từ phương trình Schrodinger suy ra rằng tính đối xứng không thay đổi theo thời gian. Do đó hạt thuộc về loại đối xứng hay phản đối xứng được quy định từ bản chất của các hạt. Các hạt được mô tả bằng các hàm sóng đối xứng được gọi là các Botton.

Các hạt được mô tả bằng các hàm sóng phản đối xứng được gọi là các Fermion-Chúng tuân theo nguyên lý Pauli-như là hệ quả trực tiếp của nguyên lý bất định Heisenberg.

## II/ Những chân trời mới – hay là sự phát triển tiếp tục của Cơ học lượng tử:

Mặc dù quá phức tạp và rất chặt chẽ song phần cơ học lượng tử ở trong giáo trình này nói chính xác mới chỉ là cơ học lượng tử không tương đối tính-một phần mở đầu-phần đơn giản nhất trong mạch phát triển của vật lý lý thuyết hiện đại. Quay trở lại trang đầu của giáo trình ta thấy đây chỉ là phần tương ứng với

$$v \ll c.$$

$$\left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} \hbar \approx \text{hữu hạn.}$$

Do đó hiển nhiên là không đầy đủ nếu như không xét sự mở rộng của nó sang các phần khác. Chính vì vậy ngay trong nửa đầu của thế kỷ thứ 20, các nhà vật lý đã liên tiếp mở rộng cơ học lượng tử và đạt được những kết quả to lớn.

Sự mở rộng đầu tiên dựa trên nhận xét là: phương trình Schrodinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r, t) \right] \psi(\vec{r}, t)$$

rõ ràng là không bất biến đối với phép biến đổi Lorentz vì nó là phương trình bậc nhất theo thời gian và bậc hai theo các tọa độ không gian, nghĩa là các tọa độ không gian và không gian là không đối xứng trong phương trình này.

Mở rộng phương trình Schrodinger theo yêu cầu đó đưa tới phương trình mới tổng quát hơn- phương trình Klein-Gordon cho hạt có Spin bằng không:

$$(\square - H^2) \varphi(x) = 0$$

$$H^2 = \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2$$

trong đó:  $\square$  là toán tử Dalembert, phương trình này là phương trình bậc hai theo các tọa độ thời gian và không gian. Nó bất biến với phép biến đổi Lorentz.

Phương trình Klein-Gordon đưa tới những thành công mới song lại đưa tới một khó khăn lớn đó là sự xuất hiện mật độ xác suất âm một điều quá “kỳ quặc” không thể chấp nhận. Để vượt qua tình trạng này Pauli và Weisskopf đã xem  $\varphi(x)$  và một số đại lượng khác nữa như là các toán tử và do đó phương trình Klein-Gordon là có thể chấp nhận được.

Sự phát triển tiếp theo là sự mở rộng phương trình tương đối tính cho các hạt có Spin bán nguyên. Vinh quang này thuộc về nhà vật lý học người Anh là Paul Dirac với phương trình:

$$\left( \gamma_{\mu} \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} + H \right) \psi(x) = 0 \quad \text{với} \quad \psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ \psi_3(x) \\ \psi_4(x) \end{pmatrix}$$

Đây là phương trình bậc nhất theo đạo hàm các tọa độ không gian và thời gian và bất biến với phép biến đổi Lorentz.

Phương trình Dirac với thành công xuất sắc là khẳng định sự tồn tại của hạt Positron mà nhiều năm sau thực nghiệm mới phát hiện được.

Tuy nhiên cơ học lượng tử tương đối tính với hai phương trình cơ bản là phương trình Klein-Gordon và phương trình Dirac chưa phải là tận cùng. Bởi lẽ cùng với phương trình Schrodinger các phương trình này mới chỉ mô tả hệ hạt với số hạt bảo toàn, hay nói cách khác các phương trình này mới chỉ mô tả hệ hạt với số hữu hạn bậc tự do (3N hay 4N nếu kể cả Spin). Như vậy chúng không thể mô tả đầy đủ thế giới các hạt cơ bản với một đặc tính quan trọng là sự sinh và hủy hạt-nghĩa là số hạt không bảo toàn – khi năng lượng của các hạt đủ lớn.

Vì thế cơ học lượng tử tương đối tính lại được phát triển ở mức cao hơn và trở thành “lý thuyết trường lượng tử”. Về mặt toán học người ta thường gọi sự tiến bộ này bằng thuật ngữ lượng tử hóa lần hai. Nghĩa là khi đó không chỉ các đại lượng động lực mà cả các hàm sóng cũng là các toán tử tuân theo những hệ thức giao hoán nhất định. Lý thuyết trường lượng tử là lý thuyết vật lý xem các hạt vi mô như là các lượng tử của một trường nào đó tương ứng. Ví dụ photon là lượng tử của trường điện từ, electron là lượng tử của trường electron - Positron.

Mặc dù đạt được những kết quả tuyệt vời lý thuyết trường lượng tử cũng làm nảy sinh những khó khăn mới rất không nhỏ. Đặc biệt đó là sự “phân kỳ” trong các lý thuyết này. Nói cho rõ hơn : khi tính toán lý thuyết trường lượng tử cho thấy khối lượng, năng lượng của vi hạt lại không phải là những lượng hữu hạn mà lại bằng vô cùng-một kết luận không thể hình dung nổi ...

Tiếc rằng trong khuôn khổ của giáo trình này ta không thể nghiên cứu nhiều hơn về lý thuyết trường lượng tử. Vài dòng thay lời kết luận này chỉ hy vọng giúp bạn đọc hiểu rằng cơ học lượng tử hay chính xác hơn cơ học lượng tử không tương đối tính mới chỉ là một bước đầu tiên đơn giản nhất đi vào thế giới vi mô.

Vật lý là như thế , khoa học là như thế và cuộc sống như một nhà thơ đã viết :

Trong đôi mắt tuổi thơ của tôi

Chân trời là nơi có dãy núi mờ tím .

Dãy núi ấy bây giờ tôi đến

Trước mắt tôi lại một chân trời.

(Phạm Quốc Ca )

cũng là như thế .Chân trời nối tiếp chân trời ,ước mơ nối tiếp ước mơ . Tòa nhà vật lý học dù đã vô cùng đồ sộ và phức tạp nhưng không phải đã hoàn chỉnh mà vẫn còn rất nhiều chỗ dành cho các bạn . Hãy biết ước mơ , ước mơ và dành hết tâm trí , sức lực của mình cho ước mơ ấy ngay từ khi còn đầu xanh tuổi trẻ .

Một lần nữa tôi chúc các bạn gặt hái nhiều thành công trong học tập và luôn ước mơ , vươn tới nhưng chân trời xa xôi trong khoa học .



## **TÀI LIỆU THAM KHẢO:**

Hướng dẫn các tài liệu tham khảo thêm:

- 1/ D . DavuDop , Cơ học lượng tử, Hà nội, 1980.
- 2/ L.V.Tarasop ,Basics concept of Quantum Mechanics , Moscow, 1980.
- 3/ Blokhinsep , Cơ học lượng tử, Hà nội, 1963.
- 4/ B.B.Balasop, B.K.Dolinop , Giáo trình Cơ học lượng tử, Moscow, 1982 (Tiếng nga).
- 5/ E.Fermi ,Notes on Quantum Mechanics, Moscow, 1968.
- 6/ L.A.Borisolepski, Minscơ, 1981 (Tiếng nga).
- 7/ V.A.Fock , Các nguyên lý cơ bản của Cơ học lượng tử, Moscow, 1978.
- 8/ P.Dirac , Các nguyên lý của Cơ học lượng tử, Moscow, 1979.
- 9/ Nguyễn Xuân Hãn , Giáo trình Cơ học lượng tử ,Đại học Tổng hợp Hà nội, 1983.
- 10/ Nguyễn Hoàng Phương , Nhập môn Cơ học lượng tử, Hà nội, 1998.
- 11/ D.D.Landau , E.M.Lifshitz, Cơ học lượng tử, Moscow,1965 (Tiếng nga).
- 12/ R. Feymann , Lecture on Physics , Vol III , California , 1976.