1 Lưỡng tính sóng-hạt của vật chất

Chúng ta đã biết ánh sáng vốn được coi là sóng, rồi sau đó, với các phát hiện của Planck, Einstein và Compton, nó lại được coi là gồm các hạt photon. Vậy rốt cuộc ánh sáng là sóng hay là hạt? Ngày nay các nhà vật lý chấp nhận rằng ánh sáng vừa là hạt, lại cũng vừa là sóng. Khi cần giải thích các hiện tượng như giao thoa hay nhiễu xạ, chúng ta coi ánh sáng là sóng, còn khi cần giải thích các hiện tượng quang điện hay tán xạ Compton, chúng ta lại coi ánh sáng như các hạt photon. Nói cách khác, ánh sáng có *lưỡng tính sóng-hạt*.

Thế còn các hạt vật chất thì sao? Có khi nào các vật chất thông thường, mà chúng ta vẫn coi là hạt, lại cũng đồng thời là sóng không? Đó là câu hỏi mà De Broglie đặt ra năm 1924.

1.1 Giả thuyết De Broglie – Sóng vật chất

Để trả lời câu hỏi trên, De Broglie đã đưa ra giả thuyết sau: vật chất thông thường cũng phải có lưỡng tính sóng-hạt như ánh sáng, sóng tương ứng với vật chất được gọi là *sóng vật chất* hay *sóng De Broglie*; một hạt tự do chuyển động với động lượng p có bước sóng vật chất xác định bởi:

$$\lambda=\frac{h}{p} \tag{1}$$

trong đó $h = 6,63 \times 10^{-34}$ J.s, là hằng số Planck quen thuộc.

1.2 Một số ví dụ về bước sóng vật chất

Ví dụ 1:

Voi Dumbo nặng 1000 kg, bay với vận tốc 10 m/s sẽ có bước sóng De Broglie là bao nhiêu?

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{6,63\times10^{-34}}{10^{3}\times10}=10^{-37}m$$

Bước sóng này quá nhỏ, vì vậy chú voi không thể hiện tính sóng của mình.

Ví dụ 2:

Bước sóng De Broglie của một hạt bụi nặng 10^{-9} kg rơi với vận tốc 0,020 m/s:

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{6,63\times10^{-34}}{10^{-9}\times0,020}=10^{-23}m$$

Một lần nữa, bước sóng này cũng quá nhỏ để có thể quan sát được.

Ví dụ 3:

Một electron trong mạch điện hay trong nguyên tử có động năng trung bình vào khoảng 1 eV, có bước sóng De Broglie:

$$\lambda=\frac{h}{\sqrt{2mK}}=\frac{6,63\,.\,10^{-34}\,J}{\sqrt{2\times(9,11\,.\,10^{-31}kg)\times(1,6\,.\,10^{-19}\,J)}}=1,6\times10^{-9}m$$

Bước sóng này vào cỡ kích thước của nguyên tử nên có thể quan sát được.

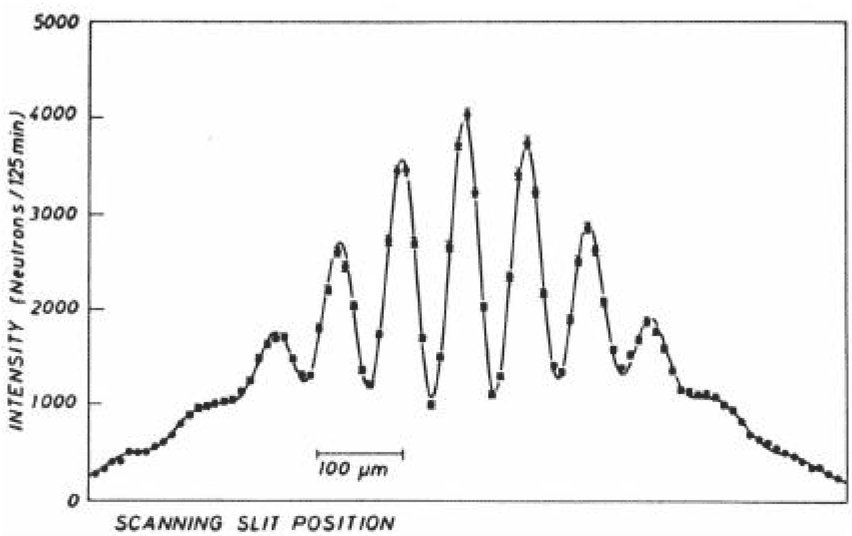
Qua các ví dụ trên đây, chúng ta nhận thấy tính sóng của vật chất bình thường là rất "yếu", không thể quan sát được, còn các hạt vi mô thì thể hiện tính sóng rõ rệt hơn.

1.3 Kiểm chứng thực nghiệm

Thí nghiệm Davisson-Germer (1927): quan sát được nhiễu xạ của electron trên tinh thể Nickel, tương tự như nhiễu xạ của tia X trên tinh thể.

Thí nghiệm Thomson (1927): quan sát được các vân nhiễu xạ hình tròn khi cho chùm electron năng lượng cao đi qua bột đa tinh thể hay màng mỏng kim loại.

Ngày nay, người ta có thể thực hiện được nhiễu xạ của sóng vật chất trên một khe, hai khe ... như đối với sóng ánh sáng vậy. Để minh họa, mời các bạn xem Hình 1, là ảnh nhiễu xạ của một chùm hạt neutron trên hai khe. Ngoài ra, người ta cũng dùng hiện tượng nhiễu xạ của các hạt như electron, neutron để khảo sát cấu trúc của vật chất, giống như dùng nhiễu xạ tia X để khảo sát cấu trúc tinh thể vậy.



Hình 1. Nhiễu xạ neutron trên hai khe: đo cường độ chùm hạt ở sau hai khe, người ta thu được sự phân bố cường độ theo vị trí như trong hiện tượng nhiễu xạ. (A. Zeilinger,R. Gähler, C.G. Shull, W. Treimer,and W. Mampe, Reviews of ModernPhysics, Vol. 60, 1988.)

1.4 Sóng vật chất là sóng xác suất

Khi nói tới sóng, chúng ta liên tưởng ngay đến những loại sóng quen thuộc như sóng nước, sóng âm ... Các loại sóng này gắn liền với sự dao động của một số lớn các hạt (phân tử nước hay không khí), các hạt này liên kết với nhau nên khi một số hạt dao động thì các hạt khác cũng dao động theo, tạo nên sự lan truyền dao động, tức là sóng. Sóng vật chất thì hoàn toàn khác hẳn, chỉ một hạt vi mô riêng lẻ cũng thể hiện tính sóng. Thật vậy, người ta có thể gửi từng electron hay photon riêng lẻ đến một khe mà vẫn quan sát được hiện tượng nhiễu xạ.

Như vậy, bản chất của sóng vật chất là gì? Theo Max Born thì sóng De Broglie thật ra là *sóng xác suất*, đây cũng là cách giải thích được chấp nhận rộng rãi nhất ngày nay.

Ý nghĩa của sóng xác suất là như sau - Gọi $\Psi(x,y,z)$ là hàm sóng vật chất tại vị trí (x,y,z) của một hạt vi mô, và dV là một thể tích nhỏ bao quanh vị trí này, ta có:

$$\text{Xác suất tìm thấy hạt trong thể tích dV} = |\Psi(x,y,z)|^2 dV \tag{2}$$

Đại lượng $|\Psi(x,y,z)|^2$ được gọi là *mật độ xác suất* của hạt tại (x,y,z).

Nếu lấy tổng của (2) trong toàn bộ không gian chúng ta sẽ được xác suất để tìm thấy hạt ở mọi nơi, và xác suất ấy đương nhiên là bằng đơn vị. Vì vậy chúng ta có tính chất sau đây của hàm sóng:

$$\int_V |\Psi(x,y,z)|^2 dV = 1 \tag{3}$$

Hệ thức trên đây còn được gọi là *điều kiện chuẩn hóa* của hàm sóng vật chất.

2 Phương trình Schrödinger

2.1 Phương trình Schrödinger tổng quát

Hàm sóng vật chất $\Psi(x,y,z,t)$ của một hạt khối lượng m, chuyển động trong trường có thế năng $U(x,y,z,t)$ thỏa phương trình Schrödinger tổng quát sau đây:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\Psi \tag{4}$$

trong đó $\hbar = h/2\pi$, $i = \sqrt{-1}$, và Δ là Laplacian:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

2.2 Phương trình Schrödinger dừng

Trong trường hợp *dừng*, khi thế năng U không phụ thuộc vào thời gian, $U = U(x,y,z)$, thì nghiệm tổng quát của phương trình Schrödinger trên đây có thể viết dưới dạng:

$$\Psi(x,y,z,t) = \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)\Phi(x,y,z) \tag{5}$$

với $\Phi(x,y,z)$ là hàm sóng dừng, thỏa phương trình Schrödinger dừng sau đây:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\Phi = E\Phi \tag{6a}$$

hay:

$$\Delta\Phi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\Phi = 0 \qquad (6b)$$

trong đó E là năng lượng toàn phần của hạt.

2.3 Hàm sóng của hạt tự do

Đối với một hạt tự do chuyển động theo dọc trục x, phương trình Schrödinger dừng (6b) trở thành:

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Phi = 0$$

với E bây giờ là động năng của hạt. Phương trình này có nghiệm tổng quát là:

$$\Phi = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx), \quad \text{với} \quad k = \sqrt{2mE/\hbar^2} = p/\hbar$$

Hàm sóng ứng với riêng số hạng thứ nhất trong nghiệm trên là:

$$\Psi = \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right).A\exp\left(i\frac{p}{\hbar}x\right) = A\exp\left\{-i\left(\frac{E}{\hbar}t - \frac{p}{\hbar}x\right)\right\}$$

hay:

$$\Psi = A\exp\{-i(\omega t - kx)\}, \quad \text{với} \quad \omega = E/\hbar, \quad k = p/\hbar \qquad (7)$$

Đây chính là biểu thức của một sóng phẳng lan truyền theo chiều dương của trục x, có tần số góc là ω và bước sóng là $\lambda = 2\pi/k = h/p$. Kết quả này phù hợp với giả thuyết De Broglie về bước sóng vật chất của một hạt tự do.

Tương tự như vậy, hàm sóng ứng với số hạng thứ hai trong biểu thức của Φ trên đây là hàm sóng mô tả một sóng phẳng truyền theo chiều âm của trục x.

3 Hệ thức bất định Heisenberg

3.1 Hệ thức bất định đối với vị trí và động lượng

Gọi Δx là độ bất định (hay độ chính xác) của tọa độ x của một vi hạt, và Δp_x là độ bất định của động lượng hạt trên phương x. Theo cơ học lượng tử thì giữa chúng có hệ thức sau:

$$\Delta x.\Delta p_x \gtrsim h \qquad (8a)$$

Nghĩa là tích của hai độ bất định của x và p_x là lớn hơn hay vào cỡ hằng số Planck. Tương tự, chúng ta cũng có các hệ thức bất định đối với y và p_y, z và p_z.

$$\Delta y.\Delta p_y \gtrsim h, \quad \Delta z.\Delta p_z \gtrsim h \tag{8b}$$

Hệ quả của hệ thức bất định là chúng ta không thể xác định được chính xác đồng thời tọa độ và động lượng của các vi hạt, hay nói cách khác, chúng ta không thể xác định được quỹ đạo của chúng. Điều này cũng có thể hiểu được, vì thật ra các vi hạt là sóng.

Ví dụ 1:

Một electron có vận tốc bằng 2,05 × 10^6 m/s, được đo với độ chính xác là 1,5 %. Động lượng của electron là:

$p = mv$ = (9,11 × 10^{-31} kg) × (2,05 × 10^6 m/s) = 1,87 × 10^{-24} kg.m/s

Độ bất định của động lượng là 1,5 % giá trị đó, tức là bằng 2,80 × 10^{-26} kg.m/s. Thay Δp_x trong (8a) bằng giá trị này, ta suy ra độ bất định về tọa độ:

$$\Delta x \gtrsim \frac{h}{\Delta p_x} = 2{,}4\times 10^{-8}\, m = 24\, nm$$

tức là khoảng 200 lần đường kính của nguyên tử – đối với một hạt vi mô thì sai số này là quá lớn!

Ví dụ 2:

Electron trong nguyên tử có độ bất định về tọa độ vào khoảng kích thước của nguyên tử, tức là 0,1 nm. Từ (8a) ta suy ra độ bất định về động lượng:

$$\Delta p_x \gtrsim \frac{h}{\Delta x} = \frac{6{,}63\times 10^{-34} J.s}{0{,}1\times 10^{-9} m} = 6{,}63\times 10^{-24} kg.m/s$$

Chúng ta biết động năng của electron trong nguyên tử là cỡ 1 eV, do đó động lượng của electron là:

$$p_x = \sqrt{2mK} = \sqrt{2\times(9{,}11.10^{-31} kg)\times(1{,}6.10^{-19} J)} = 5{,}4\times 10^{-25} kg.m/s$$

Nghĩa là độ bất định về động lượng lớn gần gấp 10 lần động lượng!

Ví dụ 3:

Một quả banh golf có khối lượng 45 g đang bay với vận tốc 35 m/s. Vận tốc được đo với độ chính xác là 1,5 %. Làm tương tự như trong Ví dụ 1, ta suy ra độ bất định về vị trí của quả banh:

$$\Delta x \gtrsim 3\times 10^{-32} m$$

Độ bất định này rất nhỏ, nghĩa là người ta vẫn có thể xác định được chính xác đồng thời vị trí và động lượng của quả banh. Một lần nữa, chúng ta thấy tính chất sóng của các vật vĩ mô là rất yếu, vì vậy để khảo sát chuyển động của chúng người ta vẫn dùng Cơ học cổ điển.

3.2 Hệ thức bất định đối với năng lượng và thời gian

Gọi Δt là thời gian hạt tồn tại ở một trạng thái, và ΔE là độ bất định của năng lượng hạt ở trạng thái đó. Giữa chúng có hệ thức bất định sau:

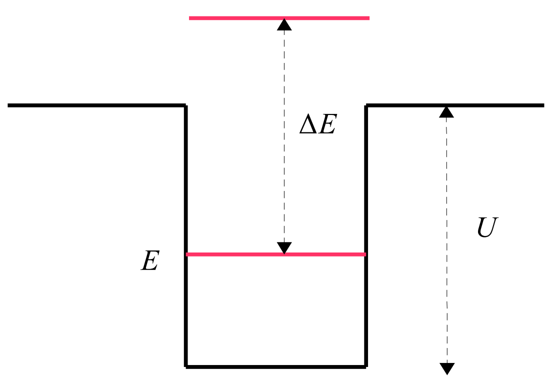
$$\Delta t . \Delta E \gtrsim h \qquad (9)$$

Hiệu ứng chui ngầm

Hệ thức bất định này dẫn đến một hệ quả rất đặc biệt – Giả sử có một vi hạt bị giam trong một chiếc hộp, hay theo cách nói của các nhà vật lý, là bị giam trong một giếng thế. Hạt không thể ra khỏi hộp được vì năng lượng toàn phần của nó nhỏ hơn độ sâu của giếng thế. Tuy nhiên, nếu trạng thái của hạt là không bền và chỉ tồn tại trong một khoảng thời gian rất ngắn, $\Delta t \approx h/U$, thì trong khoảng thời gian đó độ bất định năng lượng của hạt là:

$$\Delta E \gtrsim \frac{h}{\Delta t} = \frac{h}{h/U} = U$$

Độ bất định này còn lớn hơn cả chiều sâu của giếng thế! Điều này có nghĩa là hạt có thể thoát ra khỏi giếng thế trong những khoảng thời gian rất ngắn, cỡ $\Delta t \approx h/U$, mặc dù có năng lượng trung bình nhỏ hơn độ sâu của giếng. Người ta gọi đó là *hiệu ứng chui ngầm* hay *hiệu ứng đường ngầm* (Hình 2).



Hình 2. Hiệu ứng chui ngầm - Trong những khoảng thời gian rất ngắn, hạt có độ bất định năng lượng ΔE đủ lớn để thoát khỏi giếng thế.

4 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều

4.1 Giếng thế vô hạn một chiều

Giếng thế vô hạn một chiều được xác định bởi:

$$U = \begin{cases} 0 & \text{khi} \quad 0 < x < a \\ \infty & \text{khi} \quad x \le 0 \quad \text{hay} \quad x \ge a \end{cases}$$

trong đó a là độ rộng của giếng thế (Hình 3). Electron tự do trong kim loại là một ví dụ về hạt chuyển động trong một giếng thế vô hạn.

4.2 Năng lượng bị lượng tử hóa

Theo quan điểm sóng, hạt trong giếng thế là một sóng truyền lui tới giữa hai vách giếng. Sóng tới và sóng phản xạ kết hợp với nhau tạo nên sóng dừng, tương tự như sóng trên một sợi dây đàn vậy. Khi đó bề rộng của giếng thế phải là một bội số của một nửa bước sóng:

$$a = n\frac{\lambda}{2} \qquad n = 1, 2, \ldots$$

Bên trong giếng thế thì thế năng bằng không nên hạt là tự do và có bước sóng cho bởi:

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

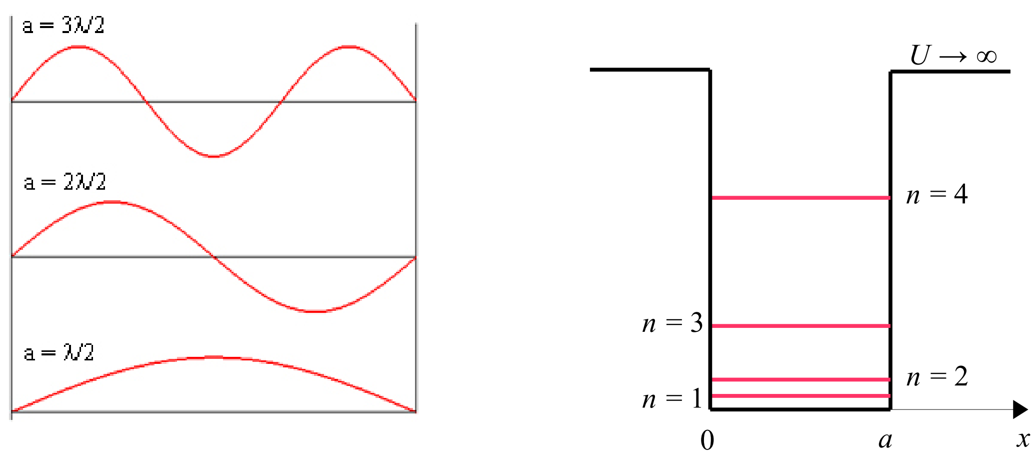
Suy ra động lượng hạt:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2a/n} = n\frac{h}{2a}$$

Do đó năng lượng của hạt là:

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = n^2\frac{h^2}{8ma} \tag{10}$$

Theo đó thì năng lượng của hạt trong giếng thế vô hạn thay đổi một cách gián đoạn theo n^2, hay nói cách khác, năng lượng hạt đã bị lượng tử hóa. Số n được gọi là số lượng tử năng lượng. Ngoài ra, mức năng lượng thấp nhất, ứng với $n = 1$, là khác không. Trước đây, người ta hay nghĩ là khi nhiệt độ tuyệt đối tiến đến 0 thì các hạt cấu tạo nên vật chất sẽ ngừng chuyển động, do đó mức năng lượng thấp nhất của hạt là bằng không. Tuy nhiên, cơ học lượng tử cho thấy mức năng lượng thấp nhất của các vi hạt là khác không.



Hình 3. Giếng thế vô hạn một chiều – Hạt chuyển động lui tới giữa hai vách, tạo nên sóng dừng khi bề rộng giếng bằng n lần nửa bước sóng, hệ quả là năng lượng của hạt bị lượng tử hóa theo n.

4.3 Hàm sóng

Phương trình Schrodinger dừng của hạt trong giếng thế:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Phi = 0$$

Nghiệm tổng quát của phương trình này có dạng:

$$\Phi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad \text{với} \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar = p/\hbar$$

Vì giếng thế là vô hạn nên hạt không thể ra ngoài giếng được, hàm sóng ở ngoài giếng là bằng không. Ngoài ra, để hàm sóng biến thiên liên tục thì ở hai vách giếng nó cũng phải bằng không:

$$\Phi(0) = 0$$
$$\Phi(a) = 0$$

Suy ra:

$$B = 0$$
$$\sin(ka) = 0 \;\Leftrightarrow\; k = n\pi/a \quad n = 1,2,\ldots$$

Do đó hàm sóng dừng cũng phụ thuộc vào số lượng tử năng lượng *n*:

$$\Phi_n(x) = A \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right)$$

Từ điều kiện lượng tử hóa trên đây đối với *k*, chúng ta cũng có thể tìm lại năng lượng của hạt như trong (10):

$$E_n = \frac{(\hbar k)^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = n^2 \frac{h^2}{8ma^2}$$

Cuối cùng, chúng ta dùng điều kiện chuẩn hóa của hàm sóng (3) để xác dịnh hằng số *A*, kết quả thu được là $A = \sqrt{2/a}$. Vậy hàm sóng dừng của hạt trong giếng thế có dạng:

$$\Phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right) \tag{11}$$

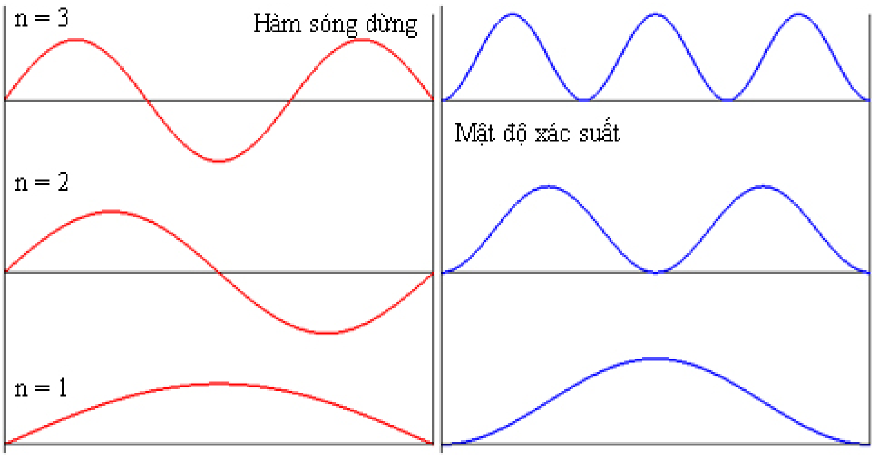
Hàm sóng (phụ thuộc thời gian) sẽ là:

$$\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right) \tag{12}$$

Từ đó chúng ta tìm được mật độ xác suất của hạt trong giếng thế vô hạn:

$$|\Psi_n(x,t)|^2 = \Psi_n \Psi_n^* = \frac{2}{a} \sin^2\left(n \frac{\pi}{a} x\right) \tag{13}$$

Các kết quả trên đây được minh họa trên Hình 4.



Hình 4. Hàm sóng dừng và mật độ xác suất của hạt trong giếng thế vô hạn một chiều.

5 Toán tử trong cơ học lượng tử

Chúng ta đã biết là trong cơ học lượng tử chuyển động của một hạt được mô tả bằng hàm sóng. Các bạn có thể hỏi: thế còn các đại lượng vật lý đặc trưng cho hạt thì sao? Làm thế nào để tìm các đại lượng vật lý như động lượng, năng lượng v.v..., một khi chúng ta đã có hàm sóng? Câu trả lời sẽ bắt đầu bằng khái niệm *toán tử*.

5.1 Toán tử là gì?

Toán tử là một phép biến đổi bất kỳ được thực hiện trên một hàm số.

Ví dụ:

Toán tử lấy đạo hàm theo *x*, ký hiệu là $\hat{\partial}_x$, được định nghĩa bởi $\hat{\partial}_x f = \partial f / \partial x$.
Toán tử nhân với một số *c,* ký hiệu là $\hat{c}$, được định nghĩa bởi $\hat{c}\, f = c\, f$.

Các bạn lưu ý là thông thường, chúng ta thêm dấu ^ ở trên ký hiệu của một toán tử.

5.2 Trị riêng và hàm riêng của một toán tử

Cho một toán tử bất kỳ $\hat{A}$, nếu tồn tại hàm Φ sao $\hat{A}\, \Phi = a\, \Phi$, với *a* là một con số, thì Φ được gọi là *hàm riêng* của toán tử $\hat{A}$, còn *a* là *trị riêng* tương ứng với hàm riêng đó.

Một toán tử có thể có nhiều hàm riêng và trị riêng, tập hợp các trị riêng được gọi là *phổ của toán tử*. Phổ của toán tử có thể là liên tục, gián đoạn hay kết hợp cả hai.

5.3 Toán tử vật lý

Trong cơ học lượng tử mỗi đại lượng vật lý đều được đặt tương ứng với một toán tử, ví dụ:

Động lượng trên phương *x* ↔ toán tử động lượng trên phương *x*, $\hat{P}_x$.
Năng lượng ↔ toán tử năng lượng $\hat{H}$.

Phổ của một toán tử vật lý chính là các giá trị có thể có của đại lượng vật lý tương ứng. Chẳng hạn, nếu hạt ở trạng thái có hàm sóng Φ và ta có $\hat{P}_x \Phi = p_x \Phi$, thì trị riêng p_x chính là động lượng của hạt ở trạng thái đó.

Bây giờ chúng ta hãy làm quen với các toán tử vật lý thường dùng.

Đại lượng vật lý	***Toán tử***
Tọa độ x, y, z	$\hat{x}=x,\ \hat{y}=y,\ \hat{z}=z$
Hình chiếu của động lượng p_x, p_y, p_z	$\hat{P}_x=-i\hbar\hat{\partial}_x,\ \hat{P}_y=-i\hbar\hat{\partial}_y,\ \hat{P}_z=-i\hbar\hat{\partial}_z$
Bình phương động lượng p^2	$\hat{P}^2=\hat{P}_x^2+\hat{P}_y^2+\hat{P}_z^2=-\hbar^2\Delta$
Động năng K	$\hat{K}=\hat{P}^2/2m=-\hbar^2\Delta/2m$
Năng lượng $E = K + U$	$\hat{H}=\hat{K}+U=-\hbar^2\Delta/2m+U$
Hình chiếu của momen động l_x, l_y, l_z	$\hat{L}_x=y\hat{P}_z-z\hat{P}_y,\ \hat{L}_y=z\hat{P}_x-x\hat{P}_z,\ \hat{L}_z=x\hat{P}_y-y\hat{P}_x$
Bình phương momen động l^2	$\hat{L}^2=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2$

Ví dụ 1:

Một hạt tự do chuyển động theo chiều dương của trục x có hàm sóng là $\Psi = A\exp\{-i(\omega t - kx)\}$, chúng ta sẽ tìm động lượng của hạt bằng cách tác động toán tử $\hat{P}_x$ lên hàm sóng đó:

$$\hat{P}_x \Psi = -i\hbar\partial_x \Psi = \hbar k \Psi$$

Vậy động lượng của hạt là $p_x = \hbar k$.

Ví dụ 2:

Năng lượng của một hạt có hàm sóng Ψ được xác định bằng cách tác động toán tử năng lượng lên hàm sóng. Nếu:

$$\hat{H}\Psi = \left(-\hbar^2\Delta/2m + U\right)\Psi = E\Psi$$

thì E là năng lượng của hạt. Đây chính là phương trình Schrödinger dừng.

5.4 Toán tử giao hoán

Chỉ khi nào hai toán tử $\hat{A}, \hat{B}$ *giao hoán* với nhau thì hai đại lượng vật lý tương ứng *A, B* mới có thể xác định được chính xác đồng thời:

$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$ ↔ *A, B* xác định chính xác đồng thời.

Ví dụ:

Hai toán tử vị trí và động lượng không giao hoán nên vị trí và động lượng không thể xác định chính xác đồng thời (nguyên lý bất định Heisenberg). Thật vậy, ta có:

$$\left(\hat{x}\,\hat{P}_x-\hat{P}_x\,\hat{x}\right)\Psi=-ih\left\{x\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\frac{\partial(x\Psi)}{\partial x}\right\}=i\hbar\Psi \;\Rightarrow\; \hat{x}\,\hat{P}_x-\hat{P}_x\,\hat{x}=i\hbar$$

5.5 Trị riêng của toán tử momen động

Toán tử hình chiếu của momen động lượng trên một phương nào đó, chẳng hạn $\hat{L}_z$, có các trị riêng gián đoạn cho bởi:

$$L_z=\hbar m_l,\quad m_l=0,\pm 1,\pm 2,\ldots \tag{14}$$

m_l được gọi là *số lượng tử từ*.

Toán tử bình phương momen động lượng $\hat{L}^2$ có các trị riêng gián đoạn cho bởi:

$$L^2=\hbar l(l+1),\quad l=0,1,2,\ldots \tag{15}$$

l được gọi là *số lượng tử quỹ đạo*.

6 Làm quen với một số bài toán cơ học lượng tử

6.1 1d – Quantum States Applet

Sau khi học cơ học Newton, các bạn đã trở nên rất quen thuộc với quỹ đạo của chất điểm trong một số bài toán chuyển động "kinh điển", chẳng hạn như rơi tự do, ném xiên, dao động điều hòa v.v... Thế bây giờ, sau khi học xong phần cơ sở cơ học lượng tử, thử hỏi các bạn có hình dung được sóng vật chất trong một số trường hợp tiêu biểu chưa?

Để giúp các bạn làm quen với lời giải của phương trình Schrödinger dừng trong một số bài toán cơ học lượng tử, tôi xin giới thiệu sau đây một Applet do Paul Falstad (http://www.falstad.com/mathphysics.htm) viết. Để bắt đầu, các bạn click vào liên kết sau đây: 1d – Quantum States Applet.

6.2 Giải thích thuật ngữ tiếng Anh

Nếu cần trợ giúp về thuật ngữ chuyên môn tiếng Anh dùng trong Applet này, các bạn hãy tham khảo bảng sau đây:

Anh	***Việt***
Infinite well	Giếng thế vô hạn
Set eigenstate	Chọn trạng thái riêng (hay hàm riêng)
Normalize	Chuẩn hóa
Ground state	Trạng thái cơ bản
Maximize	Làm cho (biên độ hàm sóng) cực đại
Rescale graphs	Thay đổi thang vẽ hình ảnh
Simulation speed	Tốc độ mô phỏng (sự thay đổi nhanh, chậm của hàm sóng)

Anh	***Việt***
Resolution	Độ phân giải hình ảnh
Particle mass	Khối lượng hạt
Well width	Bề rộng giếng
Energy	Năng lượng
Position	Vị trí
Momentum	Động lượng
Wave function	Hàm sóng
Probability	Xác suất
Uncertainty, uncertainties	Độ bất định (số ít, số nhiều)
State phasor	Pha của trạng thái, tức là phần phụ thuộc thời gian của hàm sóng

6.3 Hướng dẫn

Các bạn lưu ý là applet này khảo sát rất nhiều bài toán với nhiều lựa chọn khác nhau nên các bạn có thể thấy khó hiểu. Nếu vậy các bạn có thể làm quen với nó theo hướng dẫn sau đây:

- Trong menu "View", các bạn hãy bỏ không đánh dấu trước các mục "Momentum", "State Phasors" và "Expectation Values", chỉ để lại "Energy" và "Position". Cũng trong menu này, dưới mục "Wave Function" các bạn hãy chọn "Probability". Làm như vậy để applet chỉ hiển thị các mức năng lượng, hàm sóng và mật độ xác suất.
- Trong danh sách mở xuống thứ nhất ở bên phải của applet, các bạn thấy "Setup:Infinite Well", cứ giữ nguyên như thế vì chúng ta muốn khảo sát bài toán Giếng thế vô hạn.
- Trong danh sách mở xuống thứ hai ở bên phải của applet, các bạn thấy "Mouse=Create Gaussian", hãy click vào mũi tên mở xuống để mở danh sách và chọn "Mouse=Set Eigenstate", như thế chúng ta chọn trạng thái bằng cách click vào một mức năng lượng.
- Đánh dấu vào ô "Stopped" để ngưng hiệu ứng động theo thời gian, vì ngay lúc này chúng ta chỉ muốn coi hàm sóng dừng.
- Giảm "Well Width" bằng cách kéo thanh trượt tương ứng về bên trái, cho đến khi thấy chỉ còn một ít mức năng lượng tách rời nhau rõ ràng.
- Click vào một mức năng lượng để xem hàm sóng dừng và mật độ xác suất ứng với mức đó. Đường màu vàng là hàm sóng dừng, còn đường cong có tô màu trắng bên trong là mật độ xác suất.
- Sau khi đã quen với một bài toán, các bạn có thể chọn một bài toán khác trong danh sách mở xuống thứ nhất ở bên phải của applet. Ngoài ra, hãy đọc phần hướng dẫn chi tiết của tác giả Paul Falstad để khai thác hết tính năng của applet.