

CHƯƠNG 1

HÀM SÓNG

1.1 PHƯƠNG TRÌNH SCHRÖDINGER

Hãy hình dung một hạt có khối lượng m , chuyển động dọc trục x , chịu một lực cụ thể $F(x, t)$ nào đó (Hình 1.1). Cách làm của cơ học cổ điển là xác định vị trí của hạt ở thời điểm cho trước bất kỳ : $x(t)$. Một khi ta biết điều đó, ta có thể tìm ra vận tốc ($v = dx/dt$), xung lượng ($p = mv$), động năng ($T = (1/2)mv^2$), hoặc bất cứ biến động lực học nào khác. Và làm thế nào ta xác định được $x(t)$? Ta áp dụng định luật hai Newton : $F = ma$. (Đối với những hệ bảo toàn – là loại duy nhất ta sẽ xem xét, và, may mắn là, loại duy nhất xuất hiện ở cấp độ vi mô – lực có thể được biểu diễn là đạo hàm của một hàm thế năng,¹ $F = -\partial V/\partial x$, và định luật Newton là $m d^2x/dt^2 = -\partial V/\partial x$.) Điều này, cùng với các điều kiện ban đầu phù hợp (thông thường là vị trí và vận tốc tại $t = 0$), xác định $x(t)$.

¹ Lực từ là một trường hợp đặc biệt, nhưng không phải lo lắng về nó bây giờ. Tiện đây, ta sẽ giả sử trong toàn bộ cuốn sách này rằng chuyển động là phi tương đối tính ($v \ll c$).

Cơ học lượng tử tiếp cận cùng vấn đề này một cách khá khác biệt. Trong trường hợp này cái ta sẽ tìm là **hàm sóng** của hạt, $\Psi(x, t)$, và ta có nó bằng cách giải **phương trình Schrödinger** :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi. \quad [1.1]$$

Ở đây i là căn bậc hai của -1, và $\hbar$ là hằng số Planck – hay thay vào đó, hằng số *ban đầu* của nó (h) chia cho 2 :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054572 \times 10^{-34} \text{ J s}. \quad [1.2]$$

Phương trình Schrödinger đóng một vai trò tương tự về mặt logic với định luật hai Newton. Cho trước những điều kiện ban đầu phù hợp (thông thường, $\Psi(x, 0)$), phương trình Schrödinger xác định $\Psi(x, t)$ cho mọi thời điểm ở tương lai, cũng như trong cơ học cổ điển, định luật Newton xác định $x(t)$ cho mọi thời điểm ở tương lai.²

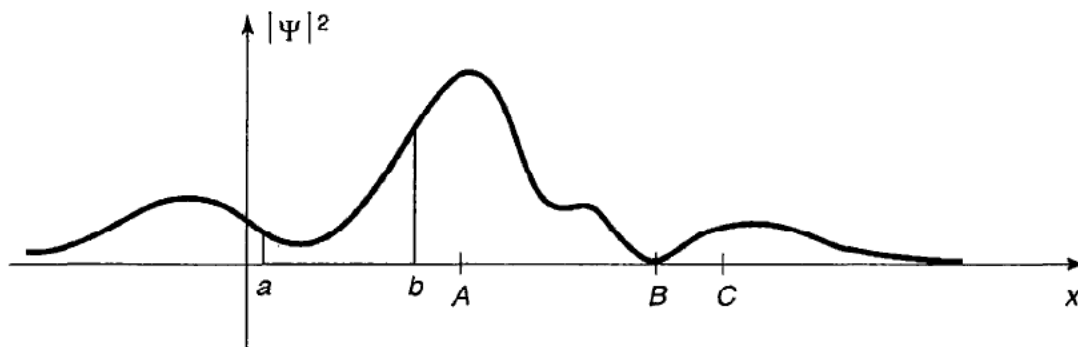
1.2 DIỄN GIẢI THỐNG KÊ

Nhưng chính xác thì « hàm sóng » này là cái gì, và nó làm được gì cho bạn một khi bạn có nó? Rốt cuộc, một hạt, do bản tính của nó, định xứ tại một điểm, còn hàm sóng này (như tên gọi của nó chỉ ra) trải ra trong không gian (nó là một hàm của x , với bất kỳ thời điểm t cho trước). Làm sao một đối tượng như vậy lại biểu diễn trạng thái của một *hạt*? Câu trả lời được cung cấp nhờ sự **diễn giải thống kê** về hàm sóng của Born, nói rằng $|\Psi(x, t)|^2$ cho *xác suất* tìm hạt ở điểm x , tại thời điểm t – hay chính xác hơn,³

$$\int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = \{\text{xác suất tìm thấy hạt giữa } a \text{ và } b, \text{ ở thời điểm } t\} \quad [1.3]$$

³ Bản thân hàm sóng là phức, nhưng $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$ (trong đó Ψ^* là liên hợp phức của Ψ) là thực và không âm – dĩ nhiên một xác suất phải như vậy.

Xác suất là *diện tích* bên dưới đồ thị của $|\Psi|^2$. Đối với hàm sóng trong hình 1.2, bạn có khả năng tìm thấy hạt trong lân cận của điểm A, ở đó $|\Psi|^2$ lớn, và tương đối ít khả năng tìm thấy nó gần điểm B.



Hình 1.2 : Một hàm sóng điển hình. Diện tích tô mờ biểu diễn xác suất tìm thấy hạt giữa a và b . Hạt có khả năng được tìm thấy gần A, và không có nhiều khả năng được tìm thấy gần B.

Diễn giải thông kê đưa vào cơ học lượng tử một kiểu **bất định**, vì ngay cả khi bạn biết mọi thứ lý thuyết này phải nói cho bạn về hạt (tức hàm sóng của nó), bạn vẫn không thể đoán trước một cách chắc chắn kết quả của một thí nghiệm đơn giản để đo vị trí của nó – mọi cái cơ học lượng tử phải đề xuất là thông tin *thống kê* về các kết quả *khả dĩ*. Sự bất định này gây nhiều khó khăn sâu sắc cho các nhà vật lý cũng như các triết gia, và thật tự nhiên khi hỏi rằng liệu nó là một hiện tượng của tự nhiên, hay một khiếm khuyết trong lý thuyết.

Giả sử tôi đo vị trí của hạt, và tôi thấy nó ở một điểm C.⁴ *Câu hỏi* : Hạt ở đâu *trước khi* tôi thực hiện phép đo ? Có ba câu trả lời hợp lý cho câu hỏi này, và chúng dùng để đặc trưng các trường phái suy luận chính liên quan đến tính bất định lượng tử :

⁴ Dĩ nhiên, không có phép đo nào chính xác một cách hoàn hảo : ý tôi là hạt được tìm thấy trong lân cận của C, trong giới hạn cho phép của thiết bị.

1. Lập trường **duy thực** : *Hạt đã ở C*. Điều này rõ ràng có vẻ là một câu trả lời hợp lý, và nó là lập trường mà Einstein ủng hộ : Tuy nhiên lưu ý rằng nếu điều này đúng thì cơ học lượng tử là một lý thuyết *không hoàn chỉnh*, vì hạt *thực sự đã ở C*, và cơ học lượng tử không thể nói cho ta biết điều đó. Đối với nhà duy thực, tính bất định không phải là một hiện tượng của tự nhiên, mà là sự phản ánh của điều không biết ở ta. Như d'Espagnat đã nói, « vị trí của hạt không bao giờ bất định, mà đơn thuần là người làm thí nghiệm không biết. »⁵ Rõ ràng Ψ không phải là toàn bộ câu chuyện – cần thêm thông tin nào đó (được biết là một **biến ẩn**) để mô tả hạt một cách đầy đủ.

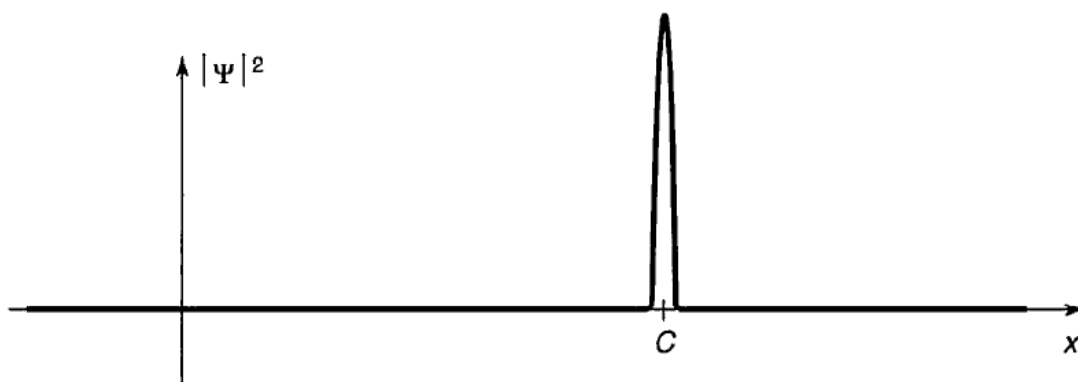
2. Lập trường **chính thống** : *Hạt thực sự đã không ở đâu cả*. Chính việc đo đã bắt hạt nằm một chỗ (mặc dầu làm thế nào và tại sao nó quyết định nằm ở điểm C ta không dám hỏi). Jordan nói một cách gần như quả quyết : « Các quan sát không chỉ *ảnh hưởng* cái được đo, chúng *tạo ra* nó ... Ta *bắt* (hạt) lấy một vị trí xác định. »⁶ Quan điểm này (được gọi là **diễn giải Copenhagen**), là do Bohr và các môn đệ. Đối với các nhà vật lý đây lúc nào cũng là lập trường được chấp nhận rộng rãi nhất. Tuy nhiên lưu ý rằng nếu nó đúng, có cái gì đó rất kỳ về việc đo – cái mà hơn nửa thế kỷ tranh cãi hầu như không làm sáng tỏ được.

3. Lập trường **bất khả tri** : *Từ chối trả lời*. Điều này không ngờ ngẩn như ta thấy – rất cuộc, có nghĩa gì khi khẳng định về trạng thái của một hạt *trước* khi đo, khi cách duy nhất để biết liệu bạn đúng hay không là thực hiện một phép đo, trong trường hợp đó cái bạn có không

còn là « trước khi đo ? » Nó là siêu hình học (theo nghĩa xấu của từ này) khi lo lắng về cái không thể được kiểm chứng do bản chất của nó. Pauli nói rằng : « Ta không nên nghĩ nhiều về vấn đề liệu cái mà ta không thể biết gì cả về nó có tồn tại như vậy, cũng như hỏi câu hỏi xa xưa là có bao nhiêu thiên thần có thể ngồi trên đầu một cây kim. »⁷ Trong nhiều thế kỷ đây là lập trường « rút lui » của hầu hết các nhà vật lý : Họ cố gắng đưa cho bạn câu trả lời chính thống, nhưng nếu bạn ngoan cố họ sẽ quay về câu trả lời bất khả tri, và kết thúc buổi nói chuyện.

Mãi đến gần đây, cả ba lập trường (duy thực, chính thống và bất khả tri) đều có những người ủng hộ. Nhưng năm 1964 John Bell làm cộng đồng vật lý ngạc nhiên khi chứng tỏ rằng có một sự khác nhau *quan sát được* về việc liệu hạt có một vị trí chính xác (mặc dù không được biết) trước phép đo, hay không. Phát minh của Bell đã loại bỏ hữu hiệu thuyết bất khả tri luận với tư cách là một khả năng có thể tồn tại, và đặt ra một câu hỏi *thực nghiệm* liệu 1 hoặc 2 là lựa chọn đúng. Tôi sẽ trở lại câu chuyện này ở cuối cuốn sách, khi đó bạn sẽ ở một vị trí tốt hơn để hiểu lập luận của Bell ; hiện giờ, chỉ cần nói rằng các thí nghiệm đã xác nhận một cách dứt khoát cách diễn giải chính thống.⁸ Một hạt *không có* một vị trí chính xác trước phép đo, không khác các gợn sóng trên mặt hồ ; chính quá trình đó cần một con số cụ thể, và do đó theo một nghĩa nào đó *tạo ra* kết quả rõ ràng, chỉ bị giới hạn bởi trọng số thống kê do hàm sóng qui định.

Nếu tôi thực hiện một phép đo *thứ hai ngay sau* phép đo thứ nhất thì sao ? Liệu tôi có thu lại được C, hay việc đo tạo ra một số hoàn toàn mới mỗi lần đo ? Về câu hỏi này mọi người đều đồng ý là : Một phép đo lặp lại (lên cùng một hạt) phải thu được cùng giá trị. Thật vậy sẽ khó để chứng minh rằng hạt đã thực sự ở C trong lần đo đầu, nếu điều này không thể được khẳng định bằng cách lặp lại ngay phép đo. Liệu cách diễn giải chính thống có giải thích việc phép đo thứ hai buộc phải đưa tới giá trị C ? Rõ ràng phép đo đầu tiên làm thay đổi triệt để hàm sóng, sao cho bây giờ nó có đỉnh nhọn quanh C (Hình 1.3). Ta nói rằng hàm sóng **suy sụp**, do việc đo, tới một đỉnh tại điểm C (nó trải ra ngay, theo phương trình Schrödinger, nên phép đo thứ hai phải được thực hiện nhanh). Khi đó có hai kiểu quá trình vật lý hoàn toàn khác biệt : những quá trình « bình thường », trong đó hàm sóng tiến triển một cách từ từ theo phương trình Schrödinger và « các quá trình đo, » trong đó Ψ đột ngột suy sụp một cách không liên tục.⁹



Hình 1.3 : Suy sụp hàm sóng : đồ thị của $|\Psi|^2$ ngay sau khi một phép đo tìm thấy hạt ở C.

1.3 XÁC SUẤT

1.3.1 Biến rời rạc

1.3.2 Biến liên tục

1.4 CHUẨN HÓA HÀM SÓNG

Bây giờ ta quay trở lại diễn giải thống kê của hàm sóng (Pt 1.3), nói rằng $|\Psi(x, t)|^2$ là mật độ xác suất để tìm thấy hạt ở điểm x , tại thời điểm t . Theo đó (Pt 1.16) tích phân của $|\Psi|^2$ phải bằng 1 (hạt phải ở đâu đó) :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad [1.20]$$

Không có điều này, diễn giải thống kê không có nghĩa.

Tuy nhiên, yêu cầu này sẽ làm phiền bạn : Rốt cuộc, hàm sóng được cho là được xác định bằng phương trình Schrödinger – ta không thể áp đặt thêm một điều kiện lên Ψ mà không kiểm tra xem hai điều này có tương thích không. Nhìn sơ qua Pt 1.1 cho thấy rằng nếu $\Psi(x, t)$ là một nghiệm, thì $A\Psi(x, t)$ cũng vậy, trong đó A là một hằng số (phức) bất kỳ. Khi đó, cái ta phải làm là chọn thừa số nhân không xác định này sao cho đảm bảo rằng Pt. 1.20 được thỏa. Quá trình này được gọi là **chuẩn hóa** hàm sóng. Đối với một số nghiệm của phương trình Schrödinger tích phân này bằng *vô cùng* ; trong trường hợp đó không có thừa số nhân nào làm nó bằng 1. Điều này cũng đúng đối với nghiệm tầm thường $\Psi = 0$. Những nghiệm **không chuẩn hóa được** như vậy không thể biểu diễn các hạt, và phải được bỏ đi. Những trạng thái nhận biết được về mặt vật lý ứng với các nghiệm **bình phương khả tích** của phương trình Schrödinger.¹¹

¹¹ Rõ ràng $\Psi(x, t)$ phải tiến tới không nhanh hơn $1/\sqrt{|x|}$, khi $|x| \rightarrow \infty$. Nhân đây sự chuẩn hóa chỉ cố định mô đun của A ; pha của nó vẫn không được xác định. Tuy nhiên, như ta sẽ thấy, pha không mang ý nghĩa vật lý nào.

Nhưng chờ một chút ! Giả sử tôi đã chuẩn hóa hàm sóng tại thời điểm $t = 0$. Làm sao tôi biết rằng nó *vẫn* sẽ được chuẩn hóa, khi thời gian trôi qua, và Ψ tiến triển ? (Bạn không thể cứ *tái* chuẩn hóa hàm sóng, vì khi đó A trở thành một hàm của t , và bạn không còn có một nghiệm của phương trình Schrödinger.) May mắn là, phương trình Schrödinger có tính chất đặc biệt rằng nó tự động duy trì sự chuẩn hóa của hàm sóng – không có đặc điểm quan trọng này phương trình Schrödinger sẽ không tương thích với diễn giải thống kê, và toàn bộ lý thuyết sẽ sụp đổ.

Điều này quan trọng, nên ta phải dừng lại để chứng minh cẩn thận. Bắt đầu với

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 dx. \quad [1.21]$$

(Lưu ý rằng tích phân này là một hàm chỉ của t , nên tôi dùng một đạo hàm toàn phần (d/dt) trong biểu thức đầu, nhưng hàm dưới dấu tích phân là một hàm của x cũng như của t , nên nó là một đạo hàm riêng ($\partial/\partial t$) trong biểu thức thứ hai.) Nhờ qui tắc đạo hàm của tích,

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi. \quad [1.22]$$

Bây giờ phương trình Schrödinger nói rằng

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V \Psi. \quad [1.23]$$

và do đó cũng bằng (lấy liên hợp phức của Pt 1.23)

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V \Psi^*, \quad [1.24]$$

nên

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right]. \quad [1.25]$$

Bây giờ tích phân trong Pt 1.21 có thể được tính tường minh :

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \Big|_{-\infty}^{+\infty}. \quad [1.26]$$

Nhưng $\Psi(x, t)$ phải tiến tới không khi x tiến tới $(\pm)$ vô cùng – nếu không hàm sóng sẽ không chuẩn hóa được.¹² Theo đó

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 0, \quad [1.27]$$

và do đó tích phân này bằng *hằng số* (độc lập với thời gian) ; nếu Ψ được chuẩn hóa tại $t = 0$, nó *vẫn* được chuẩn hóa tại mọi thời điểm tương lai. ĐPCM

1.5 XUNG LƯỢNG

Đối với một hạt trong trạng thái Ψ , giá trị trung bình của x bằng

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx. \quad [1.28]$$

Điều này có nghĩa gì ? Rõ ràng nó *không* có nghĩa rằng nếu bạn đo vị trí của một hạt nhiều lần, $\int x |\Psi|^2 dx$ bằng trung bình của các kết quả bạn sẽ thu được. Trái lại : phép đo đầu tiên (có kết quả không xác định) sẽ làm suy sụp hàm sóng tới một đỉnh tại giá trị thực sự thu được, và các phép đo sau đó (nếu chúng được thực hiện nhanh) sẽ chỉ lặp lại cùng kết quả. Thay vào đó, $\langle x \rangle$ bằng trung bình của các phép đo được thực hiện lên những hạt ở *cùng trạng thái* Ψ , nghĩa là hoặc bạn phải tìm cách đưa hạt trở về trạng thái ban đầu sau mỗi lần đo, hoặc bạn phải chuẩn bị một **tập hợp** các hạt, mỗi hạt trong cùng trạng thái Ψ , và đo vị trí của chúng : $\langle x \rangle$ bằng trung bình của những kết quả *này*. (Tôi muốn chụp một dãy các cái chai trên một cái kệ, mỗi cái chai chứa một hạt trong trạng thái Ψ (so với tâm của chai). Một nghiên cứu sinh có một cây thước được chỉ định cho mỗi cái chai, và mỗi khi được ra hiệu họ đo vị trí của những hạt tương ứng. Khi đó ta xây dựng một biểu đồ cột các kết quả, nó phải khớp với $|\Psi|^2$, và tính trung bình, phải phù hợp với $\langle x \rangle$. (Dĩ nhiên, vì ta chỉ dùng một mẫu hữu hạn, ta không thể trông chờ sự phù hợp hoàn hảo, nhưng càng dùng nhiều chai, ta càng gần tới kết quả chính xác.)) Tóm lại, *giá trị trung bình bằng trung bình của các phép đo được lặp lại trên một tập hợp các hệ được chuẩn bị như nhau*, không phải trung bình của các phép đo được lặp lại trên một cùng một hệ.

Bây giờ, khi thời gian trôi qua, $\langle x \rangle$ sẽ thay đổi (vì sự phụ thuộc thời gian của Ψ), và ta có thể quan tâm đến việc nó di chuyển nhanh ra sao. Xét Pt 1.25 và 1.28, ta thấy rằng¹³

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \int x \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \int x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx. \quad [1.29]$$

¹³ Để giữ phương trình không quá rườm rà tôi sẽ bỏ hết các cận của tích phân.

Biểu thức này có thể được đơn giản bằng cách dùng tích phân từng phần:¹⁴

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{2m} \int \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx. \quad [1.30]$$

(Tôi đã dùng $\partial x / \partial x = 1$, và bỏ đi các số hạng biên, do Ψ tiến tới không ở $(\pm)$ vô cùng.) Thực hiện một tích phân từng phần nữa lên số hạng thứ hai, ta kết luận:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{m} \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx. \quad [1.31]$$

Ta phải làm gì với kết quả này? Lưu ý rằng chúng ta đang nói về « vận tốc » của trị *trung bình* của x , vốn không giống như vận tốc của hạt. Đến giờ không có gì cho phép ta tính vận tốc của một hạt. Thậm chí không rõ vận tốc *có nghĩa* gì trong cơ học lượng tử: Nếu hạt không có một vị trí xác định (trước khi đo), thì nó cũng không có một vận tốc được xác định đầy đủ. Cái ta có thể hỏi một cách hợp lý là *xác suất* thu được một giá trị cụ thể. Ta sẽ thấy trong Chương 3 cách xây dựng mật độ xác suất cho vận tốc, khi có Ψ ; vì những mục đích hiện tại sẽ chỉ cần phát biểu rằng *trị trung bình của vận tốc bằng đạo hàm theo thời gian của trị trung bình của vị trí*:

$$\langle v \rangle = \frac{d\langle x \rangle}{dt}. \quad [1.32]$$

Khi đó Pt 1.31 cho ta biết cách tính $\langle v \rangle$ trực tiếp từ Ψ .

Thật ra, ta thường làm việc với **xung lượng** ($p = mv$), thay vì vận tốc:

$$\langle p \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt} = -i\hbar \int \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx. \quad [1.33]$$

Hãy để tôi viết các biểu thức cho $\langle x \rangle$ và $\langle p \rangle$ một cách gọn mở hơn:

$$\langle x \rangle = \int \Psi^*(x) x \Psi dx, \quad [1.34]$$

$$\langle p \rangle = \int \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx. \quad [1.35]$$

Ta nói rằng **toán tử**¹⁵ x « biểu diễn » vị trí, và toán tử $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ « biểu diễn » xung lượng, trong cơ học lượng tử; để tính các giá trị trung bình ta « kẹp » toán tử tương ứng giữa Ψ^* và Ψ , và lấy tích phân.

¹⁵ Một toán tử là một hướng dẫn để làm gì đó cho hàm theo sau nó. Toán tử vị trí nói bạn nhân với x ; toán tử xung lượng nói bạn lấy đạo hàm theo x (và nhân kết quả cho $-i\hbar$). Trong quyển sách này mọi toán tử sẽ là đạo hàm (d/dt , d^2/dt^2 , $\partial^2/\partial x \partial y$, v.v. hoặc các nhân tử (2 , i , x^2 , v.v.), hoặc kết hợp của những cái này.

Điều này hay, nhưng còn những đại lượng khác ? Rõ ràng, *mọi* biến động lực học cổ điển có thể được biểu diễn theo vị trí và xung lượng. Chẳng hạn, động năng bằng

$$T = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m},$$

và momen xung lượng bằng

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times m\mathbf{v} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

(dĩ nhiên đại lượng sau không xuất hiện trong chuyển động một chiều). Để tính trị trung bình của *bất cứ* đại lượng nào như vậy, $Q(x, p)$, ta chỉ việc thay mỗi p bằng $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$, đưa toán tử thu được vào giữa Ψ^* và Ψ , và lấy tích phân :

$$\langle Q(x, p) \rangle = \int \Psi^* Q \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx. \quad [1.36]$$

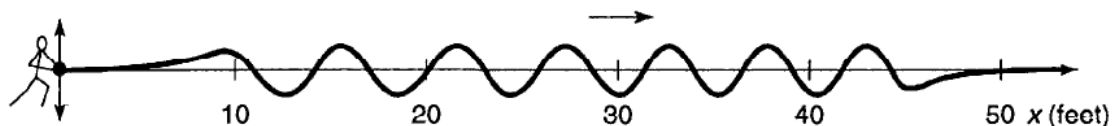
Chẳng hạn, trị trung bình của động năng bằng

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx. \quad [1.37]$$

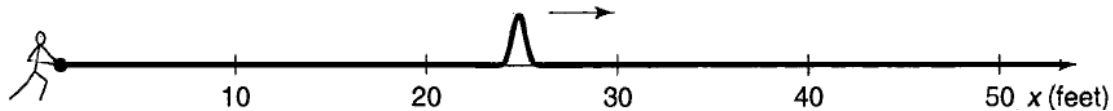
Pt 1.36 là một công thức để tính trị trung bình của một đại lượng động lực học bất kỳ, cho một hạt trong trạng thái Ψ ; nó bao gồm Pt 1.34 và 1.35 như những trường hợp đặc biệt. Trong mục này tôi đã thử làm Pt 1.36 trông có vẻ hợp lý, khi có diễn giải thống kê của Born, nhưng sự thật thì điều này biểu diễn một cách làm việc mới triệt để (khi so với cơ học cổ điển) rằng tập dùng nó sẽ là một ý tưởng tốt trước khi ta trở lại (trong Chương 3) và đặt nó trên một nền tảng lý thuyết vững chắc hơn. Hiện giờ, nếu bạn thích xem nó là một tiên đề, điều đó tốt cho tôi.

1.6 NGUYÊN LÝ BẤT ĐỊNH

Hãy hình dung rằng bạn đang giữ một đầu của một sợi dây rất dài, và bạn tạo ra một sóng bằng cách lắc nó lên xuống nhịp nhàng (Hình 1.7). Nếu ai đó hỏi bạn « Chính xác thì sóng ở đâu ? » bạn có thể nghĩ rằng anh ta hơi điên : Sóng không ở đâu cả – nó trải ra trên 50 feet. Mặt khác, nếu anh ta hỏi bạn *bước sóng* của nó bằng bao nhiêu, bạn có thể đưa anh ta một câu trả lời hợp lý : khoảng 6 feet. Trái lại, nếu bạn cho sợi dây một cái lắc đột ngột (Hình 1.8), bạn sẽ thu được một chỗ lồi lên tương đối hẹp di chuyển dọc cái dây. Lần này câu hỏi đầu tiên (sóng ở đâu ?) là một câu hỏi hợp lý, và câu hỏi thứ hai (bước sóng bằng bao nhiêu ?) có vẻ điên – nó không tuần hoàn, nên làm sao bạn có thể gán một bước sóng cho nó ? Dĩ nhiên, bạn có thể vẽ những trường hợp trung gian, trong đó sóng được định xứ *khá* tốt và bước sóng được xác định *khá* tốt, nhưng ở đây có một điều không thể tránh được : vị trí của một sóng càng chính xác, bước sóng của nó càng kém chính xác, và ngược lại.¹⁶ Một định lý trong giải tích Fourier làm rõ điều này, nhưng hiện tại tôi chỉ quan tâm đến lập luận định tính.



Hình 1.7 : Một sóng có một *bước sóng* được xác định (khá) tốt, nhưng có một *vị trí* bị xác định tệ.



Hình 1.8 : Một sóng có một *vị trí* được xác định (khá) tốt, nhưng có một *bước sóng* bị xác định tệ

Dĩ nhiên điều này áp dụng cho *mọi* hiện tượng sóng, và do đó đặc biệt cho hàm sóng của cơ học lượng tử. Bây giờ bước sóng của Ψ liên hệ với xung lượng của hạt bằng **hệ thức de Broglie** :¹⁷

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}. \quad [1.39]$$

¹⁷ Tôi sẽ chứng minh điều này sau. Nhiều tác giả xem hệ thức de Broglie là một *tiên đề*, từ đó họ suy ra sự liên hệ của xung lượng với toán tử $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$. Mặc dù đây là một cách tiếp cận sáng sủa hơn về mặt khái niệm, nó liên quan đến những phức tạp về toán học mà tôi muốn để lại sau.

Do đó một sự trải rộng của *bước sóng* ứng với một sự *trải rộng* của xung lượng, và quan sát tổng quát của ta nói rằng vị trí của hạt được xác định càng chính xác, xung lượng của nó càng kém chính xác. Về mặt định lượng,

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}, \quad [1.40]$$

Trong đó σ_x là độ lệch chuẩn của x , và σ_p là độ lệch chuẩn của p . Đây là **nguyên lý bất biến Heisenberg** nổi tiếng. (Ta sẽ chứng minh nó trong Chương 3, nhưng tôi muốn đề cập đến nó ngay bây giờ, để bạn có thể kiểm tra nó trong các ví dụ trong Chương 2.)

Hãy hiểu nguyên lý bất định *có nghĩa* gì : Cũng như phép đo vị trí, phép đo xung lượng cho câu trả lời chính xác – sự « *trải ra* » ở đây chỉ việc những phép đo lên những hệ được chuẩn bị giống nhau không đưa đến cùng kết quả. Bạn có thể, nếu bạn muốn, xây dựng một trạng thái sao cho các phép đo vị trí lặp lại sẽ rất gần nhau (bằng cách làm Ψ có một « *đỉnh* » định xứ), nhưng bạn sẽ trả giá : phép đo xung lượng lên trạng thái này sẽ bị phân tán rất nhiều. Hoặc bạn có thể chuẩn bị một trạng thái có một xung lượng đo được (bằng cách làm Ψ là một sóng hình sin dài), nhưng trong trường hợp đó, phép đo vị trí sẽ bị phân tán rất nhiều. Và dĩ nhiên, nếu bạn cảm thấy rất tệ bạn có thể tạo ra một trạng thái sao cho cả vị trí lẫn xung lượng không được xác định tốt : Pt 1.40 là một *bất đẳng thức*, và không có giới hạn σ_x và σ_p có thể *lớn* đến cỡ nào – chỉ làm Ψ một đường cong dài có nhiều đỉnh và đáy và không có cấu trúc tuần hoàn.

CHƯƠNG 2

PHƯƠNG TRÌNH SCHRÖDINGER ĐỘC LẬP THỜI GIAN

2.1 TRẠNG THÁI DỪNG

Trong Chương 1 ta đã nói nhiều về hàm sóng, và cách bạn dùng nó để tính nhiều đại lượng quan tâm. Giờ đã tới lúc thôi chần chừ và đối mặt với câu hỏi trước một cách lô gích : làm sao thu được $\Psi(x, t)$? Ta cần giải phương trình Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi. \quad [2.1]$$

Cho một thế cụ thể¹ $V(x, t)$. Trong chương này (và hầu hết cuốn sách này) tôi sẽ giả định rằng V độc lập với t . Trong trường hợp đó phương trình Schrödinger có thể được giải bằng **phương pháp tách biến** (cách làm đầu tiên của nhà vật lý với bất cứ phương trình đạo hàm riêng nào) : Ta tìm nghiệm là các *tích* đơn giản,

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \varphi(t). \quad [2.2]$$

Trong đó ψ (viết *thường*) là một hàm của riêng x , và φ là một hàm của riêng t . Mới nhìn qua, điều này là một sự hạn chế phi lý, và ta không thể hy vọng thu được chỉ một tập con nhỏ xíu của tất cả các nghiệm theo cách này. Nhưng khoan đã, vì các nghiệm mà ta thu được lại có vai trò lớn. Hơn nữa (như thường đúng cho phép tách biến) cuối cùng ta sẽ có thể gán các nghiệm riêng lẻ lại theo một cách để *xây dựng* nghiệm tổng quát nhất.

¹ Sẽ một nếu cứ nói « hàm thế năng », nên hầu hết mọi người chỉ gọi V là « thế », ngay cả khi điều này có thể tạo ra sự nhầm lẫn với *điện thế*, vốn thực sự là thế năng *trên đơn vị điện tích*.

Đối với các nghiệm tách được ta có

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \psi \frac{d\varphi}{dt}, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{d^2 \psi}{dx^2} \varphi$$

(bây giờ, các đạo hàm *thường*), và phương trình Schrödinger là

$$i\hbar \psi \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} \varphi + V\psi\varphi.$$

Hay, chia toàn bộ cho $\psi\varphi$:

$$i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V. \quad [2.3]$$

Bây giờ, vế trái là một hàm của riêng t , và vế phải là một hàm của riêng x .² Cách duy nhất có thể đúng là cả hai vế bằng *hằng số* – nếu không, bằng cách thay đổi t , ta có thể thay đổi vế trái mà không đụng đến vế phải, và cả hai không còn bằng nhau nữa. (Đó là một lập luận tinh tế nhưng quan trọng, nên nếu nó mới với bạn, hãy chắc chắn dừng lại và suy nghĩ về nó.) Vì những lý do sẽ xuất hiện một lát nữa, ta sẽ gọi hằng số tách biến là E . Khi đó

$$i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = E,$$

hay

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{iE}{\hbar}\varphi, \quad [2.4]$$

và

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V = E,$$

hay

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi.} \quad [2.5]$$

² Lưu ý rằng điều này sẽ *không* đúng nếu V là một hàm của t lẫn x .

Việc tách biến đã đưa một phương trình đạo hàm *riêng* thành hai phương trình vi phân *thường* (Pt 2.4 và 2.5). Phương trình đầu (Pt 2.4) dễ giải (chỉ cần nhân hai vế cho dt và lấy tích phân); nghiệm tổng quát bằng $C\exp(-iEt/\hbar)$, nhưng ta cũng có thể đưa hằng số C vào ψ (vì đại lượng quan trọng là tích $\psi\varphi$). Khi đó

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}. \quad [2.6]$$

Phương trình thứ hai (Pt 2.5) được gọi là **phương trình Schrödinger độc lập thời gian**; ta có thể không cần xét thêm nó đến khi thế $V(x)$ được xác định.

Phần còn lại của chương này sẽ dành cho việc giải phương trình Schrödinger độc lập thời gian, cho một số thế đơn giản. Nhưng trước khi tôi làm điều đó bạn có lý khi hỏi: *Điều gì là hay ho về các nghiệm tách được?* Rốt cuộc, *hầu hết* các nghiệm của phương trình Schrödinger (độc lập thời gian) *không* có dạng $\psi(x)\varphi(t)$. Tôi đưa ra ba câu trả lời – hai câu về vật lý và một câu về toán học:

1. Chúng là những **trạng thái dừng**. Mặc dù bản thân hàm sóng

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}, \quad [2.7]$$

(dĩ nhiên) phụ thuộc vào t , *mật độ xác suất*,

$$|\Psi(x, t)|^2 = \Psi^*\Psi = \psi^*e^{+iEt/\hbar}\psi e^{-iEt/\hbar} = |\psi(x)|^2, \quad [2.8]$$

không phụ thuộc – sự phụ thuộc thời gian bị triệt tiêu.³ Điều này cũng xảy ra khi tính trị trung bình của bất cứ biến động lực học nào; Pt 1.36 qui giản thành

$$\langle Q(x, p) \rangle = \int \psi^* Q\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right) \psi dx. \quad [2.9]$$

³ Đối với những nghiệm chuẩn hóa được, E phải là *thực* (xem bài toán 2.1(a))

Mọi trị trung bình là hằng số theo thời gian; ta cũng có thể bỏ thừa số $\varphi(t)$, và chỉ dùng ψ thay cho Ψ . (Thật vậy, ta thường xem ψ là “hàm sóng”, nhưng đây là ngôn ngữ tùy tiện có thể nguy hiểm, và sẽ quan trọng khi nhớ rằng hàm sóng thực sự luôn mang thừa số mũ phụ thuộc thời gian.) Đặc biệt, $\langle x \rangle$ là hằng số, và do đó (Pt 1.33) $\langle p \rangle = 0$. Không có gì *xảy ra* trong một trạng thái dừng.

2. Chúng là những trạng thái *có năng lượng toàn phần xác định*. Trong cơ học cổ điển, năng lượng toàn phần (động năng cộng thế năng) được gọi là **Hamiltonian**:

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad [2.10]$$

Toán tử Hamiltonian tương ứng, thu được bằng phép thế chính tắc $p \rightarrow (\hbar/i)(\partial/\partial x)$, khi đó bằng⁴

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \quad [2.11]$$

⁴ Bất cứ khi nào có thể gây nhầm lẫn, tôi sẽ đặt một dấu mũ lên toán tử, để phân biệt nó với biến động lực học mà nó biểu diễn.

Do đó phương trình Schrödinger độc lập thời gian (Pt 2.5) có thể được viết

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad [2.12]$$

và trị trung bình của năng lượng toàn phần bằng

$$\langle H \rangle = \int \psi^* \hat{H} \psi dx = E \int |\psi|^2 dx = E \int |\Psi|^2 dx = E. \quad [2.13]$$

(Lưu ý rằng sự chuẩn hóa của Ψ đưa đến sự chuẩn hóa của ψ .) Hơn nữa,

$$\hat{H}^2 \psi = \hat{H}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(E\psi) = E(\hat{H}\psi) = E^2 \psi,$$

và do đó

$$\langle H^2 \rangle = \int \psi^* \hat{H}^2 \psi dx = E^2 \int |\psi|^2 dx = E^2.$$

Nên phương sai của H bằng

$$\sigma_H^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0. \quad [2.14]$$

Nhưng nhớ rằng, nếu $\sigma = 0$, thì mỗi phần của mẫu phải chia sẻ cùng giá trị (phân bố có độ mở rộng bằng không). *Kết luận*: một nghiệm tách được có tính chất là *mỗi phép đo năng lượng toàn phần chắc chắn cho giá trị E* . (Đó là lý do tại sao tôi đã chọn ký tự này cho hằng số tách biến.)

3. Nghiệm tổng quát là một **tổ hợp tuyến tính** của các nghiệm tách được. Như ta sẽ khám phá, phương trình Schrödinger độc lập thời gian (Pt 2.5) đưa đến một tập hợp vô hạn các nghiệm ($\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$, $\psi_3(x)$, ...), mỗi nghiệm liên hệ với giá trị hằng số tách biến (E_1 , E_2 , E_3 , ...); do đó có một hàm sóng khác nhau cho mỗi **năng lượng được phép**:

$$\Psi_1(x, t) = \psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}, \quad \Psi_2(x, t) = \psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}, \quad \dots$$

Bây giờ (vì bạn có thể dễ dàng tự kiểm tra) phương trình Schrödinger (phụ thuộc thời gian) (Pt 2.1) có tính chất rằng bất cứ tổ hợp tuyến tính nào⁵ của các nghiệm chính là một nghiệm. Một khi ta đã tìm được các nghiệm tách được, thì ta có thể ngay lập tức xây dựng một nghiệm tổng quát hơn nhiều, có dạng

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-i E_n t / \hbar}. \quad [2.15]$$

⁵ Một **tổ hợp tuyến tính** của các hàm $f_1(z), f_2(z), \dots$ là một biểu thức có dạng

$$f(z) = c_1 f_1(z) + c_2 f_2(z) + \dots,$$

Trong đó $c_1, c_2, \dots$ là hằng số (phức) bất kỳ.

Thật vậy *mỗi* nghiệm của phương trình Schrödinger (phụ thuộc thời gian) có thể được viết dưới dạng này – chỉ có vấn đề tìm các hằng số đúng ($c_1, c_2, \dots$) sao cho thỏa các điều kiện ban đầu của bài toán đang xét. Bạn sẽ thấy trong những mục sau cái cách điều này được thực hiện, và trong Chương 3 ta sẽ phát biểu nó bằng một ngôn ngữ lịch lãm hơn, nhưng điểm chính là: một khi bạn đã giải phương trình Schrödinger độc lập thời gian, bạn đã làm gần xong, từ đó tới nghiệm tổng quát của phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian, về nguyên tắc, đơn giản và dễ dàng.

Rất nhiều điều đã xảy ra trong bốn trang vừa rồi, nên hãy để tôi tóm tắt lại từ góc nhìn khác hơn một chút. Đây là vấn đề chung: Bạn được cho một thế $V(x)$ (độc lập thời gian), và hàm sóng ban đầu $\Psi(x, 0)$; công việc của bạn là tìm hàm sóng, $\Psi(x, t)$, ở mọi thời điểm t sau đó. Để làm điều đó, bạn phải giải phương trình Schrödinger (phụ thuộc thời gian) (Pt 2.1). Chiến lược⁶ là đầu tiên giải phương trình Schrödinger độc lập thời gian (Pt 2.5); nói chung điều này đưa tới một tập vô hạn các nghiệm ($\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \dots$), mỗi nghiệm có một năng lượng riêng liên quan ($E_1, E_2, E_3, \dots$). Để khớp $\Psi(x, 0)$ bạn viết ra tổ hợp tuyến tính tổng quát của những nghiệm này:

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x); \quad [2.16]$$

⁶ Đôi khi bạn có thể giải phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian mà không cần đến tách biến – chẳng hạn, xem bài toán 2.49 và 2.50. Nhưng những trường hợp như vậy cực kỳ hiếm.

Điều kỳ lạ là *lúc nào* bạn cũng có thể khớp trạng thái ban đầu xác định bằng cách chọn thích hợp các hằng số $c_1, c_2, c_3, \dots$. Để xây dựng $\Psi(x, t)$ bạn chỉ cần gắn vào mỗi số hạng phần phụ thuộc thời gian đặc trưng của nó, $\exp(-i E_n t / \hbar)$:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-i E_n t / \hbar} = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x, t). \quad [2.17]$$

Bản thân các nghiệm tách được,

$$\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-i E_n t / \hbar}, \quad [2.18]$$

là những trạng thái *dừng*, theo nghĩa mọi xác suất và giá trị trung bình độc lập thời gian, nhưng tính chất này *không* có với nghiệm tổng quát (Pt 2.17); các năng lượng thì khác nhau, cho những trạng thái dừng khác nhau, và các hàm mũ không triệt tiêu, khi bạn tính $|\Psi|^2$.

Ví dụ 2.1 Giả sử một hạt bắt đầu trong một tổ hợp tuyến tính chỉ của hai trạng thái dừng

$$\Psi(x, 0) = c_1 \psi_1(x) + c_2 \psi_2(x).$$

(Để giữ mọi việc đơn giản tôi sẽ giả sử rằng các hằng số c_n và các trạng thái $\psi_n(x)$ là *thực*.) Hàm sóng $\Psi(x, t)$ ở những thời điểm tiếp theo bằng bao nhiêu? Tìm mật độ xác suất và mô tả chuyển động của nó.

Lời giải: Phần đầu thì dễ

$$\Psi(x, t) = c_1 \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar},$$

Trong đó E_1 và E_2 là các năng lượng liên hệ với ψ_1 và ψ_2 . Theo đó

$$\begin{aligned} |\Psi(x, t)|^2 &= (c_1 \psi_1 e^{iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2 e^{iE_2 t/\hbar})(c_1 \psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar}) \\ &= c_1^2 \psi_1^2 + c_2^2 \psi_2^2 + 2c_1 c_2 \psi_1 \psi_2 \cos[(E_2 - E_1)t/\hbar]. \end{aligned}$$

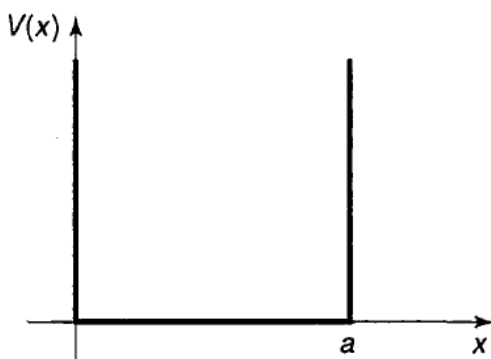
(Tôi đã dùng **công thức Euler**, $\exp i\theta = \cos\theta + i\sin\theta$, để đơn giản kết quả.) Rõ ràng mật độ xác suất *dao động* theo hàm sin, với một tần số góc $(E_2 - E_1)/\hbar$; đây chắc chắn *không* phải là một trạng thái dừng. Nhưng lưu ý rằng nó lấy một *tổ hợp tuyến tính* các trạng thái (với năng lượng khác nhau) để tạo ra chuyển động.⁷

2.2 GIẾNG VUÔNG VÔ HẠN

Giả sử

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{if } 0 \leq x \leq a, \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases} \quad [2.19]$$

(Hình 2.1). Một hạt trong thế này hoàn toàn tự do, trừ hai đầu ($x = 0$ và $x = a$), ở đó một lực vô hạn ngăn nó thoát ra ngoài. Một mô hình cổ điển sẽ là một cái xe trên một đường ray nằm ngang không ma sát, có hai cái ngăn đàn hồi tuyệt đối – nó chỉ luôn đi đi lại lại mãi mãi. (Dĩ nhiên thế này là nhân tạo, nhưng tôi khuyên bạn coi trọng nó. Mặc cho tính đơn giản của nó – hay nói khác đi chính xác vì tính đơn giản của nó – nó dùng làm một trường hợp kiểm tra để làm một cách tuyệt vời cho mọi cơ chế tương tượng sau này. Ta sẽ nhắc lại nó thường xuyên.)



Hình 2.1: Thế có dạng giếng vuông vô hạn (Pt 2.19).

Bên ngoài giếng, $\psi(x) = 0$ (xác suất tìm thấy hạt bằng không). Bên trong giếng, ở đó $V = 0$, phương trình Schrödinger độc lập thời gian (Pt 2.5) là

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad [2.20]$$

hay

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi, \quad \text{where } k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad [2.21]$$

(Bằng cách viết nó như vậy, tôi đã ngầm định rằng $E \geq 0$; ta biết từ bài toán 2.2 rằng $E < 0$ không áp dụng được.) Pt 2.21 là phương trình **dao động tử điều hòa đơn cổ điển**; nghiệm tổng quát là

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx, \quad [2.22]$$

Trong đó A và B là những hằng số tùy ý. Thông thường, các hằng số này được cố định bằng các **điều kiện biên** của bài toán. Đây là các điều kiện biên thích hợp cho $\psi(x)$? Thông thường, *cả* ψ và $d\psi/dx$ *liên tục*, nhưng ở đâu thế tiến tới vô cùng chỉ có hàm sóng liên tục. (Tôi sẽ *chứng minh* những điều kiện biên này, và xét đến trường hợp cá biệt khi $V = \infty$, trong mục 2.5; bây giờ tôi hy vọng bạn sẽ tin tôi.)

Tính liên tục của $\psi(x)$ đòi hỏi rằng

$$\psi(0) = \psi(a) = 0, \quad [2.23]$$

để kết hợp với nghiệm bên ngoài giếng. Nó nói cho ta biết điều gì về A và B ?

$$\psi(0) = A \sin 0 + B \cos 0 = B,$$

nên $B = 0$, và do đó

$$\psi(x) = A \sin kx. \quad [2.24]$$

Khi đó $\psi(a) = A \sin ka$, nên hoặc $A = 0$ (trong trường hợp này ta chỉ còn nghiệm tầm thường – không chuẩn hóa được - $\psi(x) = 0$), hoặc $\sin ka = 0$, có nghĩa là

$$ka = 0, \pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi, \dots \quad [2.25]$$

Nhưng $k = 0$ không tốt (lại nữa, điều này chỉ $\psi(x) = 0$), và các nghiệm âm không cho điều gì mới, vì $\sin(-\theta) = -\sin(\theta)$ và ta có thể đưa dấu trừ vào A . Nên các nghiệm *phân biệt* là

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad \text{có } n = 1, 2, 3, \dots \quad [2.26]$$

Thật ngạc nhiên, điều kiện biên tại $x = a$ không xác định hằng số A , mà là hằng số k , và do đó các giá trị khả dĩ của E :

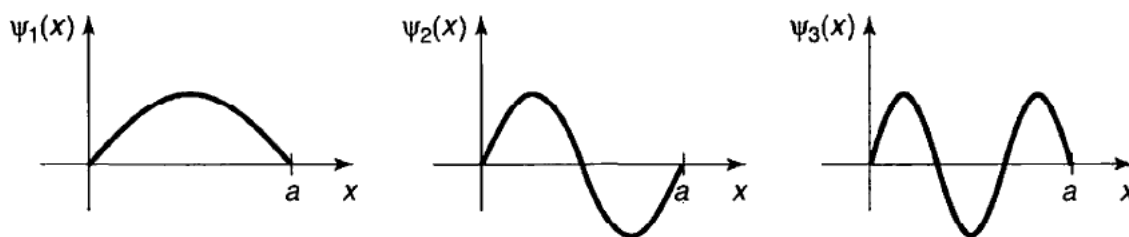
$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}.$$

[2.27]

Hoàn toàn trái với trường hợp cổ điển, một hạt lượng tử trong giếng vuông sâu vô cùng không thể có bất cứ năng lượng cũ nào – nó phải là một trong các giá trị **được phép** đặc biệt này.⁸ Để tìm A , ta *chuẩn hóa* ψ :

$$\int_0^a |A|^2 \sin^2(kx) dx = |A|^2 \frac{a}{2} = 1, \quad \text{so } |A|^2 = \frac{2}{a}.$$

⁸ Lưu ý rằng sự lượng tử của năng lượng xuất hiện là một hệ quả về mặt kỹ thuật của các điều kiện biên lên các nghiệm của phương trình Schrödinger độc lập thời gian.



Hình 2.2: Ba trạng thái dừng đầu tiên của giếng vuông vô hạn (Pt 2.28)

Điều này chỉ xác định độ lớn của A , nhưng đơn giản nhất là lấy căn dương: $A = \sqrt{2/a}$ (pha của A không mang ý nghĩa vật lý nào). Bên trong giếng, khi đó, các nghiệm là

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right). \quad [2.28]$$

Như đã hứa, phương trình Schrödinger độc lập thời gian mang lại một tập vô hạn các nghiệm (mỗi nghiệm cho mỗi số nguyên dương n). Một vài nghiệm đầu tiên được vẽ trong Hình 2.2. Chúng trông như các sóng dừng trên một sợi dây có độ dài a ; ψ_1 , mang năng lượng thấp nhất, được gọi là **trạng thái cơ bản**, các hàm sóng khác, có năng lượng tăng tỉ lệ với n^2 , được gọi là các **trạng thái kích thích**. Là một tập hợp, các hàm $\psi_n(x)$ có một số tính chất thú vị và quan trọng:

1. Chúng **chẵn** và **lẻ** xen kẽ, so với tâm của giếng: ψ_1 chẵn, ψ_2 lẻ, ψ_3 chẵn, và cứ vậy.⁹

⁹ Để làm sự đối xứng này rõ ràng hơn, một số tác giả để tâm của giếng tại gốc tọa độ (chạy từ $-a$ tới $+a$). Các nghiệm chẵn khi đó là $\cos$, và các nghiệm lẻ là $\sin$. Xem bài toán 2.36.

2. Khi bạn đi lên theo năng lượng, mỗi trạng thái liên tiếp có thêm một **node** (cắt trực hoành tại không): ψ_1 không có (không tính các điểm cuối), ψ_2 có một, ψ_3 có hai, và cứ vậy.

3. Chúng **trực giao** từng đôi một, theo nghĩa

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = 0, \quad [2.29]$$

bất cứ khi nào $m \neq n$. *Chứng minh:*

$$\begin{aligned} \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx &= \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\ &= \frac{1}{a} \int_0^a \left[\cos\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) - \cos\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right) \right] dx \\ &= \left\{ \frac{1}{(m-n)\pi} \sin\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) - \frac{1}{(m+n)\pi} \sin\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right) \right\} \Big|_0^a \\ &= \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{\sin[(m-n)\pi]}{(m-n)} - \frac{\sin[(m+n)\pi]}{(m+n)} \right\} = 0. \end{aligned}$$

Lưu ý rằng lập luận này *không* đúng nếu $m = n$. (Bạn có thể chỉ ra nó sai ở điểm nào?) Trong trường hợp đó sự chuẩn hóa nói ta biết rằng tích phân này bằng 1. Thật ra, ta có thể kết hợp tính trực giao và tính chuẩn hóa trong một phát biểu duy nhất:¹⁰

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = \delta_{mn}. \quad [2.30]$$

Trong đó δ_{mn} (được gọi là **delta Kronecker**) được định nghĩa theo cách thông thường,

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & \text{if } m \neq n; \\ 1, & \text{if } m = n. \end{cases} \quad [2.31]$$

Ta nói rằng các ψ là **trực chuẩn**.

¹⁰ Trong trường hợp này các ψ là thực, nên dấu $*$ trên ψ_m không cần thiết, nhưng vì những mục đích sau này có thói quen đặt nó ở đó là một điều tốt.

4. Chúng **đầy đủ**, theo nghĩa rằng một hàm bất kỳ, $f(x)$, có thể được biểu diễn là một tổ hợp tuyến tính của chúng:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right). \quad [2.32]$$

Tôi sẽ không *chứng minh* tính đầy đủ của các hàm $\sin(n\pi x/a)$ nhưng nếu bạn đã học giải tích cao cấp bạn sẽ nhận ra rằng Pt 2.32 chính là **chuỗi Fourier** cho $f(x)$, và việc hàm “bất kỳ” có thể được khai triển theo cách này đôi khi được gọi là **định lý Dirichlet**.¹¹

¹¹ Chẳng hạn, xem Mary Boas, *Mathematical Methods in the Physical Sciences*, 2d ed. (New York, John Wiley, 1983), tr. 313; $f(x)$ thậm chí có thể có một số hữu hạn các điểm gián đoạn hữu hạn.

Các hệ số c_n có thể được tính ra – cho $f(x)$ cho trước – bằng một phương pháp tôi gọi là **mẹo Fourier** – sử dụng một cách đẹp đẽ tính trực chuẩn của $\{\psi_n\}$: Nhân hai vế của Pt 2.32 cho $\psi_n(x)^*$, và lấy tích phân.

$$\int \psi_m(x)^* f(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{mn} = c_m. \quad [2.33]$$

(Lưu ý rằng delta Kronecker triệt tiêu mọi số hạng trong tổng trừ số hạng sao cho $n = m$.) Do đó hệ số thứ n trong khai triển của $f(x)$ bằng¹²

$$c_n = \int \psi_n(x)^* f(x) dx. \quad [2.34]$$

¹² Không quan trọng khi bạn dùng m hay n là “chỉ số câm” ở đây (dĩ nhiên chừng nào bạn dùng hợp lý ở hai vế của phương trình): dù bạn dùng kí tự gì, nó chỉ thay cho “số nguyên dương bất kỳ.”

Bốn tính chất này cực kỳ hiệu quả, và chúng không chỉ cho riêng giếng vuông vô hạn. Tính chất đầu đúng bất cứ khi nào bản thân thể là một hàm đối xứng; tính chất thứ hai là phổ quát, bất kể hình dạng của giếng.¹³ Tính trực giao cũng khá tổng quát – tôi sẽ chứng minh cho bạn trong Chương 3. Tính đầy đủ đúng cho mọi thể bạn sẽ xét, nhưng phần chứng minh khá rắc rối và dài dòng; tôi e rằng hầu hết nhà vật lý chỉ *giả định* tính đầy đủ, và hy vọng nó đúng.

Các trạng thái dừng (Pt 2.18) của giếng vuông vô cùng rõ ràng bằng

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i(n^2\pi^2\hbar/2ma^2)t}. \quad [2.35]$$

Tôi đã tuyên bố (Pt 2.17) rằng nghiệm tổng quát nhất cho phương trình Schrödinger (phụ thuộc thời gian) là một tổ hợp tuyến tính của các trạng thái dừng:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i(n^2\pi^2\hbar/2ma^2)t}. \quad [2.36]$$

(Nếu bạn nghi ngờ rằng đây có phải là một nghiệm không, hãy kiểm tra nó bằng mọi cách!) Tôi chỉ cần chứng tỏ rằng tôi có thể khớp nó với bất cứ hàm sóng ban đầu được mô tả, $\Psi(x, 0)$, bằng cách chọn phù hợp các hệ số c_n :

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x).$$

Tính đầy đủ của các ψ (được khẳng định trong trường hợp này bằng định lý Dirichlet) đảm bảo rằng tôi có thể luôn biểu diễn $\Psi(x, 0)$ theo cách này, và tính trực chuẩn của chúng cho phép dùng mẹo Fourier để xác định các hệ số thực:

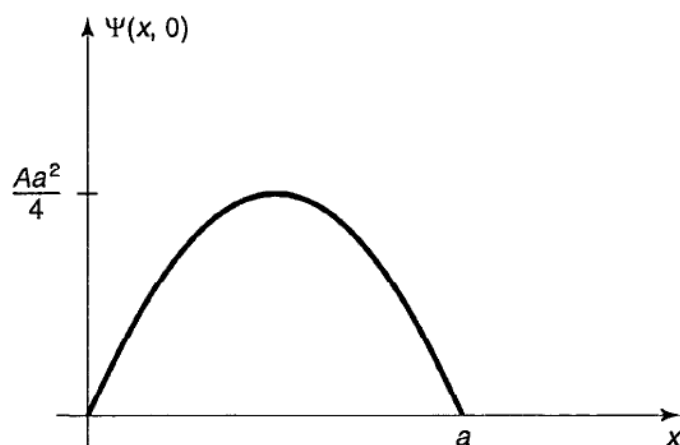
$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \Psi(x, 0) dx. \quad [2.37]$$

Nó như vậy: Cho trước hàm sóng ban đầu, $\Psi(x, 0)$, đầu tiên ta tính các hệ số khai triển c_n , dùng pt 2.37, và sau đó đưa chúng vào Pt 2.36 để thu được $\Psi(x, t)$. Khi đã có hàm sóng, ta sẵn sàng tính bất cứ đại lượng động lực học nào ta quan tâm, bằng cách dùng các thủ tục trong Chương 1. Và nghi thức này áp dụng cho *mọi* thể – điều duy nhất thay đổi là dạng hàm của các ψ và phương trình cho các năng lượng được phép.

Ví dụ 2.2 Một hạt trong giếng vuông vô cùng có hàm sóng ban đầu

$$\Psi(x, 0) = Ax(a - x), \quad (0 \leq x \leq a),$$

đối với hằng số A nào đó (xem hình 2.3). Bên ngoài giếng, dĩ nhiên, $\Psi = 0$. Tìm $\Psi(x, t)$.



Hình 2.3: Hàm sóng ban đầu trong ví dụ 2.2.

Lời giải: Đầu tiên ta cần xác định A , bằng cách chuẩn hóa $\Psi(x, 0)$:

$$1 = \int_0^a |\Psi(x, 0)|^2 dx = |A|^2 \int_0^a x^2(a-x)^2 dx = |A|^2 \frac{a^5}{30},$$

nên

$$A = \sqrt{\frac{30}{a^5}}.$$

Hệ số thứ n bằng (Pt 2.37)

$$\begin{aligned} c_n &= \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \sqrt{\frac{30}{a^5}} x(a-x) dx \\ &= \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \left[a \int_0^a x \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx - \int_0^a x^2 \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \right] \\ &= \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \left\{ a \left[\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) - \frac{ax}{n\pi} \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right] \Big|_0^a \right. \\ &\quad \left. - \left[2\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 x \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) - \frac{(n\pi x/a)^2 - 2}{(n\pi/a)^3} \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right] \Big|_0^a \right\} \\ &= \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \left[-\frac{a^3}{n\pi} \cos(n\pi) + a^3 \frac{(n\pi)^2 - 2}{(n\pi)^3} \cos(n\pi) + a^3 \frac{2}{(n\pi)^3} \cos(0) \right] \\ &= \frac{4\sqrt{15}}{(n\pi)^3} [\cos(0) - \cos(n\pi)] \\ &= \begin{cases} 0, & \text{if } n \text{ is even.} \\ 8\sqrt{15}/(n\pi)^3, & \text{if } n \text{ is odd.} \end{cases} \end{aligned}$$

Do đó (Pt 2.36):

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{30}{a}} \left(\frac{2}{\pi}\right)^3 \sum_{n=1,3,5,\dots} \frac{1}{n^3} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-in^2\pi^2\hbar t/2ma^2}.$$

Nói một cách đại khái, c_n cho ta “lượng ψ_n chứa trong Ψ .” Một số người thích nói rằng $|c_n|^2$ là “xác suất tìm thấy hạt trong trạng thái dừng thứ n ”, nhưng đây là cách dùng ẩu; hạt trong trạng thái Ψ , không phải Ψ_n , và dù sao đi nữa, trong phòng thí nghiệm, bạn không “tìm thấy một hạt trong một trạng thái cụ thể” – bạn *đo đại lượng quan sát được* nào đó, và cái bạn có là một *con số*. Nhưng ta sẽ thấy trong Chương 3, cái mà $|c_n|^2$ cho bạn biết là *xác suất mà một phép đo năng lượng cho giá trị E_n* (một phép đo đúng sẽ luôn cho *một* trong các giá trị “được phép” – do đó có tên gọi đó – và $|c_n|^2$ là xác suất thu được giá trị *cụ thể* E_n).

Dĩ nhiên, tổng của các xác suất này phải bằng 1,

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1. \quad [2.38]$$

Thật vậy, nó có từ sự chuẩn hóa của Ψ (các c_n độc lập với thời gian, nên tôi sẽ chứng minh cho $t = 0$, nếu bạn không thích điều này, bạn có thể dễ dàng tổng quát hóa lập luận cho t bất kỳ).

$$\begin{aligned} 1 &= \int |\Psi(x, 0)|^2 dx = \int \left(\sum_{m=1}^{\infty} c_m \psi_m(x) \right)^* \left(\sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \right) dx \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_m^* c_n \delta_{mn} = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2. \end{aligned}$$

(Lại nữa, delta Kronecker lấy số hạng $m = n$ trong tổng theo m .)

Hơn nữa, giá trị trung bình của năng lượng phải bằng

$$\langle H \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n. \quad [2.39]$$

và điều này cũng có thể được kiểm tra trực tiếp: phương trình Schrödinger độc lập thời gian (Pt 2.12) nói rằng

$$H\psi_n = E_n\psi_n. \quad [2.40]$$

nên

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int \Psi^* H \Psi dx = \int \left(\sum c_m \psi_m \right)^* H \left(\sum c_n \psi_n \right) dx \\ &= \sum \sum c_m^* c_n E_n \int \psi_m^* \psi_n dx = \sum |c_n|^2 E_n. \end{aligned}$$

Lưu ý rằng xác suất thu được một năng lượng cụ thể độc lập thời gian, và do đó, bằng giá trị trung bình của H . Đây là một biểu hiện của **bảo toàn năng lượng** trong cơ học lượng tử.

Ví dụ 2.3 Trong ví dụ 2.2 hàm sóng ban đầu (Hình 2.3) gần giống trạng thái cơ bản ψ_1 (Hình 2.2). Điều này đề xuất rằng $|c_1|^2$ phải chiếm đa số, và thật vậy

$$|c_1|^2 = \left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3} \right)^2 = 0.998555 \dots$$

Các hệ số còn lại là hiệu:¹⁴

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = \left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3} \right)^2 \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{n^6} = 1.$$

Giá trị trung bình của năng lượng, trong ví dụ này, bằng

$$\langle H \rangle = \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \left(\frac{8\sqrt{15}}{n^3\pi^3} \right)^2 \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = \frac{480\hbar^2}{\pi^4ma^2} \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{5\hbar^2}{ma^2}.$$

Như ta có thể trông đợi, nó rất gần với $E_1 = \pi^2\hbar^2/2ma^2$ - hơi *lớn hơn* một chút, vì sự trộn các trạng thái kích thích.

2.3 DAO ĐỘNG TỬ ĐIỀU HÒA

Hệ hình cho một dao động tử điều hòa cổ điển là một khối lượng m gắn vào một lò xo có hằng số lực k . Chuyển động bị chi phối bởi **định luật Hooke**,

$$F = -kx = m \frac{d^2x}{dt^2}$$

(bỏ qua ma sát), và nghiệm là

$$x(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t),$$

trong đó

$$\omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}} \quad [2.41]$$

là tần số (góc) của dao động. Thế năng bằng

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2; \quad [2.42]$$

đồ thị của nó là một parabol.

Dĩ nhiên, không có cái nào là một dao động tử điều hòa *hoàn hảo* – nếu bạn kéo nó quá xa lò xo sẽ đứt, và thông thường định luật Hooke sai trước khi đạt tới điểm đó nhiều. Nhưng trong thực tế, bất cứ thế nào cũng có dạng *xấp xỉ* parabol, trong lân cận của một cực tiểu địa phương (Hình 2.4). Về hình thức, nếu ta khai triển $V(x)$ thành một **chuỗi Taylor** quanh cực tiểu:

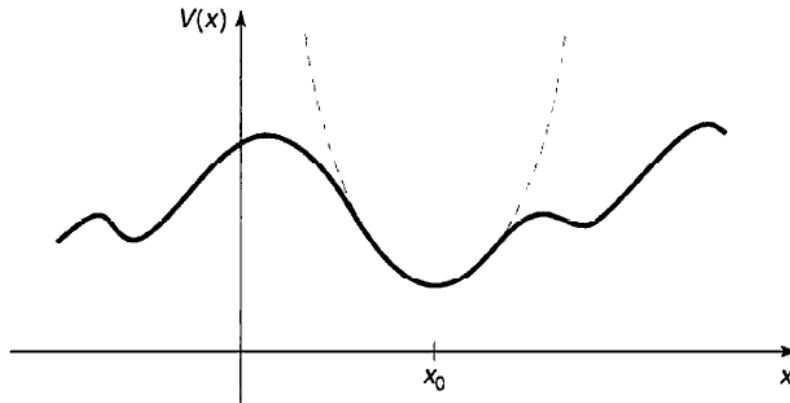
$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots,$$

trừ $V(x_0)$ (bạn có thể cộng một hằng số cho $V(x)$ mà không ảnh hưởng gì, vì điều đó không làm thay đổi lực), nhận ra rằng $V'(x_0) = 0$ (vì x_0 là một cực tiểu), và bỏ qua các số hạng bậc cao hơn (có thể bỏ đi chừng nào $(x - x_0)$ còn nhỏ), ta thu được

$$V(x) \cong \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2,$$

mô tả dao động điều hòa đơn (quanh điểm x_0), có một hằng số lò xo hiệu dụng $k = V''(x_0)$.¹⁶ Đó là lý do tại sao dao động tử điều hòa đơn lại quan trọng như vậy: Trong thực tế mọi chuyển động dao động xấp xỉ bằng một dao động điều hòa đơn, chừng nào biên độ là nhỏ.

¹⁶ Lưu ý rằng $V''(x_0) \geq 0$, vì do giả định x_0 là một *cực tiểu*. Chỉ trong trường hợp hiếm $V''(x_0) = 0$ dao động không phải là điều hòa đơn.



Hình 2.4: Gần đúng parabol (đường nét đứt) của một thế năng bất kỳ, lân cận một cực tiểu địa phương

Bài toán *lượng tử* là giải phương trình Schrödinger cho thế

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad [2.43]$$

(ta thường thay hằng số lò xo bằng tần số cổ điển, dùng Pt 2.41). Như ta đã thấy, chỉ cần giải phương trình Schrödinger độc lập thời gian:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi. \quad [2.44]$$

Trong sách vở bạn sẽ thấy hai cách tiếp cận hoàn toàn khác nhau cho bài toán này. Cách đầu tiên là một nghiệm “brute force” không phức tạp cho phương trình vi phân, dùng **phương pháp chuỗi lũy thừa**; nó hiệu quả vì cùng chiến lược này có thể được áp dụng cho nhiều thế khác (thật vậy, ta sẽ dùng nó trong Chương 4 để giải thế Coulomb). Cách thứ hai là một kỹ thuật đại số rõ ràng một cách ma quái, dùng các **toán tử thang**. Tôi sẽ chỉ bạn phương pháp đại số đầu tiên, vì nó nhanh hơn và đơn giản hơn (và thú vị hơn nhiều);¹⁷ nếu bạn muốn bỏ qua phương pháp chuỗi lũy thừa lúc này, thì tốt, nhưng bạn nên chắc chắn sắp xếp học nó một lúc nào đó.

¹⁷ Ta sẽ dùng một số chiến lược như vậy trong lý thuyết momen xung lượng (Chương 4), và kỹ thuật này tổng quát hóa cho một loạt các thế trong **cơ học lượng tử siêu đối xứng** (chẳng hạn, xem Richard W. Robinett, *Quantum Mechanics*, (Oxford U.P., New York, 1997). Mục 14.4).

2.3.1 Phương pháp đại số

Để bắt đầu, hãy viết lại Pt 2.44 dưới một dạng gợi mở hơn :

$$\frac{1}{2m} [p^2 + (m\omega x)^2] \psi = E\psi. \quad [2.45]$$

trong đó $p \equiv (\hbar/i)d/dx$ dĩ nhiên là toán tử xung lượng. Ý tưởng cơ bản là *thừa số hóa* Hamiltonian,

$$H = \frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2]. \quad [2.46]$$

Nếu đây là những *con số*, nó sẽ dễ dàng:

$$u^2 + v^2 = (iu + v)(-iu + v).$$

Tuy nhiên, ở đây nó không đơn giản như vậy, vì p và x là *toán tử*, và nói chung các toán tử không **giao hoán** (xp không giống như px). Còn nữa, điều này giúp ta xét các đại lượng

$$a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (\mp ip + m\omega x) \quad [2.47]$$

(nhân tử đứng trước chỉ làm cho các kết quả cuối cùng trông đẹp hơn).

Tích a_-a_+ bằng gì?

$$\begin{aligned} a_-a_+ &= \frac{1}{2\hbar m\omega} (ip + m\omega x)(-ip + m\omega x) \\ &= \frac{1}{2\hbar m\omega} [p^2 + (m\omega x)^2 - im\omega(xp - px)]. \end{aligned}$$

Như dự đoán, có thêm một số hạng, liên quan ($xp - px$). Ta gọi nó là **giao hoán tử** của x và p ; nó là một ước lượng chúng *không* giao hoán ra sao. Nói chung, giao hoán tử của các toán tử A và B (được viết bằng ngoặc vuông) bằng

$$[A, B] = AB - BA. \quad [2.48]$$

Trong ký hiệu này,

$$a_-a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega} [p^2 + (m\omega x)^2] - \frac{i}{2\hbar} [x, p]. \quad [2.49]$$

Ta cần tính giao hoán tử của x và p . *Cảnh báo:* Các toán tử khó dùng dưới dạng trừu tượng, và bạn dễ mắc sai lầm trừ khi bạn cho chúng một “hàm thử,” $f(x)$, để tác động lên. Lúc cuối bạn có thể bỏ đi hàm thử, và bạn sẽ còn lại một phương trình chỉ liên quan đến các toán tử. Trong trường hợp hiện tại ta có:

$$[x, p]f(x) = \left[x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (f) - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (xf) \right] = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{df}{dx} - x \frac{df}{dx} - f \right) = i\hbar f(x). \quad [2.50]$$

Bỏ đi hàm thử,

$$[x, p] = i\hbar. \quad [2.51]$$

Kết quả dễ thương và phổ biến này được biết đến là **hệ thức giao hoán tử chính tắc**.¹⁸

¹⁸ Theo nghĩa sâu xa mọi bí ẩn của cơ học lượng tử có thể được truy tới việc vị trí và xung lượng không giao hoán. Thật vậy, một số tác giả lấy hệ thức giao hoán chính tắc là một *tiên đề* của lý thuyết này, và dùng nó để dẫn ra $p = (\hbar/i)d/dx$.

Có điều này, Pt 2.49 trở thành

$$a_- a_+ = \frac{1}{\hbar\omega} H + \frac{1}{2}. \quad [2.52]$$

hoặc

$$H = \hbar\omega \left(a_- a_+ - \frac{1}{2} \right). \quad [2.53]$$

Rõ ràng Hamiltonian không thành thừa số hoàn hảo – có thêm $-1/2$ bên phải. Lưu ý rằng ở đây thứ tự của a_+ và a_- quan trọng; cùng lập luận, với a_+ bên trái, cho

$$a_+ a_- = \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{1}{2}. \quad [2.54]$$

Đặc biệt,

$$[a_-, a_+] = 1. \quad [2.55]$$

Nên Hamiltonian cũng có thể được viết là

$$H = \hbar\omega \left(a_+ a_- + \frac{1}{2} \right). \quad [2.56]$$

Theo $a_{\pm}$, khi đó, phương trình Schrödinger¹⁹ cho dao động tử điều hòa có dạng

$$\hbar\omega \left(a_{\pm} a_{\mp} \pm \frac{1}{2} \right) \psi = E \psi \quad [2.57]$$

(trong những phương trình như vậy bạn lấy dấu ở trên hết, hoặc lấy dấu ở dưới hết).

¹⁹ Tôi ngắn viết “phương trình Schrödinger độc lập thời gian,” nên khi rõ ràng từ ngữ cảnh cái tôi muốn nói, tôi sẽ chỉ gọi nó là “phương trình Schrödinger.”

Bây giờ tới bước quan trọng ở đây: Tôi phát biểu rằng *nếu ψ thỏa phương trình Schrödinger với năng lượng E , (tức là $H\psi = E\psi$), thì $a_+\psi$ thỏa phương trình Schrödinger với năng lượng $(E + \hbar\omega)$: $H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$. Chứng minh:*

$$\begin{aligned} H(a_+\psi) &= \hbar\omega \left(a_+ a_- + \frac{1}{2} \right) (a_+\psi) = \hbar\omega \left(a_+ a_- a_+ + \frac{1}{2} a_+ \right) \psi \\ &= \hbar\omega a_+ \left(a_- a_+ + \frac{1}{2} \right) \psi = a_+ \left[\hbar\omega \left(a_+ a_- + 1 + \frac{1}{2} \right) \psi \right] \\ &= a_+ (H + \hbar\omega) \psi = a_+ (E + \hbar\omega) \psi = (E + \hbar\omega) (a_+\psi). \end{aligned}$$

(Tôi đã dùng Pt 2.55 để thay $a_- a_+$ bằng $a_+ a_- + 1$, trong dòng thứ hai. Lưu ý rằng trong khi thứ tự của a_+ và a_- quan trọng, thứ tự của $a_{\pm}$ và *hằng số* bất kỳ – chẳng hạn $\hbar$, ω , và E – không quan trọng; một toán tử giao hoán với hằng số bất kỳ.)

Với cùng lý do, $(a_-\psi)$ là một nghiệm với năng lượng $(E - \hbar\omega)$:

$$\begin{aligned}
H(a_-\psi) &= \hbar\omega \left(a_-a_+ - \frac{1}{2} \right) (a_-\psi) = \hbar\omega a_- \left(a_+a_- - \frac{1}{2} \right) \psi \\
&= a_- \left[\hbar\omega \left(a_-a_+ - 1 - \frac{1}{2} \right) \psi \right] = a_-(H - \hbar\omega)\psi = a_-(E - \hbar\omega)\psi \\
&= (E - \hbar\omega)(a_-\psi).
\end{aligned}$$

Do đó đây là một công cụ tuyệt vời để tạo ra những hàm mới, có năng lượng thấp hơn và cao hơn – nếu bạn chỉ cần tìm ra *một* nghiệm, hãy bắt đầu! Ta gọi $a_{\pm}$ là các **toán tử thang**, vì chúng cho phép ta leo lên hoặc leo xuống theo năng lượng; a_+ là **toán tử lên**, và a_- là **toán tử xuống**. “Thang” của các trạng thái được minh họa trong Hình 2.5.

Nhưng chờ đã! Nếu tôi cứ áp dụng toán tử thang thì sao? Cuối cùng tôi sẽ tới một trạng thái có năng lượng nhỏ hơn không, vốn không tồn tại (theo định lý tổng quát trong Bài toán 2.2)! Ở chỗ nào đó công cụ này phải sai. Làm sao điều này có thể xảy ra? Ta biết rằng $(a_-\psi)$ là một nghiệm mới của phương trình Schrödinger, nhưng *không có gì đảm bảo rằng nó sẽ chuẩn hóa được* – nó có thể bằng không, hoặc bình phương tích phân của nó có thể là vô hạn. Trong thực tế nó là trường hợp đầu: Xuất hiện một “thanh thấp nhất” (gọi nó là ψ_0) sao cho

$$a_-\psi_0 = 0. \quad [2.58]$$

Ta có thể dùng điều này để tính $\psi_0(x)$:

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \psi_0 = 0,$$

hay

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0.$$

Phương trình vi phân này dễ giải:

$$\int \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} \int x dx \quad \Rightarrow \quad \ln \psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \text{constant},$$

nên

$$\psi_0(x) = A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}.$$

Ta cũng có thể chuẩn hóa nó ngay:

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\omega x^2/\hbar} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi \hbar}{m\omega}}.$$

nên $A^2 = \sqrt{m\omega/\pi\hbar}$, và do đó

$$\boxed{\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}.} \quad [2.59]$$

Để xác định năng lượng của trạng thái này ta đưa nó vào phương trình Schrödinger (dưới dạng của Pt 2.57), $\hbar\omega(a_+a_- + \frac{1}{2})\psi_0 = E_0\psi_0$, và dùng việc rằng $a_-\psi_0 = 0$:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega. \quad [2.60]$$

Bây giờ xuất phát từ thanh dưới cùng (trạng thái cơ bản của dao động tử lượng tử), ta chỉ cần áp dụng toán tử lên (liên tiếp) để sinh ra các trạng thái kích thích,²⁰ tăng năng lượng lên $\hbar\omega$ sau mỗi bước:

$$\psi_n(x) = A_n(a_+)^n\psi_0(x), \quad \text{with } E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad [2.61]$$

trong đó A_n là hằng số chuẩn hóa. Bằng cách áp dụng toán tử lên (lặp lại) lên ψ_0 , khi đó, ta có thể (về nguyên tắc) xây dựng mọi²¹ trạng thái dừng của dao động tử điều hòa. Trong khi đó, không tính nó cụ thể, ta đã xác định các năng lượng được phép.

²⁰ Trong trường hợp dao động tử điều hòa, vì lý do nào đó, ta thường đánh số các trạng thái từ $n = 0$, thay vì $n = 1$. Dĩ nhiên, giới hạn dưới trên tổng trong một công thức như Pt 2.17 phải được thay đổi tương ứng.

Ví dụ 2.4 Tìm trạng thái kích thích thứ nhất của dao động tử điều hòa.

Lời giải: Dùng Pt 2.61,

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 a_+ \psi_0 = \frac{A_1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x\right) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\ &= A_1 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}. \end{aligned} \quad [2.62]$$

Ta có thể chuẩn hóa nó “bằng tay”:

$$\int |\psi_1|^2 dx = |A_1|^2 \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right) \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx = |A_1|^2,$$

nên ta có $A_1 = 1$.

Tôi không muốn tính ψ_{50} theo cách này (áp dụng toán tử lên 50 lần!), nhưng đừng lo: Về nguyên tắc Pt 2.61 làm được việc, trừ việc chuẩn hóa.

Bạn thậm chí có thể thu được sự chuẩn hóa bằng đại số, nhưng nó cần một số thao tác trừu tượng, nên quan sát kỹ. Ta biết rằng $a_{\pm}\psi_n$ tỉ lệ với $\psi_{n\pm 1}$,

$$a_+\psi_n = c_n\psi_{n+1}, \quad a_-\psi_n = d_n\psi_{n-1} \quad [2.63]$$

nhưng thừa số tỉ lệ c_n và d_n bằng bao nhiêu? Đầu tiên lưu ý rằng đối với các hàm $f(x)$ và $g(x)$ “bất kỳ”²²,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_{\pm}g) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\mp}f)^* g dx. \quad [2.64]$$

(Trong ngôn ngữ của đại số tuyến tính, $a_{\mp}$ là liên hợp hermit của $a_{\pm}$.)

²² Dĩ nhiên, các tích phân này phải tồn tại, và có nghĩa rằng $f(x)$ và $g(x)$ phải tiến tới không ở $\pm\infty$.

Chứng minh:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_{\pm} g) dx = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m \omega}} \int_{-\infty}^{\infty} f^* \left(\mp \hbar \frac{d}{dx} + m \omega x \right) g dx,$$

và tích phân từng phần lấy $\int f^* (dg/dx) dx$ tới $-\int (df/dx)^* g dx$ (các số hạng biên triệt tiêu, vì lý do được chỉ ra trong chú thích 22), nên

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_{\pm} g) dx = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m \omega}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(\pm \hbar \frac{d}{dx} + m \omega x \right) f \right]^* g dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\mp} f)^* g dx.$$

ĐPCM.

Đặc biệt,

$$\int_{-\infty}^{\infty} (a_{\pm} \psi_n)^* (a_{\pm} \psi_n) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\mp} a_{\pm} \psi_n)^* \psi_n dx.$$

Nhưng (dùng Pt 2.57 và 2.61)

$$a_{+} a_{-} \psi_n = n \psi_n, \quad a_{-} a_{+} \psi_n = (n+1) \psi_n. \quad [2.65]$$

nên

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} (a_{+} \psi_n)^* (a_{+} \psi_n) dx &= |c_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n+1}|^2 dx = (n+1) \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx. \\ \int_{-\infty}^{\infty} (a_{-} \psi_n)^* (a_{-} \psi_n) dx &= |d_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n-1}|^2 dx = n \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx. \end{aligned}$$

Nhưng vì ψ_n và $\psi_{n\pm 1}$ được chuẩn hóa, ta có $|c_n|^2 = n+1$ và $|d_n|^2 = n$, và do đó

$$\boxed{a_{+} \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}, \quad a_{-} \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}.} \quad [2.66]$$

Do đó

$$\begin{aligned} \psi_1 &= a_{+} \psi_0, \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} a_{+} \psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{+})^2 \psi_0, \\ \psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}} a_{+} \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3 \cdot 2}} (a_{+})^3 \psi_0, \quad \psi_4 = \frac{1}{\sqrt{4}} a_{+} \psi_3 = \frac{1}{\sqrt{4 \cdot 3 \cdot 2}} (a_{+})^4 \psi_0, \end{aligned}$$

và cứ vậy. Rõ ràng

$$\boxed{\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a_{+})^n \psi_0.} \quad [2.67]$$

Ý nói rằng thừa số chuẩn hóa trong Pt 2.61 bằng $A_n = 1/\sqrt{n!}$ (đặc biệt, $A_1 = 1$, xác nhận kết quả của ta trong ví dụ 2.4).

Như trong trường hợp của giếng vuông vô cùng, các trạng thái dừng của dao động tử điều hòa thì trực giao:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn}. \quad [2.68]$$

Điều này có thể được chứng minh khi dùng Pt 2.65, và Pt 2.64 hai lần – đầu tiên di chuyển a_+ và sau đó di chuyển a_- :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* (a_+ a_-) \psi_n dx &= n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (a_- \psi_m)^* (a_- \psi_n) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_+ a_- \psi_m)^* \psi_n dx \\ &= m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx. \end{aligned}$$

Trừ khi $m = n$, khi đó, $\int \psi_m^* \psi_n dx$ phải bằng không. Tính trực chuẩn có nghĩa là ta có thể dùng lại mẹo Fourier (Pt 2.34) để tính ra các hệ số, khi ta khai triển $\Psi(x, 0)$ là một tổ hợp tuyến tính của các trạng thái dừng (Pt 2.16), và $|c_n|^2$ lại là xác suất mà một phép đo năng lượng cho kết quả E_n .

Ví dụ 2.5 Tìm giá trị trung bình của thế năng trong trạng thái thứ n của dao động tử điều hòa.

Lời giải:

$$\langle V \rangle = \left\langle \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right\rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* x^2 \psi_n dx.$$

Có một công cụ đẹp để để tính những tích phân loại này (liên quan đến lũy thừa của x hoặc p): Dùng định nghĩa (2.47) để biểu diễn x và p theo các toán tử lên và xuống:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_+ + a_-); \quad p = i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (a_+ - a_-). \quad [2.69]$$

Trong ví dụ này ta quan tâm tới x^2 :

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[(a_+)^2 + (a_+ a_-) + (a_- a_+) + (a_-)^2 \right].$$

Nên

$$\langle V \rangle = \frac{\hbar \omega}{4} \int \psi_n^* \left[(a_+)^2 + (a_+ a_-) + (a_- a_+) + (a_-)^2 \right] \psi_n dx.$$

Nhưng $(a_+)^2 \psi_n$ bằng ψ_{n+2} (không tính đến tính chuẩn hóa), trực giao với ψ_n , và điều này cũng đúng cho $(a_-)^2 \psi_n$, tỉ lệ với ψ_{n-2} . Nên những số hạng này mất đi, và ta có thể dùng Pt 2.65 để tính hai số hạng còn lại:

$$\langle V \rangle = \frac{\hbar\omega}{4}(n + n + 1) = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Như ta thấy, giá trị trung bình của thế năng đúng bằng một *nửa* năng lượng toàn phần (nửa còn lại dĩ nhiên là động năng). Đây là điều kỳ cục của dao động tử điều hòa, như ta sẽ thấy sau này.

2.3.2 Phương pháp giải tích

Bây giờ ta trở lại phương trình Schrödinger cho dao động tử điều hòa,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi, \quad [2.70]$$

và giải nó trực tiếp, bằng phương pháp chuỗi. Mọi thứ trông rõ ràng hơn một chút nếu ta đưa ra biến không thứ nguyên

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x; \quad [2.71]$$

theo ξ phương trình Schrödinger có dạng

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - K)\psi, \quad [2.72]$$

trong đó K là năng lượng, theo đơn vị $(1/2)\hbar\omega$:

$$K \equiv \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad [2.73]$$

Bài toán của ta là giải Pt 2.72, và trong quá trình này thu được các giá trị “được phép” của K (và do đó của E).

Để bắt đầu, lưu ý rằng ở ξ rất lớn (tức là, ở x rất lớn), ξ^2 hoàn toàn chiếm ưu thế so với hằng số K , nên trong điều kiện này

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2\psi, \quad [2.74]$$

Có nghiệm gần đúng (kiểm tra nó!)

$$\psi(\xi) \approx Ae^{-\xi^2/2} + Be^{+\xi^2/2}. \quad [2.75]$$

Số hạng B rõ ràng không chuẩn hóa được (nó phân kỳ khi $|x| \rightarrow \infty$); các nghiệm chấp nhận được về mặt vật lý, khi đó, có dạng tiệm cận

$$\psi(\xi) \rightarrow ()e^{-\xi^2/2}, \text{ ở } \xi \text{ lớn} \quad [2.76]$$

Điều này gợi ý rằng ta “bỏ đi” phần mũ,

$$\psi(\xi) = h(\xi)e^{-\xi^2/2}, \quad [2.77]$$

Với hy vọng cái còn lại, $h(\xi)$, có một dạng hàm đơn giản hơn bản thân $\psi(\xi)$.²³ Lấy đạo hàm Pt 2.77,

$$\frac{d\psi}{d\xi} = \left(\frac{dh}{d\xi} - \xi h \right) e^{-\xi^2/2},$$

và

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \left(\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dh}{d\xi} + (\xi^2 - 1)h \right) e^{-\xi^2/2},$$

nên phương trình Schrödinger (Pt 2.72) trở thành

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dh}{d\xi} + (K - 1)h = 0. \quad [2.78]$$

²³ Lưu ý rằng mặc dù ta đưa ra một số gần đúng để đưa tới Pt 2.77, những cái sau đó là *chính xác*. Công cụ bỏ đi trạng thái tiệm cận là một bước chuẩn đầu tiên trong phương pháp chuỗi lũy thừa để giải phương trình vi phân – chẳng hạn, xem Boas (chú thích 11). Chương 12.

Tôi đề xuất tìm nghiệm cho Pt 2.78 dưới dạng *chuỗi lũy thừa* theo ξ :²⁴

$$h(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \cdots = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j. \quad [2.79]$$

²⁴ Đây được biết đến là **phương pháp Frobenius** để giải một phương trình vi phân. Theo định lý Taylor, bất cứ hàm nào có dạng tốt cũng có thể được biểu diễn là một chuỗi lũy thừa, nên Pt 2.79 thường không liên quan đến việc mất tính tổng quát. Đối với các điều kiện để áp dụng phương pháp này, xem Boas (chú thích 11) hoặc George B. Arfén và Hans-Jurgen Weber, *Mathematical Methods for Physicist*, 5th ed., Academic Press, Orlando (2000), mục 8.5.

Lấy đạo hàm từng số hạng của chuỗi,

$$\frac{dh}{d\xi} = a_1 + 2a_2\xi + 3a_3\xi^2 + \cdots = \sum_{j=0}^{\infty} j a_j \xi^{j-1},$$

và

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} = 2a_2 + 2 \cdot 3a_3\xi + 3 \cdot 4a_4\xi^2 + \cdots = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)(j+2)a_{j+2}\xi^j.$$

Đưa chúng vào Pt 2.78, ta tìm được

$$\sum_{j=0}^{\infty} [(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j] \xi^j = 0. \quad [2.80]$$

Theo đó (từ tính duy nhất của khai triển chuỗi lũy thừa²⁵) hệ số của *mỗi lũy thừa* của ξ phải triệt tiêu,

$$(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j = 0,$$

và do đó mà

$$a_{j+2} = \frac{(2j+1-K)}{(j+1)(j+2)} a_j. \quad [2.81]$$

Công thức truy hồi này hoàn toàn tương đương với phương trình Schrödinger. Bắt đầu từ a_0 , nó sinh ra mọi hệ số được đánh số chẵn:

$$a_2 = \frac{(1-K)}{2}a_0, \quad a_4 = \frac{(5-K)}{12}a_2 = \frac{(5-K)(1-K)}{24}a_0, \quad \dots,$$

và bắt đầu từ a_1 , nó sinh ra các hệ số lẻ:

$$a_3 = \frac{(3-K)}{6}a_1, \quad a_5 = \frac{(7-K)}{20}a_3 = \frac{(7-K)(3-K)}{120}a_1, \quad \dots.$$

Ta viết nghiệm hoàn chỉnh là

$$h(\xi) = h_{\text{even}}(\xi) + h_{\text{odd}}(\xi), \quad [2.82]$$

trong đó

$$h_{\text{even}}(\xi) \equiv a_0 + a_2\xi^2 + a_4\xi^4 + \dots$$

là một hàm chẵn của ξ , được xây dựng trên a_0 , và

$$h_{\text{odd}}(\xi) \equiv a_1\xi + a_3\xi^3 + a_5\xi^5 + \dots$$

là một hàm lẻ, được xây dựng trên a_1 . Do đó Pt 2.81 xác định $h(\xi)$ theo hai hằng số bất kỳ (a_0 và a_1) – đây là cái mà ta trông đợi, cho một phương trình vi phân bậc hai.

Tuy nhiên, không phải mọi nghiệm thu được thì *chuẩn hóa được*. Cho j rất lớn, hệ thức truy hồi trở thành (gần đúng)

$$a_{j+2} \approx \frac{2}{j}a_j,$$

có nghiệm (gần đúng)

$$a_j \approx \frac{C}{(j/2)!},$$

với hằng số C nào đó, và điều này đưa tới (ở ξ lớn, ở đó các lũy thừa bậc cao chiếm ưu thế)

$$h(\xi) \approx C \sum \frac{1}{(j/2)!} \xi^j \approx C \sum \frac{1}{j!} \xi^{2j} \approx C e^{\xi^2}.$$

Bây giờ, nếu h tiến tới giống $\exp(\xi^2)$, thì ψ (nhớ $\psi?$ – đó là cái ta đang cố gắng tính) tiến tới giống $\exp(\xi^2/2)$ (Pt 2.77), chính xác là trạng thái tiệm cận ta *không* muốn.²⁶ Chỉ có một cách để tránh điều này: Đối với các nghiệm chuẩn hóa được *chuỗi lũy thừa phải kết thúc*. Phải xuất hiện j cao nhất nào đó (gọi nó là n), sao cho hệ thức truy hồi mất đi $a_{n+2} = 0$ (điều này sẽ ngắt *hoặc* chuỗi h_{even} *hoặc* chuỗi h_{odd} ; cái còn lại phải bằng không từ lúc đầu $a_1 = 0$ nếu n chẵn, và $a_0 = 0$ nếu n lẻ). Đối với những nghiệm chấp nhận được về mặt vật lý, thì Pt 2.81 đòi hỏi rằng

$$K = 2n + 1$$

Cho số nguyên không âm n , nói rằng (xem Pt 2.73) *năng lượng* phải bằng

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega. \quad \text{for } n = 0, 1, 2, \dots \quad [2.83]$$

²⁶ Không có gì ngạc nhiên khi các nghiệm không tốt vẫn có trong Pt 2.81, hệ thức truy hồi này tương đương với phương trình Schrödinger, nên nó phải bao gồm cả hai dạng tiệm cận ta tìm thấy trong Pt 2.75.

Do đó ta thu được, bằng một phương pháp hoàn toàn khác, điều kiện lượng tử hóa cơ bản mà ta đã tìm thấy bằng đại số trong Pt 2.61.

Dường như ban đầu khá ngạc nhiên rằng sự lượng tử hóa năng lượng phải xuất hiện từ một chi tiết kỹ thuật trong nghiệm chuỗi lũy thừa của phương trình Schrödinger, nhưng hãy nhìn nó theo một cách khác. Pt 2.70 dĩ nhiên có những nghiệm cho mọi giá trị E (thật vậy, nó có hai nghiệm độc lập tuyến tính cho mỗi E). Nhưng hầu như mọi nghiệm phân kỳ theo hàm mũ ở x lớn, và do đó không chuẩn hóa được. Chẳng hạn hình dung dùng một E nhỏ hơn một trong các giá trị được phép một chút (chẳng hạn $0.49\hbar\omega$), và vẽ nghiệm (Pt 2.6(a)); phần “đuôi” tiến tới vô cùng. Bây giờ thử một E lớn hơn một chút (chẳng hạn $0.51\hbar\omega$); phần “đuôi” bây giờ sẽ phân kỳ theo hướng *còn lại* (Hình 2.6(b)). Khi bạn thay đổi tham số đi một chút từ 0.49 tới 0.51, đuôi đổi hướng khi bạn đi ngang qua 0.5 – chỉ tại *đúng* 0.5 các phần đuôi tiến tới không, để lại một nghiệm chuẩn hóa được.²⁷

²⁷ Ta có thể thiết lập điều này trên máy tính, và phát hiện ra các năng lượng được phép “bằng thực nghiệm.” Bạn có thể gọi nó là **phương pháp vẩy đuôi**: Khi cái đuôi vẩy, bạn biết rằng bạn vừa đi qua một giá trị được phép. Xem bài toán 2.54-2.56.

Đối với các giá trị được phép của K , công thức truy hồi cho

$$a_{j+2} = \frac{-2(n-j)}{(j+1)(j+2)} a_j. \quad [2.84]$$

Nếu $n = 0$, chỉ có một số hạng trong chuỗi (ta phải lấy $a_1 = 0$ để bỏ h_{1e} , và $j = 0$ trong Pt 2.84 đưa tới $a_2 = 0$):

$$h_0(\xi) = a_0.$$

và do đó

$$\psi_0(\xi) = a_0 e^{-\xi^2/2}$$

(từ sự chuẩn hóa, đưa tới Pt 2.59). Với $n = 1$ ta thu được $a_0 = 0$,²⁸ và Pt 2.84 có $j = 1$ đưa tới $a_3 = 0$, nên

$$h_1(\xi) = a_1 \xi.$$

và do đó

$$\psi_1(\xi) = a_1 \xi e^{-\xi^2/2}$$

(xác nhận Pt 2.62). Đối với $n = 2$, $j = 0$ đưa tới $a_2 = -2a_0$, và $j = 2$ cho $a_4 = 0$, nên

$$h_2(\xi) = a_0(1 - 2\xi^2).$$

Và

$$\psi_2(\xi) = a_0(1 - 2\xi^2)e^{-\xi^2/2},$$

và cứ vậy. (So sánh bài toán 2.10, ở đó kết quả cuối cùng này có được bằng phương pháp đại số.)

²⁸ Lưu ý rằng có một tập hệ số a_j hoàn toàn khác cho mỗi giá trị của n .

Nói chung, $h_n(\xi)$ sẽ là một đa thức bậc n theo ξ , chỉ có các lũy thừa chẵn, nếu n là một số nguyên chẵn, và chỉ có các lũy thừa lẻ, nếu n là một số nguyên lẻ. Ngoài thừa số chung (a_0 hoặc a_1) chúng là các **đa thức Hermite**, $H_n(\xi)$.²⁹ Vài đa thức đầu tiên được liệt kê trong Bảng 2.1. Theo truyền thống, thừa số nhân bất kỳ được chọn sao cho hệ số của lũy thừa cao nhất của ξ là 2^n . Với qui ước này, các trạng thái dừng được chuẩn hóa³⁰ cho dao động tử điều hòa là

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}. \quad [2.85]$$

²⁹ Các đa thức Hermite đã được nghiên cứu đầy đủ trong sách toán, và có nhiều công cụ và mẹo để tính toán chúng. Một vài công cụ được khảo sát trong bài toán 2.17.

³⁰ Tôi sẽ không dẫn ra hằng số chuẩn hóa ở đây, nếu bạn quan tâm cách nó được tính, chẳng hạn xem Leonard Schiff, *Quantum Mechanics*, 3rd ed, McGraw-Hill, New York (1968), mục 13.

(Dĩ nhiên) chúng đồng nhất với các đa thức ta đã thu được bằng đại số trong Pt 2.67.

Trong Hình 2.7(a) tôi đã vẽ $\psi_n(x)$ cho một vài n . Dao động tử lượng tử khác dao động tử cổ điển đáng kể – năng lượng không chỉ được lượng tử hóa, mà các phân bố vị trí cũng có một số đặc điểm kỳ cục. Chẳng hạn xác suất tìm thấy hạt bên ngoài miền được phép cổ điển (tức là, với x lớn hơn biên độ cổ điển cho năng lượng đang xét) không bằng không (xem Hình 2.10), và trong mọi trạng thái lẻ xác suất tìm hạt ở tâm bằng không. Chỉ khi n lớn ta bắt đầu thấy giống với trường hợp cổ điển. Trong Hình 2.7(b) tôi đã vẽ chồng phân bố vị trí cổ điển lên phân bố lượng tử (cho $n = 100$); nếu làm trơn các đỉnh, hai phân bố đó sẽ khớp nhau khá tốt (tuy nhiên, trong trường hợp cổ điển ta đang nói về phân bố của vị trí theo *thời gian* cho một dao động tử, còn trong trường hợp lượng tử ta đang nói về phân bố trên một *tập hợp* của các hệ được chuẩn bị giống nhau).³¹

2.4 HẠT TỰ DO

Kế tiếp ta xét trường hợp đơn giản nhất: hạt tự do ($V(x) = 0$ mọi nơi). Về mặt cổ điển điều này sẽ chỉ có nghĩa là chuyển động với vận tốc không đổi, nhưng trong cơ học lượng tử bài toán này tinh tế và phức tạp một cách đáng ngạc nhiên. Phương trình Schrödinger độc lập thời gian là

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi. \quad [2.90]$$

hoặc

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi, \quad \text{where } k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad [2.91]$$

Đến giờ, nó giống với bên trong giếng vuông vô hạn (Pt 2.21), ở đó thế cũng bằng không; tuy nhiên, lần này tôi muốn viết nghiệm tổng quát dưới dạng hàm mũ (thay vì hàm sin và cos), vì những lý do sẽ xuất hiện sau:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad [2.92]$$

Không giống như giếng vuông vô hạn, không có điều kiện biên để giới hạn các giá trị khả dĩ của k (và do đó của E); hạt tự do có thể mang mọi năng lượng (dương). Đưa thêm sự phụ thuộc thời gian điển hình, $\exp(-iEt/\hbar)$

$$\Psi(x, t) = Ae^{ik(x - \frac{\hbar k}{2m}t)} + Be^{-ik(x + \frac{\hbar k}{2m}t)}. \quad [2.93]$$

Lúc này, *bất cứ* hàm nào của x và t phụ thuộc vào những biến này dưới dạng tổ hợp đặc biệt $x \pm vt$ (với hằng số v nào đó) biểu diễn một sóng có dạng cố định, di chuyển theo hướng $\mp x$, với tốc độ v . Một điểm cố định trên dạng sóng (chẳng hạn, một cực đại hoặc một cực tiểu) ứng với một giá trị cố định của đối số, và do đó với x và t sao cho

$$x \pm vt = \text{constant}, \text{ hay } x = \mp vt + \text{constant}$$

Vì mỗi điểm trên dạng sóng đang di chuyển với vận tốc như nhau, *hình dạng* của nó không thay đổi khi nó lan truyền. Do đó số hạng đầu tiên trong Pt 2.93 biểu diễn một sóng di chuyển sang *phải*, và số hạng thứ hai biểu diễn một sóng (có cùng năng lượng) đi sang *trái*. Tiện đây, vì chúng chỉ khác nhau bởi *dấu* trước k , ta cũng có thể viết

$$\Psi_k(x, t) = Ae^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}, \quad [2.94]$$

và cho k âm để chỉ trường hợp sóng di chuyển sang trái:

$$k \equiv \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad \text{with } \begin{cases} k > 0 \Rightarrow & \text{traveling to the right,} \\ k < 0 \Rightarrow & \text{traveling to the left.} \end{cases} \quad [2.95]$$

Rõ ràng “các trạng thái dừng” của hạt tự do đang lan truyền sóng; bước sóng của chúng bằng $\lambda = 2\pi/|k|$, và theo hệ thức de Broglie (Pt. 1.39), chúng mang xung lượng

$$p = \hbar k. \quad [2.96]$$

Tốc độ của những sóng này (hệ số của t chia cho hệ số của x) bằng

$$v_{\text{quantum}} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}}. \quad [2.97]$$

Mặt khác, tốc độ cổ điển của một hạt tự do có năng lượng E được cho bởi $E = (1/2)mv^2$ (động năng thuần túy, vì $V = 0$), nên

$$v_{\text{classical}} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_{\text{quantum}}. \quad [2.98]$$

Rõ ràng hàm sóng cơ học lượng tử di chuyển bằng *nửa* tốc độ của hạt nó biểu diễn! Lát nữa ta sẽ trở lại với nghịch lý này – có một vấn đề thậm chí quan trọng hơn nhiều mà ta cần xét đầu tiên – *hàm sóng này không chuẩn hóa được*. Vì

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k^* \Psi_k dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx = |A|^2(\infty). \quad [2.99]$$

Khi đó trong trường hợp của hạt tự do, các nghiệm tách được không biểu diễn những trạng thái nhận biết được về mặt vật lý. Một hạt tự do không thể tồn tại trong một trạng thái dừng; hay, nói cách khác, *không có một hạt tự do với một năng lượng xác định*.

Nhưng điều đó không có nghĩa các nghiệm tách được là vô ích, vì chúng đóng một vai trò *toán học* hoàn toàn độc lập với diễn giải *vật lý* của chúng. Nghiệm tổng quát của phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian vẫn là một tổ hợp tuyến tính các nghiệm tách được (chỉ lúc này nó là một *tích phân* theo biến liên tục k , thay vì *tổng* theo chỉ số rời rạc n):

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} dk. \quad [2.100]$$

(Đại lượng $1/\sqrt{2\pi}$ được tách ra để tiện; đại lượng đóng vai trò của hệ số c_n trong Pt 2.17 là tổ hợp $(1/\sqrt{2\pi})\phi(k)dk$). Bây giờ hàm sóng này có thể được chuẩn hóa (cho $\phi(k)$ thích hợp). Nhưng nó cần thiết mang một dải k , và do đó một dải năng lượng và tốc độ. Ta gọi nó là một **bó sóng**.³²

³² Các sóng hình sin trải ra tới vô cùng, và chúng không chuẩn hóa được. Nhưng *chồng chập* những sóng như vậy đưa tới sự giao thoa, cho phép sự định xứ và sự chuẩn hóa.

Trong bài toán cơ học lượng tử điển hình, ta được *cho* $\Psi(x, 0)$ và được yêu cầu *tìm* $\Psi(x, t)$. Đối với một hạt tự do nghiệm có dạng của Pt 2.100; câu hỏi duy nhất là làm sao xác định $\phi(k)$ để phù hợp với hàm sóng ban đầu:

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx} dk. \quad [2.101]$$

Đây là một bài toán kinh điển trong giải tích Fourier; câu trả lời được cho bởi **định lý Plancherel** (xem bài toán 2.20):

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} dk \iff F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx. \quad [2.102]$$

$F(k)$ được gọi là **ảnh Fourier** của $f(x)$; $f(x)$ là **ảnh Fourier ngược** của $F(k)$ (sự khác nhau duy nhất là dấu của hàm mũ). Dĩ nhiên có hạn chế nào đó lên các hàm được phép: Các tích phân đó phải *tồn tại*.³³ Vì lý do của ta điều này được đảm bảo nhờ yêu cầu vật lý rằng chính $\Psi(x, 0)$ được chuẩn hóa. Nên nghiệm cho bài toán lượng tử điển hình, cho hạt tự do, là Pt 2.100, với

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx. \quad [2.103]$$

³³ Điều kiện cần và đủ cho $f(x)$ là $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$ hữu hạn. (Trong trường hợp đó $\int_{-\infty}^{\infty} |F(k)|^2 dk$ cũng hữu hạn, và thực ra hai tích phân này bằng nhau.) Xem Arfken (chú thích 24), Mục 15.5.

Ví dụ 2.6 Một hạt tự do, ban đầu định xứ trong miền $-a < x < a$, được thả ra ở thời điểm $t = 0$:

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} A, & \text{if } -a < x < a, \\ 0, & \text{otherwise,} \end{cases}$$

trong đó A và a là những hằng số thực dương. Tìm $\Psi(x, t)$.

Lời giải: Đầu tiên ta cần chuẩn hóa $\Psi(x, 0)$:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx = |A|^2 \int_{-a}^a dx = 2a|A|^2 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2a}}.$$

Tiếp theo ta tính $\phi(k)$, dùng Pt 2.103:

$$\begin{aligned}\phi(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{2a}} \int_{-a}^a e^{-ikx} dx = \frac{1}{2\sqrt{\pi a}} \frac{e^{-ikx}}{-ik} \Big|_{-a}^a \\ &= \frac{1}{k\sqrt{\pi a}} \left(\frac{e^{ika} - e^{-ika}}{2i} \right) = \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \frac{\sin(ka)}{k}.\end{aligned}$$

Cuối cùng, ta đưa trở lại vào Pt 2.100:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\pi\sqrt{2a}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(ka)}{k} e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)} dk. \quad [2.104]$$

Không may, tích phân này không thể được giải theo các hàm sơ cấp, mặc dù dĩ nhiên nó có thể được tính bằng số (Hình 2.8). (Thật ra có một số ít trường hợp hiếm hoi ở đó tích phân cho $\Psi(x, t)$ (Pt 2.100) có thể được tính tường minh; xem bài toán 2.22 cho một trường hợp đặc biệt đẹp.)

Sẽ rõ ràng khi xét các trường hợp giới hạn. Nếu a rất nhỏ, hàm sóng ban đầu là một đỉnh định xứ đẹp (Hình 2.9(a)). Trong trường hợp này ta có thể dùng gần đúng góc nhỏ để viết $\sin(ka) \approx ka$, và do đó

$$\phi(k) \approx \sqrt{\frac{a}{\pi}};$$

Nó phẳng, vì các k triệt tiêu (Hình 2.9(b)). Đây là một ví dụ của nguyên lý bất định: Nếu sự trải ra của vị trí là nhỏ, sự trải ra của xung lượng (và do đó của k – xem Pt 2.96) phải lớn. Ở thái cực còn lại (a lớn) sự trải ra của vị trí là lớn (Hình 2.10(a)) và

$$\phi(k) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{\sin(ka)}{ka}.$$

Lúc này, $\sin z/z$ có cực đại tại $z = 0$, và giảm tới không ở $z = \pm\pi$ (trong trường hợp này, có nghĩa $k = \pm\pi/a$). Nên với a lớn, $\phi(k)$ là một đỉnh nhọn quanh $k = 0$ (Hình 2.10(b)). Lần này nó có một xung lượng được xác định tốt nhưng một vị trí không xác định tốt.

Bây giờ tôi trở lại với nghịch lý được lưu ý trước đây: việc nghiệm tách được $\Psi_k(x, t)$ trong Pt 2.94 di chuyển với tốc độ “sai” cho hạt mà nó có thể biểu diễn. Nói một cách chặt chẽ, bài toán không còn đúng khi ta phát hiện ra rằng Ψ_k không phải là một trạng thái nhận biết được về mặt vật lý. Tuy nhiên, sẽ thú vị khi xét thông tin nào về vận tốc được chứa trong hàm sóng hạt tự do (Pt 2.100). Ý tưởng chính là: Một bó sóng là một sự chồng chập các sóng hình sin có biên độ được thay đổi bởi ϕ (Hình 2.11); nó gồm các “dợn sóng” chứa trong một “hàm bao”. Cái ứng với vận tốc hạt không phải là tốc độ của các dợn sóng riêng biệt (được gọi là **vận tốc pha**), mà là tốc độ của hàm bao (**vận tốc nhóm**) – mà, phụ thuộc vào bản chất của các sóng, có thể lớn hơn, nhỏ hơn, hay bằng vận tốc của các dợn sóng tạo thành nó. Đối với những sóng trên một sợi dây, vận tốc nhóm bằng vận tốc pha. Đối với sóng nước nó bằng nửa vận tốc pha, như ta có thể để ý khi ta ném một hòn đá xuống hồ (nếu bạn tập trung vào một dợn sóng cụ thể, bạn sẽ thấy nó được hình thành từ rìa, di

chuyển tới qua nhóm, và mất ở mặt, còn nhóm như một tổng thể lan truyền ở tốc độ bằng một nửa). Cái tôi cần chứng tỏ là đối với hàm sóng của một hạt tự do trong cơ học lượng tử vận tốc nhóm bằng *hai lần* vận tốc pha – để biểu diễn đúng tốc độ hạt cổ điển.

Khi đó, vấn đề là xác định vận tốc nhóm của một bó sóng có dạng tổng quát

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk.$$

(Trong trường hợp của ta $\omega = \hbar k^2/2m$, nhưng cái tôi phải nói bây giờ áp dụng cho *mọi* loại bó sóng, bất kể **hệ thức tán sắc** của nó – hệ thức cho ω như một hàm của k .) Hãy giả sử rằng $\phi(k)$ có đỉnh hẹp quanh giá trị k_0 cụ thể nào đó. (Không có gì *bất hợp pháp* quanh một đỉnh rộng theo k , nhưng những bó sóng như vậy thay đổi hình dạng rất nhanh – vì các thành phần khác nhau di chuyển ở những tốc độ khác nhau – nên khái niệm toàn phần của một “nhóm”, có một vận tốc được xác định tốt, mất ý nghĩa.) Vì hàm dưới dấu tích phân có thể bỏ qua trừ lân cận của k_0 , ta cũng có thể khai triển Taylor hàm $\omega(k)$ quanh điểm đó, và chỉ giữ các số hạng đầu tiên:

$$\omega(k) \cong \omega_0 + \omega'_0(k - k_0),$$

trong đó ω'_0 là đạo hàm của ω theo k , tại điểm k_0 .

Đổi biến từ k sang $s \equiv k - k_0$ (để tính tích phân tại k_0), ta có

$$\Psi(x, t) \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0 + s) e^{i[(k_0 + s)x - (\omega_0 + \omega'_0 s)t]} ds.$$

Tại $t = 0$,

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0 + s) e^{i(k_0 + s)x} ds,$$

và ở thời điểm sau

$$\Psi(x, t) \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(-\omega_0 t + k_0 \omega'_0 t)} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0 + s) e^{i(k_0 + s)(x - \omega'_0 t)} ds.$$

Trừ việc đổi từ x sang $(x - \omega'_0 t)$, tích phân này giống với tích phân trong $\Psi(x, 0)$. Do đó

$$\Psi(x, t) \cong e^{-i(\omega_0 - k_0 \omega'_0)t} \Psi(x - \omega'_0 t, 0). \quad [2.105]$$

Ngoài thừa số pha phía trước (không ảnh hưởng $|\Psi|^2$ trong mọi sự kiện) rõ ràng bó sóng di chuyển với tốc độ ω'_0 :

$$v_{\text{group}} = \frac{d\omega}{dk} \quad [2.106]$$

(Được tính tại $k = k_0$). Điều này trái với vận tốc pha thông thường

$$v_{\text{phase}} = \frac{\omega}{k}. \quad [2.107]$$

Trong trường hợp của ta, $\omega = (\hbar k^2/2m)$, nên $\omega/k = (\hbar k/2m)$, trong đó $d\omega/dk = (\hbar k/m)$, gấp hai lần. Điều này khẳng định rằng chính vận tốc nhóm của bó sóng, không phải vận tốc pha của các trạng thái dừng, phù hợp với vận tốc hạt cổ điển:

$$v_{\text{classical}} = v_{\text{group}} = 2v_{\text{phase}}. \quad [2.108]$$

2.5 THỂ CÓ DẠNG HÀM DELTA

2.5.1 Trạng thái liên kết và trạng thái tán xạ

Ta đã xét hai dạng nghiệm rất khác nhau của phương trình Schrödinger độc lập thời gian: Đối với giếng vuông vô cùng và dao động tử điều hòa chúng *chuẩn hóa được* và được đánh dấu bằng một *chỉ số rời rạc* n ; đối với hạt tự do chúng *không chuẩn hóa được*, và được đánh dấu bằng một *biến liên tục* k . Dạng đầu tự nó biểu diễn những trạng thái nhận biết được về mặt vật lý, dạng sau thì không; nhưng trong cả hai dạng, nghiệm tổng quát của phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian là một tổ hợp tuyến tính của các trạng thái dừng – đối với dạng đầu tổ hợp này có dạng của một *tổng* (theo n), còn đối với dạng thứ hai nó là một *tích phân* (theo k). Ý nghĩa vật lý của sự khác biệt này là gì?

Trong cơ học *cổ điển* một thể độc lập thời gian một chiều có thể đưa tới hai dạng chuyển động khá khác nhau. Nếu $V(x)$ lên cao hơn năng lượng toàn phần của hạt (E) ở hai đầu (Hình 2.12(a)), thì hạt bị “giữ” trong giếng thế – nó chạy qua chạy lại giữa các **điểm quay đầu**, nhưng nó không thể thoát ra (dĩ nhiên, trừ khi bạn cho nó thêm một nguồn năng lượng, chẳng hạn như một mô tơ, nhưng ta không nói về điều đó). Ta gọi nó là một **trạng thái liên kết**. Mặt khác nếu E lớn hơn $V(x)$ ở một bên (hoặc cả hai bên), thì hạt đến từ “vô cùng,” đi chậm lại hoặc tăng tốc dưới sự ảnh hưởng của thế, và quay lại vô cùng (Hình 2.12(b)). (Nó không thể bị giam trong thế trừ khi có cơ chế nào khác, chẳng hạn ma sát, để làm *tiêu hao* năng lượng, nhưng một lần nữa ta không nói tới điều này.) Ta gọi đó là một trạng **thái tán xạ**. Một số thể chỉ cho phép trạng thái liên kết (chẳng hạn dao động tử điều hòa); một số khác chỉ cho phép trạng thái tán xạ (một đời thể không có chỗ lõm); một số cho phép cả hai, phụ thuộc vào năng lượng của hạt.

Hai loại nghiệm của phương trình Schrödinger ứng đúng với trạng thái liên kết và trạng thái tán xạ. Sự khác biệt thậm chí rõ ràng hơn trong lĩnh vực lượng tử, vì hiện tượng **chui hầm** (mà ta sẽ xét lát nữa) cho phép hạt “rò rỉ” qua bất cứ rào thế hữu hạn nào, nên điều duy nhất quan trọng là thế ở vô cùng (Hình 2.12(c)):

$$\begin{cases} E < [V(-\infty) \text{ and } V(+\infty)] \Rightarrow \text{bound state,} \\ E > [V(-\infty) \text{ or } V(+\infty)] \Rightarrow \text{scattering state.} \end{cases} \quad [2.109]$$

Trong “đời thực” hầu hết các thế tiến tới *không* ở vô cùng, khi đó tiêu chuẩn này thậm chí đơn giản hơn nữa

$$\begin{cases} E < 0 \Rightarrow \text{bound state,} \\ E > 0 \Rightarrow \text{scattering state.} \end{cases} \quad [2.110]$$

Vì các thế của giếng vuông vô cùng và dao động tử điều hòa tiến tới vô cùng khi $x \rightarrow \pm\infty$, chúng chỉ cho phép trạng thái liên kết; vì thế của hạt tự do bằng không ở mọi nơi, chúng chỉ cho phép trạng thái tán xạ.³⁴ Trong mục này (và mục sau) ta chỉ xét những thế cho phép cả hai loại trạng thái này.

³⁴ Nếu bạn là người hay quan sát, có thể bạn đã để ý rằng định lý tổng quát đòi hỏi $E > V_{\min}$ (bài toán 2.2) thực sự không áp dụng cho những trạng thái tán xạ, vì thế của hạt tự do bằng không ở mọi nơi, chúng chỉ cho phép trạng thái tán xạ.³⁴ Trong mục này (và mục sau) ta chỉ xét những thế cho phép cả hai loại trạng thái này.

2.5.2 Giếng có dạng hàm delta

Hàm delta Dirac là một đỉnh hẹp vô cùng, cao vô cùng ở tại gốc tọa độ, có *diện tích* bằng 1 (Hình 2.13)

$$\delta(x) \equiv \left\{ \begin{array}{ll} 0, & \text{if } x \neq 0 \\ \infty, & \text{if } x = 0 \end{array} \right\}, \quad \text{with } \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1. \quad [2.111]$$

Về mặt kỹ thuật, nó không phải là hàm số, vì nó không hữu hạn ở $x = 0$ (các nhà toán học gọi nó là **hàm suy rộng**, hay **phân bố**).³⁵ Tuy nhiên nó là một công cụ cực kỳ hữu dụng trong vật lý lý thuyết. (Chẳng hạn, trong điện động lực học *mật độ* điện tích của một điện tích điểm là một hàm delta.) Lưu ý rằng $\delta(x - a)$ sẽ là một đỉnh có diện tích bằng 1 ở tại điểm a . Nếu bạn nhân $\delta(x - a)$ cho một hàm $f(x)$ *thông thường*, nó cũng giống như nhân với $f(a)$,

$$f(x)\delta(x - a) = f(a)\delta(x - a), \quad [2.112]$$

vì tích bằng *không* mọi nơi trừ tại điểm a . Đặc biệt,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - a) dx = f(a) \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - a) dx = f(a). \quad [2.113]$$

³⁵ Hàm delta có thể được xem là *giới hạn* của một *dãy* hàm, chẳng hạn những hình chữ nhật (hay tam giác) có độ cao tăng liên tục và bề rộng giảm liên tục.

Đó là tính chất quan trọng nhất của hàm delta: Dưới dấu tích phân nó dùng để lấy giá trị của $f(x)$ tại điểm a . (Dĩ nhiên, tích phân không cần đi từ $-\infty$ tới $+\infty$; cái quan trọng là miền lấy tích phân chứa điểm a , nên $a - \varepsilon$ tới $a + \varepsilon$ là đủ, cho mọi $\varepsilon > 0$.)

Hãy xét một thế có dạng

$$V(x) = -\alpha\delta(x), \quad [2.114]$$

Trong đó α là hằng số dương.³⁶ Chắc chắn đây là một thế nhân tạo (cũng như giếng vuông vô cùng), nhưng nó đơn giản, và minh họa lý thuyết cơ bản với rất ít tính toán. Phương trình Schrödinger cho giếng có dạng hàm delta là

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha\delta(x)\psi = E\psi; \quad [2.115]$$

Nó vừa cho trạng thái liên kết ($E < 0$) vừa cho trạng thái tán xạ ($E > 0$).

³⁶ Bản thân hàm delta có đơn vị $1/\text{độ dài}$ (xem Pt 2.111), nên có thứ nguyên *năng lượng* $\times$ *độ dài*.

Đầu tiên ta sẽ xét trạng thái liên kết. Trong vùng $x < 0$, $V(x) = 0$, nên

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \kappa^2\psi, \quad [2.116]$$

ở đó

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}. \quad [2.117]$$

(E âm, nên κ thực và dương.) Nghiệm tổng quát của Pt 2.116 bằng

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}, \quad [2.118]$$

Nhưng số hạng đầu tiên phân kỳ khi $x \rightarrow -\infty$, nên ta phải chọn $A = 0$:

$$\psi(x) = Be^{\kappa x}, \quad (x < 0). \quad [2.119]$$

Trong vùng $x > 0$, $V(x)$ lại bằng không, và nghiệm tổng quát có dạng $F\exp(-\kappa x) + G\exp(\kappa x)$; lần này số hạng thứ hai phân kỳ (khi $x \rightarrow +\infty$), nên

$$\psi(x) = Fe^{-\kappa x}, \quad (x > 0). \quad [2.120]$$

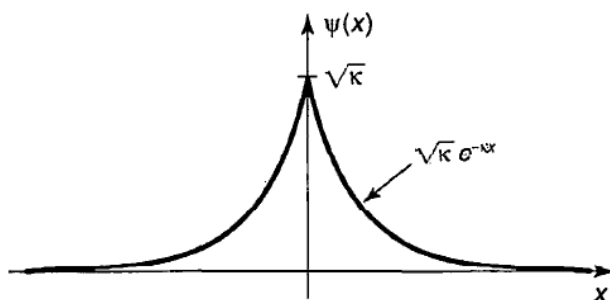
Chỉ còn gán hai nghiệm này với nhau, bằng cách dùng các điều kiện biên thích hợp tại $x = 0$. Tôi đã dẫn ra trước đây các điều kiện biên tiêu chuẩn cho ψ :

$\begin{cases} 1. \psi & \text{is always continuous;} \\ 2. d\psi/dx & \text{is continuous except at points where the potential is infinite.} \end{cases}$	[2.121]
--	---------

Trong trường hợp này điều kiện biên đầu tiên cho ta biết rằng $F = B$, nên

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{\kappa x}, & (x \leq 0), \\ Be^{-\kappa x}, & (x \geq 0); \end{cases} \quad [2.122]$$

$\psi(x)$ được vẽ trong Hình 2.14. Điều kiện biên thứ hai không cho ta biết điều gì; đây là trường hợp đặc biệt (giống giếng vuông vô cùng) ở đó V bằng vô cùng tại điểm nối, và rõ ràng từ hình vẽ hàm này có một điểm nhọn ở $x = 0$. Hơn nữa hàm delta không có chuyện gì ở đây. Rõ ràng hàm delta phải xác định tính không liên tục của đạo hàm của ψ , ở $x = 0$. Tôi sẽ cho bạn thấy bây giờ điều này được thực hiện ra sao, và như một sản phẩm phụ ta sẽ thấy tại sao thông thường $d\psi/dx$ liên tục.



Hình 2.14: Hàm sóng trạng thái liên kết cho thế có dạng hàm delta (Pt 2.122)

Ý tưởng là lấy *tích phân* phương trình Schrödinger, từ $-\epsilon$ tới $+\epsilon$, và sau đó lấy giới hạn khi $\epsilon \rightarrow 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} V(x)\psi(x) dx = E \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \psi(x) dx. \quad [2.123]$$

Tích phân đầu tiên chính là $d\psi/dx$, được tính ở hai cận; tích phân cuối bằng *không*, trong giới hạn $\epsilon \rightarrow 0$, vì nó là diện tích của một miếng có bề rộng triệt tiêu và độ cao hữu hạn. Do đó

$$\Delta \left(\frac{d\psi}{dx} \right) \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d\psi}{dx} \Big|_{+\epsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\epsilon} \right) = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} V(x)\psi(x) dx. \quad [2.124]$$

Thông thường, giới hạn bên phải lại bằng không, và đó là lý do tại sao $d\psi/dx$ liên tục như thường. Nhưng khi $V(x)$ *vô hạn* tại biên, lập luận này không đúng. Đặc biệt nếu $V(x) = \alpha\delta(x)$, Pt 2.113 cho

$$\Delta \left(\frac{d\psi}{dx} \right) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0). \quad [2.125]$$

Cho trường hợp đang xét (Pt 2.122),

$$\begin{cases} d\psi/dx = -B\kappa e^{-\kappa x}, & \text{for } (x > 0), & \text{so } d\psi/dx|_+ = -B\kappa, \\ d\psi/dx = +B\kappa e^{+\kappa x}, & \text{for } (x < 0), & \text{so } d\psi/dx|_- = +B\kappa. \end{cases}$$

và do đó $\Delta(d\psi/dx) = -2B\kappa$. Và $\psi(0) = B$. Nên Pt 2.125 cho

$$\kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2}, \quad [2.126]$$

và năng lượng được phép (Pt 2.117) bằng

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}. \quad [2.127]$$

Cuối cùng, ta chuẩn hóa ψ :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 2|B|^2 \int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} dx = \frac{|B|^2}{\kappa} = 1,$$

nên (chọn căn dương cho tiện):

$$B = \sqrt{\kappa} = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar}. \quad [2.128]$$

Rõ ràng, giếng có dạng hàm delta, bất kể độ lớn α của nó, có *đúng một* trạng thái liên kết:

$$\boxed{\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2}; \quad E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}.} \quad [2.129]$$

Còn về trạng thái *tán xạ*, với $E > 0$? Đối với $x < 0$ phương trình Schrödinger cho

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi = -k^2 \psi,$$

trong đó

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad [2.130]$$

là thực và dương. Nghiệm tổng quát bằng

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad [2.131]$$

và lần này ta không thể bỏ số hạng nào cả, vì cả hai không phân kỳ. Tương tự, cho $x > 0$,

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}. \quad [2.132]$$

Tính liên tục của $\psi(x)$ tại $x = 0$ yêu cầu rằng

$$F + G = A + B. \quad [2.133]$$

Các đạo hàm bằng

$$\begin{cases} d\psi/dx = ik(Fe^{ikx} - Ge^{-ikx}), & \text{for } (x > 0), & \text{so } d\psi/dx|_+ = ik(F - G), \\ d\psi/dx = ik(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}), & \text{for } (x < 0), & \text{so } d\psi/dx|_- = ik(A - B). \end{cases}$$

Và do đó $\Delta(d\psi/dx) = ik(F - G - A + B)$. Trong khi đó, $\psi(0) = (A + B)$, nên điều kiện biên thứ hai (Pt 2.125) cho

$$ik(F - G - A + B) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A + B), \quad [2.134]$$

hay, ngắn gọn hơn,

$$F - G = A(1 + 2i\beta) - B(1 - 2i\beta), \quad \text{where } \beta \equiv \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}. \quad [2.135]$$

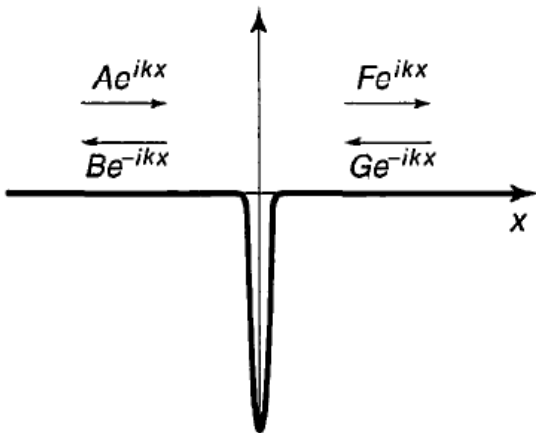
Đã dùng cả hai điều kiện biên, ta còn lại hai phương trình (Pt 2.133 và 2.135) có bốn giá trị chưa biết (A, B, F , và G) – có *năm* nếu tính luôn k . Sự chuẩn hóa sẽ không giúp được gì – đó không phải là một trạng thái chuẩn hóa được. Có lẽ ta nên dừng lại và kiểm tra ý nghĩa vật lý của những hằng số này. Nhớ lại rằng $\exp(ikx)$ (khi kết hợp với thừa số phụ thuộc thời gian $\exp(-iEt/\hbar)$) cho một hàm sóng lan truyền sang *phải*, và $\exp(-ikx)$ dẫn tới một sóng lan truyền sang *trái*. Theo đó A (trong Pt 2.131) bằng biên độ của một sóng đi tới từ bên trái. B là biên độ của một sóng trở lại bên trái, F (Pt 2.131) là biên độ của một sóng đi sang phải, và G là biên độ của một sóng đi tới từ bên phải (xem Hình 2.15). Trong một thí nghiệm tán xạ điển hình các hạt được bắn tới từ một phía – từ bên trái. Trong trường hợp đó biên độ của sóng tới từ bên *phải* sẽ bằng *không*:

$$G = 0 \quad (\text{cho tán xạ từ bên trái}); \quad [2.136]$$

A là biên độ của **sóng tới**, B là biên độ của **sóng phản xạ**, và F là biên độ của **sóng truyền qua**. Giải Pt 2.133 và Pt 2.135 cho B và F , ta tìm được

$$B = \frac{i\beta}{1 - i\beta}A, \quad F = \frac{1}{1 - i\beta}A. \quad [2.137]$$

(Nếu ta muốn nghiên cứu tán xạ từ bên *phải*, đặt $A = 0$; khi đó G là biên độ sóng tới, F là biên độ sóng phản xạ, và B là biên độ sóng truyền qua.)



Hình 2.15: Tán xạ từ một giếng có dạng hàm delta.

Bây giờ, xác suất tìm hạt ở một vị trí xác định được cho bởi $|\Psi|^2$, nên xác suất *trạng đối*³⁷ một hạt tới sẽ bị phản xạ trở lại bằng

$$R \equiv \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2}. \quad [2.138]$$

R được gọi là **hệ số phản xạ**. (Nếu bạn có một *chùm* hạt, nó cho bạn biết *tỉ lệ* số hạt tới sẽ bị bắn trở lại.) Trong khi đó, xác suất truyền qua được cho bởi **hệ số truyền qua**

$$T \equiv \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \beta^2}. \quad [2.139]$$

³⁷ Đây không phải là một hàm sóng chuẩn hóa được, nên xác suất *tuyệt đối* tìm thấy hạt tại một vị trí cụ thể không được xác định tốt; tuy nhiên *tỉ số* của các xác suất cho các sóng tới và sóng phản xạ có nghĩa. Đọc thêm ở đoạn sau.

Dĩ nhiên *tổng* của các xác suất này phải bằng 1 – và nó là đúng như vậy:

$$R + T = 1. \quad [2.140]$$

Lưu ý rằng R và T là những hàm của β , và do đó (Pt 2.130 và 2.135) là hàm của E :

$$R = \frac{1}{1 + (2\hbar^2 E / m\alpha^2)}, \quad T = \frac{1}{1 + (m\alpha^2 / 2\hbar^2 E)}. \quad [2.141]$$

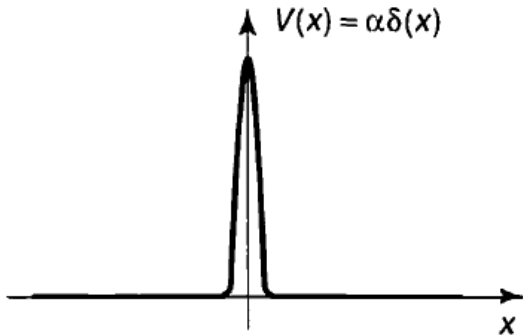
Năng lượng càng cao, xác suất truyền qua càng lớn (và chắc chắn có nghĩa).

Tất cả điều này rất gọn gàng, nhưng có một vấn đề khó khăn về nguyên tắc mà ta không thể bỏ qua: Những hàm sóng tán xạ này không chuẩn hóa được, nên chúng không thực sự biểu diễn những trạng thái khả dĩ của hạt. Nhưng ta biết lời giải cho vấn đề này là gì: Ta phải tạo ra những tổ hợp tuyến tính chuẩn hóa được của các trạng thái dừng, như ta đã làm với hạt tự do – những hạt vật lý có thực được biểu diễn bằng các bó sóng thu được. Mặc dù dễ về nguyên tắc, đây là một vấn đề rắc rối trong thực tế, và ở điểm này tốt nhất là đưa bài toán cho máy tính.³⁸ Trong khi đó, vì không thể tạo ra một hàm sóng chuẩn hóa được của hạt tự do mà không liên quan đến một *vùng* năng lượng, R và T phải được xem là xác suất truyền qua và phản xạ *gần đúng* cho các hạt trong *lân cận* của E .

Tiện đây, bạn có thể thấy kỳ rằng ta có thể phân tích một bài toán phụ thuộc thời gian thuần túy (hạt đi tới, tán xạ bởi một thế, và bay ra vô cùng) bằng cách dùng những trạng thái *dừng*. Rốt cuộc, ψ (trong Pt 2.131 và 2.132) chỉ là một hàm hình sin, độc lập thời gian, phức, trải ra vô cùng (có biên độ không đổi) theo cả hai hướng. Và rồi thì, bằng cách áp dụng những điều kiện biên thích hợp lên hàm này ta có thể xác định xác suất mà một hạt (được biểu diễn bằng một bó sóng *định xứ*) sẽ bị bật lại, hoặc đi qua, một thế. Sự kỳ diệu toán học đằng sau điều này là, tôi giả sử, việc bằng cách lấy tổ hợp tuyến tính của những trạng thái trải ra toàn không gian, và với sự phụ thuộc thời gian bình thường, ta có thể *xây dựng* những hàm sóng tập trung quanh một điểm (chuyển động), có trạng thái khá phức tạp theo thời gian (xem Bài toán 2.43).

Do ta đã có sẵn các phương trình, hãy xét vấn đề trường hợp của một *rào* thế dạng hàm delta (Hình 2.16). Về mặt hình thức mọi cái ta phải làm là đổi dấu của α . Dĩ nhiên điều này giết chết trạng thái liên kết (Bài toán 2.2). Mặt khác, các hệ số phản xạ và truyền qua, chỉ phụ thuộc vào α^2 , không đổi. Thật kỳ lạ, hạt đi qua rào cũng giống như đi qua giếng! Dĩ nhiên về *mặt cổ điển*, một hạt không thể đi qua một rào thế cao vô cùng, bất kể năng lượng của nó. Thật vậy, những bài toán tán xạ cổ điển khá buồn tẻ: Nếu $E > V_{\max}$, thì $T = 1$ và $R =$

0 – hạt chắc chắn đi qua; nếu $E < V_{\max}$ thì $T = 0$ và $R = 1$ - nó đi lên đồi đến khi hết năng lượng, và sau đó quay lại nơi nó đến. Các bài toán tán xạ *lượng tử* phong phú hơn nhiều: Hạt có xác suất đi qua thế khác không ngay cả khi $E < V_{\max}$. Ta gọi hiện tượng này là **chui hầm**; nó là cơ chế tạo ra nhiều thành tựu trong điện tử học hiện đại – nếu không đề cập đến những phát triển ấn tượng trong kính hiển vi. Ngược lại, ngay cả khi $E > V_{\max}$ có một khả năng hạt sẽ bị bắn ngược lại – mặc dù tôi không khuyên lái xe qua một đỉnh núi với hy vọng rằng cơ học lượng tử sẽ cứu bạn (xem Bài toán 2.35).



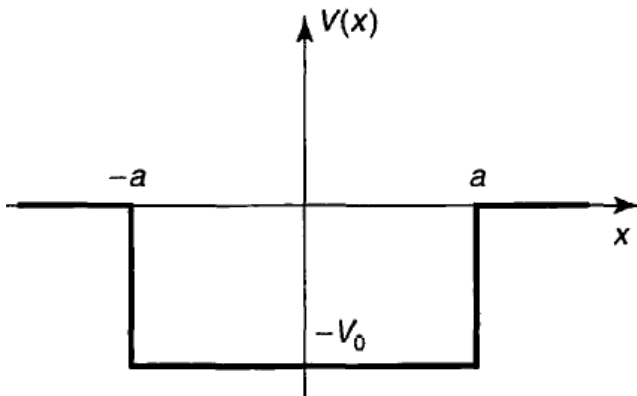
Hình 2.16: Rào có dạng hàm delta.

2.6 GIẾNG VUÔNG HỮU HẠN

Là một ví dụ cuối cùng, hãy xét thế có dạng giếng vuông *hữu hạn*

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & \text{for } -a \leq x \leq a, \\ 0, & \text{for } |x| > a, \end{cases} \quad [2.145]$$

trong đó V_0 là một hằng số (dương) (Hình 2.17). Cũng giống như hàm delta, thế này cho phép cả trạng thái liên kết (có $E < 0$) lẫn trạng thái tán xạ (có $E > 0$). Đầu tiên ta sẽ xét trạng thái liên kết.



Hình 2.17: Giếng vuông hữu hạn (Pt 2.145)

Trong vùng $x < -a$ thế bằng không, nên phương trình Schrödinger bằng

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad \text{or} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = \kappa^2\psi,$$

trong đó

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad [2.146]$$

thực và dương. Nghiệm tổng quát bằng $\psi(x) = A\exp(-\kappa x) + B\exp(\kappa x)$, nhưng số hạng đầu tiên phân kỳ (khi $x \rightarrow -\infty$), nên nghiệm chấp nhận được về mặt vật lý (như trước đây – xem Pt 2.119) bằng

$$\psi(x) = Be^{\kappa x}, \quad \text{for } x < -a. \quad [2.147]$$

Trong vùng $-a < x < a$, $V(x) = -V_0$, và phương trình Schrödinger bằng

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi, \quad \text{or} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -l^2\psi,$$

trong đó

$$l \equiv \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}. \quad [2.148]$$

Mặc dù E âm, cho trạng thái liên kết, nó phải lớn hơn $-V_0$, nhờ định lý cũ $E > V_{\min}$ (bài toán 2.2); nên l cũng thực và dương. Nghiệm tổng quát bằng³⁹

$$\psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx), \quad \text{for } -a < x < a, \quad [2.149]$$

trong đó C và D là những hằng số bất kỳ. Cuối cùng, trong vùng $x > a$ thế lại bằng không; nghiệm tổng quát bằng $\psi(x) = F\exp(-\kappa x) + G\exp(\kappa x)$, nhưng số hạng thứ hai phân kỳ (khi $x \rightarrow +\infty$), nên ta còn lại

$$\psi(x) = Fe^{-\kappa x}. \quad \text{for } x > a. \quad [2.150]$$

³⁹ Nếu bạn thích, bạn có thể viết nghiệm tổng quát dưới dạng hàm mũ ($C'e^{ilx} + D'e^{-ilx}$). Điều này dẫn tới cùng kết quả, nhưng vì thế đối xứng ta biết rằng các nghiệm sẽ chẵn hoặc lẻ, và kí hiệu sin/cos cho phép ta khai thác điều này trực tiếp.

Bước tiếp theo là áp dụng các điều kiện biên: ψ và $d\psi/dx$ liên tục tại $-a$ và $+a$. Nhưng ta có thể tiết kiệm ít thời gian bằng cách lưu ý rằng thế này là một hàm chẵn, nên ta có thể giả sử mà không mất tính tổng quát rằng các nghiệm là chẵn hoặc lẻ (bài toán 2.1(c)). Ưu điểm của điều này là ta chỉ cần áp dụng các điều kiện biên lên một phía (chẳng hạn tại $+a$); phía còn lại sẽ tự động đúng vì $\psi(-x) = \pm\psi(x)$. Tôi sẽ xét các nghiệm chẵn; bạn phải tính các nghiệm lẻ trong bài toán 2.29. Cos là chẵn (và sin là lẻ), nên tôi tìm nghiệm dưới dạng

$$\psi(x) = \begin{cases} Fe^{-\kappa x}, & \text{for } x > a. \\ D \cos(lx), & \text{for } 0 < x < a. \\ \psi(-x), & \text{for } x < 0. \end{cases} \quad [2.151]$$

Tính liên tục của $\psi(x)$, tại $x = a$,

$$Fe^{-\kappa a} = D \cos(la), \quad [2.152]$$

và tính liên tục của $d\psi/dx$,

$$-\kappa Fe^{-\kappa a} = -lD \sin(la). \quad [2.153]$$

Chia Pt 2.153 cho Pt 2.152, ta tìm được

$$\kappa = l \tan(la). \quad [2.154]$$

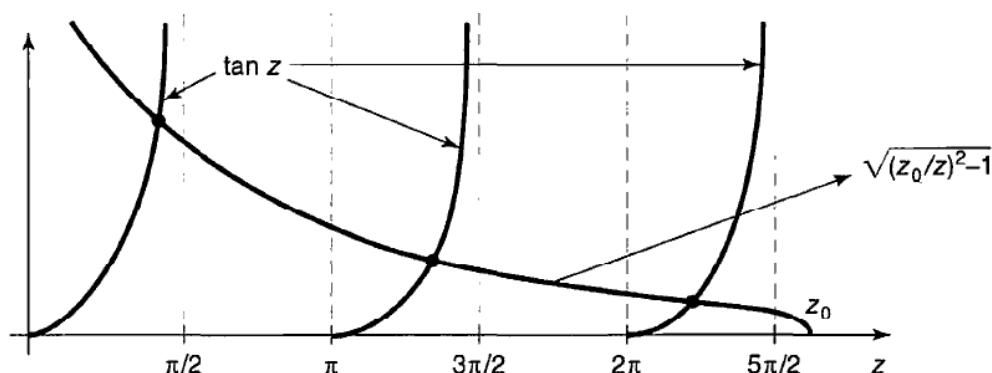
Đây là một công thức cho các năng lượng được phép, vì κ và l đều là hàm của E . Để giải tìm E , đầu tiên ta chuyển sang kí hiệu đẹp hơn: Cho

$$z \equiv la, \quad \text{and} \quad z_0 \equiv \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0}. \quad [2.155]$$

Theo Pt 2.146 và 2.148, $(\kappa^2 + l^2) = 2mV_0/\hbar^2$, nên $\kappa a = \sqrt{z_0^2 - z^2}$, và Pt 2.154 bằng

$$\tan z = \sqrt{(z_0/z)^2 - 1}. \quad [2.156]$$

Đây là một phương trình siêu việt cho z (và do đó cho E) là một hàm của z_0 (là một phép đo cho “kích thước” của giếng). Nó có thể được giải bằng số, bằng cách dùng máy tính, hay đồ thị, bằng cách vẽ $\tan z$ và $\sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$ trên cùng hình vẽ, và xem những điểm giao nhau (xem Hình 2.18). Hai trường hợp giới hạn đặc biệt thú vị:



Hình 2.18: Nghiệm đồ thị của Pt 2.156, cho $z_0 = 8$ (trạng thái chẵn)

1. **Giếng sâu, rộng.** Nếu z_0 rất lớn, các điểm giao nhau chỉ xuất hiện ngay dưới $z_n = n\pi/2$, có n lẻ; theo đó

$$E_n + V_0 \cong \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2a)^2}. \quad [2.157]$$

Nhưng $E + V_0$ là năng lượng *bên trên đáy của giếng*, và ở về phải ta có chính xác năng lượng của giếng vuông vô cùng, cho một giếng có bề rộng $2a$ (xem Pt 2.27) – hay, *nửa* của chúng, vì n này lẻ. (Dĩ nhiên các nghiệm còn lại đến từ các hàm sóng *lẻ*, như bạn sẽ tìm ra trong bài toán 2.29). Nên giếng vuông hữu hạn tiến về giếng vuông vô cùng, khi $V_0 \rightarrow \infty$; tuy nhiên, cho mọi V_0 *hữu hạn* chỉ có một số hữu hạn các trạng thái liên kết.

2. **Giếng hẹp, nông.** Khi z_0 giảm, có ngày càng ít trạng thái liên kết, đến khi cuối cùng (cho $z_0 < \pi/2$, ở đó trạng thái *lẻ* thấp nhất biến mất) chỉ còn lại một trạng thái. Tuy nhiên thật thú vị khi để ý rằng luôn có *một* trạng thái liên kết, bất kể giếng “yếu” đến thế nào.

Bạn cần chuẩn hóa ψ (Pt 2.151), nếu bạn thích (Bài toán 2.30), nhưng tôi sẽ tiếp tục với trạng thái tán xạ ($E > 0$). Ở bên trái, ở đó $V(x) = 0$, ta có

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \text{for } (x < -a), \quad [2.158]$$

ở đó (như thường lệ)

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad [2.159]$$

Bên trong giếng, ở đó $V(x) = -V_0$,

$$\psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx), \quad \text{for } (-a < x < a), \quad [2.160]$$

ở đó, như trước đây,

$$l \equiv \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}. \quad [2.161]$$

Ở bên phải, giả sử không có sóng tới trong vùng này, ta có

$$\psi(x) = Fe^{ikx}. \quad [2.162]$$

Ở đây, A là biên độ sóng tới, B là biên độ sóng phản xạ, và F là biên độ sóng truyền qua.⁴⁰

⁴⁰ Ta có thể tìm các hàm chẵn và lẻ, như ta đã làm trong trường hợp trạng thái liên kết, nhưng bài toán tán xạ thì bất đối xứng, vì các sóng tới chỉ từ một phía, và kí hiệu hàm mũ (biểu diễn các sóng di chuyển) thì tự nhiên hơn trong trường hợp này.

Có bốn điều kiện biên: Tính liên tục của ψ tại $-a$ cho

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = -C \sin(la) + D \cos(la), \quad [2.163]$$

tính liên tục của $d\psi/dx$ tại $-a$ cho

$$ik[Ae^{-ika} - Be^{ika}] = l[C \cos(la) + D \sin(la)] \quad [2.164]$$

tính liên tục của $\psi(x)$ tại $+a$ cho

$$C \sin(la) + D \cos(la) = Fe^{ika}. \quad [2.165]$$

và tính liên tục của $d\psi/dx$ tại $+a$ yêu cầu

$$l[C \cos(la) - D \sin(la)] = ikFe^{ika}. \quad [2.166]$$

Ta dùng hai điều kiện để triệt tiêu C và D , và giải hai điều kiện còn lại cho B và F (xem bài toán 2.32):

$$B = i \frac{\sin(2la)}{2kl} (l^2 - k^2) F, \quad [2.167]$$

$$F = \frac{e^{-2ika} A}{\cos(2la) - i \frac{(k^2 + l^2)}{2kl} \sin(2la)}. \quad [2.168]$$

Hệ số truyền qua ($T = |F|^2/|A|^2$), được biểu diễn theo các biến ban đầu, được cho bởi

$$T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)} \sin^2 \left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \right). \quad [2.169]$$

Lưu ý rằng $T = 1$ (giống trở nên “trong suốt”) bất cứ khi nào sin bằng không, tức là, khi

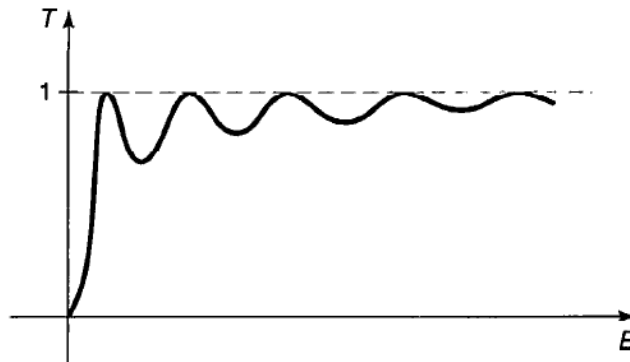
$$\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E_n + V_0)} = n\pi, \quad [2.170]$$

khi n là số nguyên bất kỳ. Các năng lượng cho sự truyền qua hoàn hảo, khi đó được cho bởi

$$E_n + V_0 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2a)^2}, \quad [2.171]$$

đúng bằng năng lượng được phép cho giếng vuông vô hạn. T được vẽ trong hình 2.19, là một hàm của năng lượng.⁴¹

⁴¹ Hiện tượng thú vị này đã được quan sát trong phòng thí nghiệm, dưới dạng **hiệu ứng Ramsauer-Townsend**. Để bàn luận rõ ràng xem Richard W. Robinett, *Quantum Mechanics*, Oxford U.P. 1997, Mục 12.4.1.



Hình 2.19: Hệ số truyền qua là hàm của năng lượng (Pt 2.169)

CHƯƠNG 3

HÌNH THỨC LUẬN

3.1 KHÔNG GIAN HILBERT

Trong hai chương vừa rồi ta đã phát hiện ra một số tính chất thú vị của những hệ lượng tử đơn giản. Một số tính chất là những đặc điểm “ngẫu nhiên” của những thể cụ thể (chẳng hạn khoảng cách đều nhau của các mức năng lượng cho dao động tử điều hòa), nhưng những tính chất khác dường như tổng quát hơn, và sẽ tốt nếu chứng minh chúng một cách đầy đủ (chẳng hạn nguyên lý bất định và tính trực giao của các trạng thái dừng). Mục đích của chương này là trình bày lại lý thuyết dưới một dạng chắc chắn hơn, với lưu ý đó. Không có nhiều cái thật sự *mới* ở đây; thay vào đó ý tưởng là làm tương thích những cái ta đã khám phá trong những trường hợp cụ thể.

Lý thuyết lượng tử dựa vào hai cơ sở: *hàm sóng* và *toán tử*. Trạng thái của một hệ được biểu diễn bằng hàm sóng của nó, những đại lượng quan sát được được biểu diễn bằng toán tử. Về mặt toán học, hàm sóng thỏa các điều kiện xác định cho những **vector** trừu tượng, và toán tử tác động lên chúng là **những phép biến đổi tuyến tính**. Nên ngôn ngữ tự nhiên của cơ học lượng tử là **đại số tuyến tính**.¹

Nhưng tôi ngờ rằng, nó không phải là dạng đại số tuyến tính mà bạn quen thuộc ngay. Trong một không gian N chiều sẽ đơn giản nhất khi biểu diễn một vector $|\alpha\rangle$, bằng một cột có N thành phần, $\{a_n\}$, so với một cơ sở trực chuẩn cụ thể:

$$|\alpha\rangle \rightarrow \mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}. \quad [3.1]$$

Tích trong, $\langle\alpha|\beta\rangle$, của hai vector (tổng quát hóa tích chấm trong không gian ba chiều) là số phức,

$$\langle\alpha|\beta\rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \cdots + a_N^* b_N. \quad [3.2]$$

Phép biến đổi tuyến tính, T , được biểu diễn bằng **ma trận** (đối với cơ sở xác định), tác động lên vector (để tạo ra vector mới) bằng các qui tắc thông thường của phép nhân ma trận:

$$|\beta\rangle = T|\alpha\rangle \rightarrow \mathbf{b} = \mathbf{T}\mathbf{a} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1N} \\ t_{21} & t_{22} & \cdots & t_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ t_{N1} & t_{N2} & \cdots & t_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}. \quad [3.3]$$

Nhưng các “vector” mà ta xét trong cơ học lượng tử (hầu hết) là *hàm*, và chúng tồn tại trong không gian *vô hạn* chiều. Đối với chúng kí hiệu ma trận cột là bất tiện, và những phép biến đổi được thực hiện tốt trong trường hợp số chiều hữu hạn có thể có vấn đề. (Lý do nền tảng là trong khi tổng *hữu hạn* trong Pt 3.2 luôn tồn tại, một tổng *vô hạn* – hay một tích phân – có thể không hội tụ, trong trường hợp đó tích trong không tồn tại, và bất cứ lập luận nào liên

quan đến tích trong ngay lập tức là đáng nghi ngờ.) Nên mặc dù hầu hết các thuật ngữ và kí hiệu có thể quen thuộc, ta phải phải cẩn thận khi tiếp cận chủ đề này.

Một tập hợp các hàm của x tạo thành một không gian vectơ, nhưng cho mục đích của ta nó quá lớn. Để biểu diễn một trạng thái vật lý khả dĩ, hàm sóng Ψ phải được chuẩn hóa:

$$\int |\Psi|^2 dx = 1.$$

Tập hợp các **hàm bình phương khả tích**, trên một khoảng xác định,²

$$f(x) \text{ such that } \int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty, \quad [3.4]$$

tạo thành một không gian vectơ (nhỏ hơn nhiều) (xem bài toán 3.1(a)). Các nhà toán học gọi nó là $L_2(a, b)$; các nhà vật lý gọi nó là **không gian Hilbert**.³ Trong cơ học lượng tử, khi đó,

[3.5] **Các hàm sóng nằm trong không gian Hilbert**

² Đối với chúng ta, các cận (a và b) gần như sẽ luôn bằng $\pm\infty$, nhưng hiện giờ ta cũng nên giữ chúng tổng quát hơn.

³ Về mặt kỹ thuật, một không gian Hilbert là một **không gian tích trong đầy đủ**, và tập hợp các hàm bình phương khả tích chỉ là *một ví dụ* của một không gian Hilbert – thật vậy, mọi không gian vectơ hữu hạn chiều là một không gian Hilbert. Nhưng vì L_2 là phạm vi của cơ học lượng tử, nó là cái các nhà vật lý thường nghĩ tới khi họ nói “không gian Hilbert.” Tiện đây, từ **đầy đủ** ở đây nghĩa là dãy Cauchy của các hàm trong không gian Hilbert hội tụ tới một hàm cũng nằm trong không gian này; nó không có “chỗ trống” nào trong đó, cũng như tập hợp tất cả các số thực không có chỗ trống (trái lại, không gian của mọi đa thức, chẳng hạn, cũng như tập hợp mọi số hữu tỉ, chắc chắn có chỗ trống trong nó). Tính đầy đủ của một *không gian* không liên quan gì đến tính đầy đủ (không may dùng cùng từ) của một *tập hợp các hàm*, vốn là tính chất rằng mọi hàm khác có thể được biểu diễn là một tổ hợp tuyến tính của chúng.

Ta định nghĩa **tích trong của hai hàm**, $f(x)$ và $g(x)$, như sau:

$$\langle f | g \rangle \equiv \int_a^b f(x)^* g(x) dx. \quad [3.6]$$

Nếu cả f và g bình phương khả tích (tức là, nếu chúng cùng nằm trong không gian Hilbert), thì tích trong của chúng đảm bảo tồn tại (tích phân trong Pt 3.6 hội tụ tới một con số hữu hạn.)⁴ Điều này có được từ **bất đẳng thức Schwarz** cho tích phân:⁵

$$\left| \int_a^b f(x)^* g(x) dx \right| \leq \sqrt{\int_a^b |f(x)|^2 dx} \sqrt{\int_a^b |g(x)|^2 dx}. \quad [3.7]$$

⁴ Trong Chương 2 đôi khi ta buộc phải gặp những hàm không chuẩn hóa được. Những hàm như vậy nằm ngoài không gian Hilbert, và ta sẽ xét nó với lưu ý đặc biệt, như bạn sẽ thấy ngay. Hiện tại tôi sẽ giả sử rằng mọi hàm ta xét nằm trong không gian Hilbert.

⁵ Để chứng minh, xem F. Riesz và B. Sz.-Nagy. *Functional Analysis* (Uger, New York, 1955), Mục 21. Trong một không gian vectơ hữu hạn chiều bất đẳng thức Schwarz, $|\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \leq \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle$, dễ chứng minh (xem bài toán A.5). Nhưng chứng minh đó *giả định* sự tồn tại của các tích trong, vốn là cái ta đang muốn *thiết lập* ở đây.

Bạn có thể tự kiểm tra rằng Pt 3.6 thỏa mọi điều kiện cho một tích trong (Bài toán 3.1(b)). Lưu ý đặc biệt rằng

$$\langle g|f \rangle = \langle f|g \rangle^*. \quad [3.8]$$

Hơn nữa, tích trong của $f(x)$ với chính nó,

$$\langle f|f \rangle = \int_a^b |f(x)|^2 dx, \quad [3.9]$$

là *thực* và không âm; nó chỉ *bằng không* khi $f(x) = 0$.

⁶ Còn về một hàm bằng không ở mọi nơi trừ một số điểm cô lập? Tích phân (Pt 3.9) vẫn triệt tiêu, ngay cả khi bản thân hàm số không triệt tiêu. Nếu điều này làm bạn phiền, bạn nên học chuyên ngành toán. Trong vật lý những hàm có vấn đề như vậy không xuất hiện, nhưng trong mọi trường hợp, trong không gian Hilbert hai hàm có cùng bình phương tích phân được xem là tương đương. Về mặt kỹ thuật, các vectơ trong không gian Hilbert biểu diễn những **lớp hàm tương đương**.

Một hàm được nói là **được chuẩn hóa** nếu tích trong của nó với chính nó bằng 1; hai hàm là **trực giao** nếu tích trong của chúng bằng 0; và một tập hàm, $\{f_n\}$, là **trực chuẩn** nếu chúng được chuẩn hóa và trực giao từng đôi một:

$$\langle f_m|f_n \rangle = \delta_{mn}. \quad [3.10]$$

Cuối cùng, một tập hàm là **đầy đủ** nếu mọi hàm *khác* (trong không gian Hilbert) có thể được biểu diễn là một tổ hợp tuyến tính của chúng:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x). \quad [3.11]$$

Nếu các hàm $\{f_n(x)\}$ trực chuẩn, các hệ số được cho bởi mẹo Fourier:

$$c_n = \langle f_n|f \rangle. \quad [3.12]$$

Như bạn có thể tự kiểm tra. Dĩ nhiên tôi đã đoán trước thuật ngữ này trong Chương 2. (Các trạng thái dừng cho giếng vuông vô cùng (Pt 2.28) tạo thành một tập trực chuẩn đầy đủ trên khoảng $(0, a)$; các trạng thái dừng cho dao động tử điều hòa (Pt 2.67 hay 2.85) là một tập trực chuẩn đầy đủ trên khoảng $(-\infty, \infty)$.)

3.2 CÁC ĐẠI LƯỢNG QUAN SÁT ĐƯỢC

3.2.1 Các toán tử Hermit

Giá trị trung bình của một đại lượng quan sát được $Q(x, p)$ có thể được biểu diễn rất gọn bằng kí hiệu tích trong:⁷

$$\langle Q \rangle = \int \Psi^* \hat{Q} \Psi dx = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle. \quad [3.13]$$

⁷ Lưu ý rằng $\hat{Q}$ là toán tử được xây dựng từ Q bằng cách thay $p \rightarrow \hat{p} \equiv (\hbar / i) d / dx$. Những toán tử này là **tuyến tính**, theo nghĩa

$$\hat{Q}[af(x) + bg(x)] = a\hat{Q}f(x) + b\hat{Q}g(x)$$

Với mọi hàm f và g và mọi số phức a và b . Chúng tạo thành các *phép biến đổi tuyến tính* (Mục A.3) trên không gian của mọi hàm. Tuy nhiên đôi khi chúng mang một hàm *bên trong* không gian Hilbert thành một hàm *bên ngoài* nó (xem Bài toán 3.2(b)), và trong trường hợp này miền của toán tử có thể phải được giới hạn.

Bây giờ, kết quả của một phép đo phải là *thực*, và do đó, *bắt buộc*, bằng *trung bình* của nhiều phép đo:

$$\langle Q \rangle = \langle Q \rangle^*. \quad [3.14]$$

Nhưng liên hợp phức của một tích trong đảo thứ tự (Pt 3.8), nên

$$\langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = \langle \hat{Q} \Psi | \Psi \rangle. \quad [3.15]$$

Và điều này phải đúng cho mọi hàm sóng Ψ . Do đó những toán tử biểu diễn những *đại lượng quan sát được* có tính chất rất đặc biệt rằng

$$\langle f | \hat{Q} f \rangle = \langle \hat{Q} f | f \rangle \quad \text{for all } f(x). \quad [3.16]$$

Ta gọi những toán tử như vậy là toán tử **hermit**.

Thật vậy, hầu hết giáo trình yêu cầu một điều kiện mạnh hơn:

$$\langle f | \hat{Q} g \rangle = \langle \hat{Q} f | g \rangle \quad \text{for all } f(x) \text{ and all } g(x). \quad [3.17]$$

Nhưng dù khác nhau, điều này hoàn toàn tương đương với định nghĩa của tôi (Pt 3.16), như bạn sẽ chứng minh trong bài toán 3.3. Nên hãy dùng cái gì bạn thích. Điểm chính yếu là một toán tử hermit có thể được áp dụng cho thành phần đầu tiên của một tích trong hay cho thành phần thứ hai, với cùng kết quả, và các toán tử hermit xuất hiện tự nhiên trong cơ học lượng tử vì trị trung bình của chúng là thực:

Các đại lượng quan sát được được biểu diễn bằng toán tử hermit

[3.18]

Giờ, hãy *kiểm tra* điều này. Chẳng hạn, liệu toán tử xung lượng có hermit?

$$\langle f | \hat{p} g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^* \frac{\hbar}{i} \frac{dg}{dx} dx = \frac{\hbar}{i} f^* g \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} \right)^* g dx = \langle \hat{p} f | g \rangle. \quad [3.19]$$

Dĩ nhiên tôi đã dùng tích phân từng phần, và bỏ đi số hạng biên vì lý do thông thường: Nếu $f(x)$ và $g(x)$ là bình phương khả tích, chúng phải tiến tới không ở $\pm\infty$.⁸ Lưu ý cách liên hợp phức của i bù trừ dấu trừ có được từ tích phân từng phần – toán tử d/dx (không có i) không phải hermit, và nó không biểu diễn một đại lượng quan sát được.

⁸ Thật ra, điều này không hoàn toàn đúng. Như tôi đề cập trong chương 1, tồn tại những hàm có vấn đề vốn bình phương khả tích nhưng không tiến tới không ở vô cùng. Tuy nhiên, những hàm như vậy không xuất hiện trong vật lý, và nếu bạn lo lắng về nó bạn sẽ giới hạn miền của các toán tử của ta để loại bỏ chúng. Mặc dù trên khoảng *hữu hạn*, bạn thực sự phải cẩn thận với các số hạng biên, và một toán tử hermit trên $(-\infty, \infty)$ có thể không hermit trên $(0, \infty)$ hay $(-\pi, \pi)$. Nếu bạn lo lắng về giếng vuông vô cùng, an toàn nhất là xem những hàm sóng đó như nằm trên đường vô hạn – chúng phải bằng không bên ngoài khoảng $(0, a)$.

3.2.2 Các trạng thái xác định

Thông thường, khi bạn đo một đại lượng quan sát được Q trên một tập hợp các hệ được chuẩn bị đồng nhất, tất cả hệ trong cùng trạng thái Ψ , bạn không thu được kết quả giống nhau mỗi lần đo – đây là *tính bất định* của cơ học lượng tử.⁹ *Câu hỏi*: có thể chuẩn bị một trạng thái sao cho *mỗi* phép đo Q chắc chắn cho *cùng* kết quả (gọi nó là q)? Đó sẽ là một **trạng thái xác định**, nếu bạn thích, cho đại lượng quan sát được Q . (Thực vậy, ta đã biết một ví dụ: những trạng thái dừng là những trạng thái xác định của Hamiltonian: một phép đo năng lượng toàn phần, lên một hạt trong trạng thái dừng, chắc chắn cho năng lượng “được phép” tương ứng E_n .)

⁹ Dĩ nhiên tôi đang nói về những phép đo tốt – luôn có thể có sai lầm và thu kết quả sai, nhưng đó không phải lỗi của cơ học lượng tử.

Lúc đó, độ lệch chuẩn của Q , trong một trạng thái xác định, sẽ bằng *không*, tức là,

$$\sigma^2 = \langle (\hat{Q} - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle \Psi | (\hat{Q} - q)^2 | \Psi \rangle = \langle (\hat{Q} - q) \Psi | (\hat{Q} - q) \Psi \rangle = 0. \quad [3.21]$$

(Dĩ nhiên, nếu mỗi phép đo cho q , trung bình của nó cũng bằng q : $\langle Q \rangle = q$. Tôi cũng dùng việc Q , và do đó $Q - q$, là một toán tử *hermit*, để di chuyển một thừa số qua số hạng đầu tiên trong tích trong.) Nhưng hàm duy nhất mà tích trong với chính nó triệt tiêu là hàm 0, nên

$$\hat{Q}\Psi = q\Psi. \quad [3.22]$$

Đây là **phương trình trị riêng** cho toán tử Q ; Ψ là một **hàm riêng** của Q , và q là **trị riêng** tương ứng. Do đó

$$[3.23] \quad \boxed{\text{Trạng thái xác định là hàm riêng của } Q}$$

Phép đo Q trên một trạng thái như vậy chắc chắn cho trị riêng q .

Lưu ý rằng trị riêng là một *con số* (không phải là toán tử hay hàm). Bạn có thể nhân mọi hàm riêng bằng một hằng số, và nó vẫn là một hàm riêng, với cùng trị riêng. Không (0) không được tính là một hàm riêng (ta loại bỏ nó do định nghĩa – nếu không mọi con số sẽ là một trị riêng, vì $\hat{Q}0 = q0 = 0$ cho mọi toán tử Q và mọi q .) Nhưng không có gì sai nếu không là một trị riêng. Tập hợp mọi trị riêng của một toán tử được gọi là *phổ* của nó. Đôi khi hai (hay nhiều hơn) hàm riêng độc lập có chung trị riêng; trong trường hợp đó phổ được nói là *suy biến*.

Chẳng hạn, trạng thái xác định của năng lượng toàn phần là các hàm riêng của Hamiltonian:

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad [3.24]$$

Đây chính là phương trình Schrödinger độc lập thời gian. Trong trường hợp này ta dùng kí tự E cho trị riêng, và ψ viết thường cho hàm riêng (gắn thêm thừa số $\exp(-iEt/\hbar)$ để làm nó thành Ψ , nếu bạn thích; nó vẫn là một hàm riêng của H).

Ví dụ 3.1 Xét toán tử

$$\hat{Q} \equiv i \frac{d}{d\phi}, \quad [3.25]$$

trong đó ϕ là tọa độ cực thông thường trong hai chiều. (Toán tử này xuất hiện trong một trường hợp vật lý nếu bạn nghiên cứu một hạt trên một sợi dây; xem bài toán 2.46.) $\hat{Q}$ có hermit không? Tìm hàm riêng và trị riêng của nó.

Lời giải: Ở đây ta làm việc với những hàm $f(\phi)$ trên khoảng *hữu hạn* $0 \leq \phi \leq 2\pi$, và yêu cầu rằng

$$f(\phi + 2\pi) = f(\phi). \quad [3.26]$$

Vì ϕ và $\phi + 2\pi$ mô tả cùng điểm vật lý. Dùng tích phân từng phần,

$$\langle f | \hat{Q} g \rangle = \int_0^{2\pi} f^* \left(i \frac{dg}{d\phi} \right) d\phi = i f^* g \Big|_0^{2\pi} - \int_0^{2\pi} i \left(\frac{df^*}{d\phi} \right) g d\phi = \langle \hat{Q} f | g \rangle,$$

nên $\hat{Q}$ là hermit (lần này số hạng biên biến mất nhờ Pt 3.26).

Phương trình trị riêng,

$$i \frac{d}{d\phi} f(\phi) = q f(\phi), \quad [3.27]$$

có nghiệm tổng quát

$$f(\phi) = A e^{-iq\phi}. \quad [3.28]$$

Pt 3.26 giới hạn các giá trị khả dĩ của q :

$$e^{-iq2\pi} = 1 \Rightarrow q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad [3.29]$$

Phổ của toán tử này là tập hợp các số nguyên, và nó không suy biến.

3.3 HÀM RIÊNG CỦA TOÁN TỬ HERMIT

Bây giờ ta lưu ý đến các *hàm riêng của toán tử hermit* (về mặt vật lý: các trạng thái xác định của những đại lượng quan sát được). Chúng rơi vào hai loại: Nếu phổ là **rời rạc** (tức là các trị riêng tách rời nhau) thì các hàm riêng nằm trong không gian Hilbert và chúng cấu thành các trạng thái nhận biết được về mặt vật lý. Nếu phổ **liên tục** (tức là các trị riêng lấp đầy một khoảng) thì các hàm riêng không chuẩn hóa được, và chúng không biểu diễn những hàm sóng khả dĩ (mặc dù *tổ hợp tuyến tính* của chúng – liên quan đến một dải các trị riêng – có thể chuẩn hóa được). Một số toán tử chỉ có một phổ rời rạc (chẳng hạn Hamiltonian cho dao động tử điều hòa), một số chỉ có một phổ liên tục (chẳng hạn, Hamiltonian của hạt tự do), và một số có cả một phần rời rạc và một phần liên tục (chẳng hạn, Hamiltonian cho một giếng vuông hữu hạn). Trường hợp rời rạc dễ tính hơn, vì các tích trong thích hợp đảm bảo tồn tại – thật vậy điều này rất thường với lý thuyết số chiều hữu hạn (các vector riêng của một *ma trận* hermit). Tôi sẽ xét trường hợp rời rạc trước, và sau đó xét trường hợp liên tục.

3.3.1 Phổ rời rạc

Về mặt toán học, các hàm riêng chuẩn hóa được của một toán tử hermit có hai tính chất quan trọng:

Định lý 1: Trị riêng của chúng là *thực*.

Chứng minh: Giả sử

$$\hat{Q}f = qf.$$

(tức là, $f(x)$ là một hàm riêng của $\hat{Q}$, với trị riêng q), và¹⁰

$$\langle f | \hat{Q}f \rangle = \langle \hat{Q}f | f \rangle$$

($\hat{Q}$ là hermit). Khi đó

$$q \langle f | f \rangle = q^* \langle f | f \rangle$$

(q là một con số, nên nó đi ra ngoài tích phân, và vì hàm đầu tiên trong tích trong là liên hợp phức (Pt 3.6), nên q bên phải cũng vậy). Nhưng $\langle f | f \rangle$ không thể bằng không ($f(x) = 0$ không phải là một hàm riêng hợp pháp), nên $q = q^*$, và do đó q là thực. ĐPCM

¹⁰ Ở đây ta giả sử các hàm riêng nằm trong không gian Hilbert – nếu không tích trong có thể không hề tồn tại.

Điều này thật tiện: Nếu bạn đo một đại lượng quan sát được trên một hạt trong một trạng thái xác định, bạn sẽ có ít nhất một số thực.

Định lý 2: Những hàm riêng thuộc về những trị riêng khác biệt thì *trực giao*.

Chứng minh: Giả sử

$$\hat{Q}f = qf, \quad \text{and} \quad \hat{Q}g = q'g,$$

và $\hat{Q}$ là hermit. Khi đó $\langle f | \hat{Q}g \rangle = \langle \hat{Q}f | g \rangle$, nên

$$q' \langle f | g \rangle = q \langle f | g \rangle$$

(thêm nữa, các tích trong tồn tại vì các hàm riêng nằm trong không gian Hilbert do định nghĩa). Nhưng q là thực (từ định lý 1), nên nếu $q' \neq q$ ta phải có $\langle f | g \rangle = 0$. ĐPCM

Đó là lý do tại sao các trạng thái dừng của giếng vuông vô hạn, chẳng hạn, hay của dao động tử điều hòa, là trực giao – chúng là hàm riêng của Hamiltonian với các trị riêng khác biệt. Nhưng tính chất này không kì lạ với chúng, hoặc ngay cả với Hamiltonian – điều này đúng cho các trạng thái xác định của mọi đại lượng quan sát được.

Không may là, định lý 2 không cho ta biết gì về những trạng thái suy biến ($q' = q$). Tuy nhiên, nếu hai (hay nhiều hơn) hàm riêng có cùng trị riêng, bất cứ tổ hợp tuyến tính nào của chúng lại là một hàm riêng, với cùng trị riêng (bài toán 3.7(a)), và ta có thể dùng **qui trình chuẩn hóa Gram-Schmidt** (bài toán A.4) để *thiết lập* các hàm riêng trực giao trong mỗi không gian con suy biến. Hầu như không cần thiết để làm điều này (tạ ơn Thượng đế!), nhưng về nguyên tắc nó có thể luôn được làm. Nên *ngay cả khi có tồn tại suy biến* các hàm riêng có thể được chọn để trực giao, và khi thiết lập hình thức luận của cơ học lượng tử ta sẽ giả sử rằng điều này đã được thực hiện rồi. Điều này cho phép dùng mẹo Fourier, vốn phụ thuộc vào tính trực chuẩn của các hàm cơ sở.

Trong một không gian vectơ *hữu hạn* chiều các vectơ riêng của một ma trận hermit có đặc điểm cơ bản thứ ba: Chúng lấp đầy không gian (mọi vectơ có thể được biểu diễn là một tổ hợp tuyến tính của chúng). Không may là, phần chứng minh không tổng quát hóa cho không gian vô hạn chiều. Nhưng bản thân tính chất này là thiết yếu cho sự tương thích nội tại của cơ học lượng tử, nên (theo Dirac¹¹) ta sẽ xem nó là một *tiên đề* (hay, chính xác hơn, là một giới hạn của lớp các toán tử hermit có thể biểu diễn những đại lượng quan sát được):

Tiên đề: Các hàm riêng của một toán tử quan sát được là *đầy đủ*: Bất cứ hàm nào (trong không gian Hilbert) có thể được biểu diễn là một tổ hợp tuyến tính của chúng.¹²

3.3.2 Phổ liên tục

Nếu phổ của một toán tử hermit là *liên tục*, các hàm riêng không chuẩn hóa được, và các chứng minh của định lý 1 và 2 sai, vì các tích trong có thể không tồn tại. Tuy nhiên, có một ý nghĩa trong đó cả ba tính chất thiết yếu (thực, trực giao, và đầy đủ) vẫn đúng. Tôi nghĩ tốt nhất hãy tiếp cận trường hợp tình tế này thông qua những ví dụ cụ thể.

Ví dụ 3.2 Tìm các hàm riêng và trị riêng của toán tử xung lượng

Lời giải: Cho $f_p(x)$ là hàm riêng và p là trị riêng:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} f_p(x) = p f_p(x). \quad [3.30]$$

Nghiệm tổng quát là

$$f_p(x) = A e^{ipx/\hbar}.$$

Đây không phải là bình phương khả tích, với *mọi* giá trị (phức) của p – toán tử xung lượng *không* có hàm riêng trong không gian Hilbert. Và do đó, nếu ta tự giới hạn với các trị riêng *thực*, ta phải phục hồi lại một loại “tính trực chuẩn” nhân tạo. Xem bài toán 2.24(a) và 2.26,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_{p'}^*(x) f_p(x) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')x/\hbar} dx = |A|^2 2\pi\hbar \delta(p - p'). \quad [3.31]$$

Nếu ta lấy $A = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$, sao cho

$$f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}. \quad [3.32]$$

thì

$$\langle f_{p'} | f_p \rangle = \delta(p - p'). \quad [3.33]$$

làm nhớ lại tính trực chuẩn *thực* (Pt 3.10) – các chỉ số bây giờ là các biến liên tục, và delta Kronecker trở thành một delta Dirac, nhưng ngoài điều đó nó trông cũng vậy. Tôi sẽ gọi Pt 3.33 là **tính trực chuẩn Dirac**.

Quan trọng hơn cả, các hàm riêng là *đầy đủ*, với tổng (trong Pt 3.11) được thay bằng một tích phân : Mọi hàm (bình phương khả tích) $f(x)$ có thể được viết dưới dạng

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) f_p(x) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) e^{ipx/\hbar} dp. \quad [3.34]$$

Hệ số khai triển (bây giờ là một *hàm*, $c(p)$) thu được, như thông thường, nhờ mẹo Fourier :

$$\langle f_{p'} | f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \langle f_{p'} | f_p \rangle dp = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \delta(p - p') dp = c(p'). \quad [3.35]$$

Thay vào đó, bạn có thể có chúng từ định lý Plancherel (Pt 2.102), vì khai triển (Pt 3.34) không gì khác mà là một ảnh Fourier.

Các hàm riêng của xung lượng (Pt 3.32) có dạng sin, với bước sóng

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}. \quad [3.36]$$

Đây là hệ thức de Broglie cũ (Pt 1.39), mà tôi đã hứa chứng minh vào lúc thích hợp. Rõ ràng nó tinh tế hơn một chút so với de Broglie hình dung, vì bây giờ ta biết rằng thực sự không có cái nào là một hạt có xung lượng xác định. Nhưng ta có thể tạo ra một *bó* sóng chuẩn hóa được với một vùng xung lượng hẹp, và nó là đối tượng mà hệ thức de Broglie áp dụng.

Ta dùng Ví dụ 3.2 làm gì ? Mặc dù không có hàm riêng nào của p nằm trong không gian Hilbert, một họ hàm nào đó của chúng (những hàm có trị riêng *thực*) nằm ở « ngoại ô » gần,

có một loại tựa chuẩn hóa. Chúng không biểu diễn những trạng thái vật lý khả dĩ, nhưng chúng vẫn rất hữu ích (như ta đã thấy, khi nghiên cứu tán xạ một chiều).¹³

Ví dụ 3.3 Tìm hàm riêng và trị riêng của toán tử tọa độ.

Lời giải : Cho $g_y(x)$ là hàm riêng và y là trị riêng:

$$x g_y(x) = y g_y(x). \quad [3.37]$$

Ở đây y là một con số cố định (cho một hàm riêng cho trước nào đó), còn x là một biến liên tục. Hàm nào của x có tính chất rằng nhân nó với x cũng giống như nhân nó với hằng số y ? Dĩ nhiên nó phải bằng không, trừ điểm $x = y$; thật vậy, nó không gì khác ngoài hàm delta Dirac :

$$g_y(x) = A\delta(x - y).$$

Lần này trị riêng phải thực ; các hàm riêng không bình phương khả tích, nhưng nó lại chấp nhận tính trực chuẩn Dirac :

$$\int_{-\infty}^{\infty} g_{y'}^*(x) g_y(x) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - y') \delta(x - y) dx = |A|^2 \delta(y - y'). \quad [3.38]$$

Nếu ta chọn $A = 1$, thì

$$g_y(x) = \delta(x - y). \quad [3.39]$$

khi đó

$$\langle g_{y'} | g_y \rangle = \delta(y - y'). \quad [3.40]$$

Những hàm riêng này cũng đầy đủ :

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(y) g_y(x) dy = \int_{-\infty}^{\infty} c(y) \delta(x - y) dy, \quad [3.41]$$

với

$$c(y) = f(y) \quad [3.42]$$

(trong trường hợp này, nó cũng bình thường, nhưng bạn có thể có nó từ mẹo Fourier nếu bạn muốn).

Nếu phổ của một toán tử hermit là liên tục (lúc đó các trị riêng được kí hiệu bằng một biến liên tục $-p$ hay y , trong các ví dụ ; z , nói chung, sau này), các hàm riêng không chuẩn hóa được, chúng không nằm trong không gian Hilbert và chúng không biểu diễn những trạng thái vật lý khả dĩ ; tuy nhiên, các hàm riêng với trị riêng thực là trực chuẩn Dirac được và đầy đủ (với tổng bây giờ được thay bằng một tích phân). May mắn thay, đây là toàn bộ cái mà ta thật sự cần.

3.4 DIỄN GIẢI THỐNG KÊ TỔNG QUÁT

Trong Chương 1 tôi đã cho bạn thấy cách tính xác suất mà một hạt sẽ được tìm thấy ở một vị trí cụ thể, và cách xác định trị trung bình của bất cứ đại lượng quan sát được. Trong Chương 2 bạn đã học cách tìm các kết quả khả dĩ của một phép đo năng lượng và xác suất của chúng. Bây giờ tôi sắp phát biểu **diễn giải thống kê tổng quát**, bao gồm mọi cái này và có thể giúp bạn tìm ra các kết quả khả dĩ của mọi phép đo, và xác suất của chúng. Cùng với

phương trình Schrödinger (cho bạn biết hàm sóng tiến triển ra sao theo thời gian) nó là nền tảng của cơ học lượng tử.

Diễn giải thống kê tổng quát: Nếu bạn đo một đại lượng quan sát được $Q(x, p)$ trên một hạt trong trạng thái $\Psi(x, t)$, bạn chắc chắn thu được *một trong các trị riêng* của toán tử hermit $\hat{Q}(x, -i\hbar d/dx)$. Nếu phổ của $\hat{Q}$ là rời rạc, xác suất tìm thấy trị riêng cụ thể q_n liên hệ với hàm riêng trực chuẩn $f_n(x)$ là

$$|c_n|^2, \quad \text{where } c_n = \langle f_n | \Psi \rangle. \quad [3.43]$$

Nếu phổ là liên tục, có các trị riêng thực $q(z)$ và các hàm riêng trực chuẩn Dirac liên quan $f_z(x)$, xác suất có một kết quả trong miền dz bằng

$$|c(z)|^2 dz \quad \text{where } c(z) = \langle f_z | \Psi \rangle. \quad [3.44]$$

Sau phép đo, hàm sóng “suy sụp” thành trạng thái riêng tương ứng.¹⁴

¹⁴ Trong trường hợp của phổ liên tục sự suy sụp tới một miền hẹp quanh giá trị đo được, phụ thuộc vào độ chính xác của thiết bị đo.

Diễn giải thống kê thì khác căn bản với bất cứ cái ta đã gặp trong vật lý cổ điển. Một phương diện hơi khác giúp làm rõ điều đó: các hàm riêng của một toán tử quan sát được là *đầy đủ*, nên hàm sóng có thể được viết là một tổ hợp tuyến tính của chúng:

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n f_n(x). \quad [3.45]$$

(Để đơn giản, tôi sẽ giả sử rằng phổ là rời rạc; để tổng quát hóa lập luận này cho trường hợp liên tục.) Vì các hàm riêng là *trực chuẩn*, các hệ số được cho bởi mẹo Fourier:¹⁵

$$c_n = \langle f_n | \Psi \rangle = \int f_n(x)^* \Psi(x, t) dx. \quad [3.46]$$

¹⁵ Lưu ý rằng sự phụ thuộc thời gian – không được đề cập ở đây – được các hệ số mang; để làm rõ điều này, thực ra ta nên viết $c_n(t)$.

Về mặt định tính, c_n cho bạn biết “ f_n được chứa bao nhiêu trong Ψ ,” và một phép đo phải cho một trong các trị riêng của Q , dường như hợp lý rằng xác suất tìm được trị riêng cụ thể q_n sẽ được xác định bằng “lượng của f_n ” trong Ψ . Nhưng vì các xác suất được xác định bằng *bình phương* tuyệt đối của hàm sóng, đại lượng đo lường chính xác thực ra là $|c_n|^2$. Đó là ý chính của diễn giải thống kê tổng quát.¹⁶

Dĩ nhiên, xác suất *toàn phần* (lấy tổng theo mọi kết quả khả dĩ) phải bằng *một*:

$$\sum_n |c_n|^2 = 1. \quad [3.47]$$

và rõ ràng, điều này có từ sự chuẩn hóa của hàm sóng:

$$\begin{aligned} 1 = \langle \Psi | \Psi \rangle &= \left\langle \left(\sum_{n'} c_{n'} f_{n'} \right) \middle| \left(\sum_n c_n f_n \right) \right\rangle = \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n \langle f_{n'} | f_n \rangle \\ &= \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n \delta_{n'n} = \sum_n c_n^* c_n = \sum_n |c_n|^2. \end{aligned} \quad [3.48]$$

Tương tự, trị trung bình của Q phải bằng tổng lấy theo mọi kết quả khả dĩ của trị riêng nhân với xác suất tìm được trị riêng đó:

$$\langle Q \rangle = \sum_n q_n |c_n|^2. \quad [3.49]$$

Thật vậy,

$$\langle Q \rangle = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = \left\langle \left(\sum_{n'} c_{n'} f_{n'} \right) \left| \left(\hat{Q} \sum_n c_n f_n \right) \right. \right\rangle, \quad [3.50]$$

Nhưng $\hat{Q}f_n = q_n f_n$, nên

$$\langle Q \rangle = \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n q_n \langle f_{n'} | f_n \rangle = \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n q_n \delta_{n'n} = \sum_n q_n |c_n|^2. \quad [3.51]$$

Ít ra, đến giờ mọi thứ trông tương thích.

Liệu ta có thể tạo ra lại, bằng cách diễn đạt này, diễn giải thống kê ban đầu cho các phép đo tọa độ? Chắc chắn – nó hơi quá, nhưng đáng kiểm tra lại. Một phép đo x trên một hạt trong trạng thái Ψ phải cho một trong các trị riêng của toán tử tọa độ. Trong ví dụ 3.3, ta đã thấy rằng mỗi con số (thực) y là một trị riêng của x , và hàm riêng (trực chuẩn Dirac) tương ứng là $g_y(x) = \delta(x - y)$. Rõ ràng

$$c(y) = \langle g_y | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - y) \Psi(x, t) dx = \Psi(y, t), \quad [3.52]$$

nên xác suất có được một giá trị trong miền dy bằng $|\Psi(y, t)|^2 dy$, đúng là diễn giải thống kê ban đầu.

Còn về xung lượng? Trong ví dụ 3.2 ta đã thấy rằng các hàm riêng của toán tử xung lượng là $f_p(x) = (1/\sqrt{2\pi\hbar}) \exp(ipx/\hbar)$, nên

$$c(p) = \langle f_p | \Psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \Psi(x, t) dx. \quad [3.53]$$

Đây là một đại lượng quan trọng đến nỗi ta cho nó một tên gọi và kí hiệu đặc biệt: **hàm sóng trong không gian xung lượng** $\Phi(p, t)$. Chính *ảnh Fourier* của hàm sóng $\Psi(x, t)$ (**không gian tọa độ**) – mà, nhờ định lý Plancherel, là ảnh Fourier *ngược* của nó

$$\Phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \Psi(x, t) dx; \quad [3.54]$$

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \Phi(p, t) dp. \quad [3.55]$$

Theo diễn giải thống kê tổng quát, xác suất mà một phép đo xung lượng cho một kết quả trong miền dp bằng

$$|\Phi(p, t)|^2 dp. \quad [3.56]$$

Ví dụ 3.4 Một hạt có khối lượng m bị giam trong giếng có dạng hàm delta $V(x) = -\alpha\delta(x)$. Xác suất mà một phép đo xung lượng của nó sẽ cho một giá trị lớn hơn $p_0 = m\alpha/\hbar$ bằng bao nhiêu?

Lời giải: Hàm sóng (không gian tọa độ) bằng (Pt 2.129)

$$\Psi(x, t) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2} e^{-iEt/\hbar}$$

(trong đó $E = -m\alpha^2/2\hbar^2$). Do đó hàm sóng trong không gian xung lượng bằng

$$\Phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-iEt/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2} dx = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{p_0^{3/2} e^{-iEt/\hbar}}{p^2 + p_0^2}$$

(Tôi đã tra tích phân này). Khi đó xác suất bằng

$$\begin{aligned} \frac{2}{\pi} p_0^3 \int_{p_0}^{\infty} \frac{1}{(p^2 + p_0^2)^2} dp &= \frac{1}{\pi} \left[\frac{pp_0}{p^2 + p_0^2} + \tan^{-1} \left(\frac{p}{p_0} \right) \right] \Big|_{p_0}^{\infty} \\ &= \frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi} = 0.0908 \end{aligned}$$

(lại nữa, tôi đã tra tích phân này).

3.5 NGUYÊN LÝ BẤT ĐỊNH

Tôi đã phát biểu nguyên lý bất định (dưới dạng $\sigma_x \sigma_p \geq \hbar/2$), trở lại Mục 1.6, và bạn đã kiểm tra nó nhiều lần, trong các bài toán. Nhưng ta chưa từng *chứng minh* nó. Trong mục này tôi sẽ chứng minh một phiên bản tổng quát hơn của hệ thức bất định, và xét một số hệ quả của nó. Lập luận này đẹp, nhưng khá trừu tượng, nên hãy đọc kĩ.

3.5.1 Chứng minh nguyên lý bất định tổng quát

Đối với một đại lượng quan sát được A , ta có (Pt 3.21):

$$\sigma_A^2 = \langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi \rangle = \langle f | f \rangle,$$

trong đó $f \equiv (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi$. Tương tự, đối với một đại lượng khác quan sát được, B ,

$$\sigma_B^2 = \langle g | g \rangle, \quad \text{where } g \equiv (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi.$$

Do đó (dùng bất đẳng thức Schwarz, Pt 3.7)

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 = \langle f | f \rangle \langle g | g \rangle \geq |\langle f | g \rangle|^2. \quad [3.59]$$

Bây giờ, đối với mọi số phức z ,

$$|z|^2 = [\text{Re}(z)]^2 + [\text{Im}(z)]^2 \geq [\text{Im}(z)]^2 = \left[\frac{1}{2i} (z - z^*) \right]^2. \quad [3.60]$$

Do đó, đặt $z = \langle f | g \rangle$,

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} [\langle f|g \rangle - \langle g|f \rangle] \right)^2. \quad [3.61]$$

Nhưng

$$\begin{aligned} \langle f|g \rangle &= \langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle = \langle \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle B \rangle - \hat{B}\langle A \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle) \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \hat{A}\hat{B} \Psi \rangle - \langle B \rangle \langle \Psi | \hat{A} \Psi \rangle - \langle A \rangle \langle \Psi | \hat{B} \Psi \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle \langle \Psi | \Psi \rangle \\ &= \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle B \rangle \langle A \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle \\ &= \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle. \end{aligned}$$

Tương tự,

$$\langle g|f \rangle = \langle \hat{B}\hat{A} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle,$$

Nên

$$\langle f|g \rangle - \langle g|f \rangle = \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle \hat{B}\hat{A} \rangle = \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle,$$

trong đó

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

là giao hoán tử của hai toán tử (Pt 2.48). *Kết luận:*

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right)^2. \quad [3.62]$$

Đây là **nguyên lý bất định** (tổng quát). Bạn có thể nghĩ i làm nó tầm thường – về phải không *âm* à? Không, vì giao hoán tử của hai toán tử hermit mang một thừa số của i , và hai i đó triệt tiêu.¹⁷

¹⁷ Chính xác hơn, giao hoán tử của hai toán tử hermit thì lại phản hermit ($\hat{Q}^\dagger = -\hat{Q}$) và trị trung bình của nó là ảo (bài toán 3.26).

Là một ví dụ, giả sử đại lượng quan sát được đầu tiên là vị trí ($\hat{A} = x$), và đại lượng thứ hai là xung lượng ($\hat{B} = (\hbar/i)d/dx$). Ta đã tính giao hoán tử trong Chương 2 (Pt 2.51):

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

Nên

$$\sigma_x^2 \sigma_p^2 \geq \left(\frac{1}{2i} i\hbar \right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2,$$

hay, vì độ lệch chuẩn thì dương về bản chất,

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad [3.63]$$

Đó là hệ thức bất định Heisenberg ban đầu, nhưng bây giờ ta thấy rằng nó chỉ là một ứng dụng của một định lý tổng quát hơn nhiều.

Thật ra, có một “nguyên lý bất định” cho *mọi cặp đại lượng quan sát được có các toán tử không giao hoán* – ta gọi chúng là các **đại lượng không tương thích**. Các đại lượng không tương thích không có chung hàm riêng – ít nhất, chúng không thể có một *tập đầy đủ* các hàm riêng chung (xem bài toán 3.15). Trái lại, các đại lượng *tương thích* (giao hoán) có những tập đầy đủ các hàm riêng đồng thời.¹⁸ Chẳng hạn, trong nguyên tử hydro (mà ta sẽ xét trong Chương 4) Hamiltonian, độ lớn của momen xung lượng, và thành phần z của momen xung lượng là những đại lượng tương thích một cách tương hỗ, và ta sẽ thiết lập các hàm riêng đồng thời cho cả ba, được kí hiệu bằng các trị riêng tương ứng. Nhưng không có hàm riêng của tọa độ mà cũng là một hàm riêng của xung lượng, bởi vì các toán tử này không tương thích.

¹⁸ Điều này ứng với việc các ma trận không giao hoán không thể được chéo hóa đồng thời (tức là, chúng không thể được đưa về dạng chéo bằng cùng phép biến đổi tương đương), trong khi đó các ma trận hermit giao hoán có thể được chéo hóa đồng thời. Xem mục A.5.

Lưu ý rằng nguyên lý bất định không phải là một giả thiết *thêm* trong cơ học lượng tử, mà là một *hệ quả* của diễn giải thống kê. Bạn có thể tự hỏi làm sao lại bắt nó phải như vậy trong phòng thí nghiệm – *tại sao* bạn không thể xác định (chẳng hạn) cả vị trí và xung lượng của một hạt? Chắc chắn bạn có thể đo vị trí của hạt đó, nhưng việc đo làm suy sụp hàm sóng tới một đỉnh hẹp, cần mang một miền rộng các bước sóng (và do đó các xung lượng) trong khai triển Fourier. Nếu bây giờ bạn đo xung lượng, trạng thái đó sẽ suy sụp tới một sóng hình sin dài, có bước sóng xác định (bây giờ) – nhưng hạt không còn có vị trí bạn có được trong phép đo đầu tiên.¹⁹ Do đó vấn đề là phép đo thứ hai làm kết quả của phép đo thứ nhất không dùng được. Chỉ khi hàm sóng đồng thời là một hàm riêng của cả hai đại lượng thì sẽ có thể thực hiện phép đo thứ hai mà không ảnh hưởng đến trạng thái của hạt (sự suy sụp thứ hai sẽ không thay đổi gì cả, trong trường hợp đó). Nhưng điều này chỉ có thể, nói chung, nếu hai đại lượng là tương thích.

3.5.2 Bó sóng thỏa độ bất định tối thiểu

Ta đã xét hai lần hàm sóng *đạt tới* giới hạn bất định tọa độ-xung lượng ($\sigma_x \sigma_p = \hbar/2$): trạng thái cơ bản của dao động tử điều hòa (bài toán 2.11) và bó sóng Gauss cho hạt tự do (bài toán 2.22). Điều này đề ra một câu hỏi thú vị: Bó sóng nào *tổng quát nhất* thỏa độ bất định tối thiểu? Khi nhìn lại chứng minh của nguyên lý bất định, ta lưu ý rằng có hai điểm ở đó các bất đẳng thức xuất hiện trong lập luận: Pt 3.59 và Pt 3.60. Giả sử ta cần rằng mỗi bất đẳng thức này là một *đẳng thức*, và xem cái nó cho ta biết về.

Bất đẳng thức Schwarz trở thành một đẳng thức khi hàm này là bội của hàm kia: $g(x) = cf(x)$, với số phức c nào đó (xem bài toán A.5). Trong khi đó, trong Pt 3.60 tôi đã bỏ đi phần thực của z ; đẳng thức có được nếu $\text{Re}(z) = 0$, tức là, nếu $\text{Re}\langle f|g \rangle = \text{Re}(c\langle f|f \rangle) = 0$. Bây giờ $\langle f|f \rangle$ chắc chắn là thực, nên điều này nghĩa là hằng số c phải thuần ảo – hãy gọi nó là ia . Điều kiện cần và đủ cho độ bất định tối thiểu, khi đó, là

$$g(x) = iaf(x), \quad \text{where } a \text{ is real.} \quad [3.66]$$

Với nguyên lý bất định tọa độ- xung lượng tiêu chuẩn này trở thành:

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - \langle p \rangle \right) \Psi = ia(x - \langle x \rangle) \Psi. \quad [3.67]$$

Đó là một phương trình vi phân cho Ψ là một hàm của x . Nghiệm tổng quát của nó (Pt 3.16) là

$$\Psi(x) = Ae^{-a(x-\langle x \rangle)^2/2\hbar} e^{i\langle p \rangle x/\hbar}. \quad [3.68]$$

Rõ ràng bó sóng thỏa độ bất định tối thiểu là một hàm *gauss* – và hai ví dụ ta đã xét trước đây có dạng gauss.²⁰

²⁰ Lưu ý rằng đó chỉ là sự phụ thuộc của Ψ theo x được xét ở đây – các “hằng số” A , a , $\langle x \rangle$, và $\langle p \rangle$ có thể là các hàm theo thời gian, và đối với vấn đề này Ψ có thể tiến triển ra khỏi dạng tối thiểu. Mọi cái tôi khẳng định ở đây là, nếu, ở một thời điểm nào đó, hàm sóng có dạng gauss theo x , thì (ở thời điểm đó) tích độ bất định là tối thiểu.

3.5.3 Nguyên lý bất định năng lượng – thời gian

Nguyên lý bất định vị trí – xung lượng thường được viết dưới dạng

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}; \quad [3.69]$$

Δx (“độ bất định” của x) là kí hiệu không chặt chẽ (và cách dùng ẩu) cho độ lệch chuẩn của các kết quả của các phép đo lặp lại lên các hệ được chuẩn bị như nhau.²¹ Pt 3.69 thường đi kèm với **nguyên lý bất định năng lượng – thời gian**,

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}. \quad [3.70]$$

Thật vậy, trong trường hợp của thuyết tương đối hẹp dạng năng lượng – thời gian có thể được xem là một *hệ quả* của phiên bản tọa độ – xung lượng, vì x và t (hay thay vào đó, ct) đi cùng nhau trong vector bốn chiều tọa độ – thời gian, còn p và E (hay E/c) đi cùng nhau trong vector bốn chiều năng – xung lượng. Nên trong lý thuyết tương đối tính Pt 3.70 sẽ cần để đi kèm với Pt 3.69. Nhưng ta không xét cơ học lượng tử tương đối tính. Phương trình Schrödinger là phi tương đối tính: nó xét t và x khác nhau (nó là một phương trình vi phân bậc *một* theo t , nhưng bậc *hai* theo x), và Pt 3.70 thật sự không bao hàm bởi Pt 3.69. Mục đích của tôi bây giờ là *dẫn ra* nguyên lý bất định năng lượng – thời gian, và trong lúc dẫn ra muốn thuyết phục bạn rằng nó thật sự là một thứ hoàn toàn khác, có vẻ bề ngoài giống nguyên lý bất định tọa độ – xung lượng và điều đó dẫn tới nhầm lẫn.

Rốt cuộc, tọa độ, xung lượng, và năng lượng đều là những biến động lực học – những đặc trưng đo được của hệ, ở mọi thời điểm cho trước. Nhưng bản thân thời gian không phải là một biến động lực học (trong lý thuyết phi tương đối tính): Bạn không ra ngoài và đo “thời gian” của một hạt, như bạn đo vị trí hay năng lượng của chúng. Thời gian là biến *độc lập*, các đại lượng động lực học là các *hàm* của nó. Đặc biệt, Δt trong nguyên lý bất định năng lượng – thời gian không phải là độ lệch chuẩn của một tập hợp các phép đo thời gian; nói một cách chặt chẽ (lát nữa tôi sẽ làm rõ điều này hơn) nó là *thời gian mà hệ cần để thay đổi đáng kể*.

Để ước lượng hệ thay đổi nhanh ra sao, hãy tính đạo hàm theo thời gian của trị trung bình của đại lượng quan sát được, $Q(x, p, t)$:

$$\frac{d}{dt}\langle Q \rangle = \frac{d}{dt}\langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} \left| \hat{Q} \Psi \right. \right\rangle + \left\langle \Psi \left| \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \Psi \right. \right\rangle + \left\langle \Psi \left| \hat{Q} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right. \right\rangle.$$

Lúc này, phương trình Schrödinger cho

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

(trong đó $H = p^2/2m + V$ là Hamiltonian). Nên

$$\frac{d}{dt}\langle Q \rangle = -\frac{1}{i\hbar}\langle \hat{H}\Psi | \hat{Q}\Psi \rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle \Psi | \hat{Q}\hat{H}\Psi \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle.$$

Nhưng H hermit, nên $\langle \hat{H}\Psi | \hat{Q}\Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{H}\hat{Q}\Psi \rangle$, và do đó

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle Q \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle.} \quad [3.71]$$

Đây tự nó là một kết quả thú vị và hữu ích (xem bài toán 3.17 và 3.31). Trong trường hợp thông thường ở đó toán tử không phụ thuộc tường minh vào thời gian,²² nó cho ta biết rằng tốc độ thay đổi của trị trung bình được xác định bằng giao hoán tử của toán tử đó với Hamiltonian. Đặc biệt, nếu Q giao hoán với H , thì $\langle Q \rangle$ bằng hằng số, và theo nghĩa này Q là một đại lượng *bảo toàn*.

²² Những toán tử phụ thuộc tường minh vào t khá hiếm, nên *hầu như lúc nào* $\partial \hat{Q} / \partial t = 0$. Là một ví dụ của sự phụ thuộc *tường minh* vào thời gian, xét thế năng của một dao động tử điều hòa có hằng số lò xo thay đổi (có lẽ nhiệt độ tăng, nên lò xo trở nên linh hoạt hơn): $Q = (1/2)m[\omega(t)]^2 x^2$.

Bây giờ, giả sử ta lấy $A = H$ và $B = Q$, trong nguyên lý bất định tổng quát (Pt 3.62), và giả sử rằng Q không phụ thuộc tường minh vào t :

$$\sigma_H^2 \sigma_Q^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle \right)^2 = \left(\frac{1}{2i} \hbar \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2 \left(\frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right)^2.$$

Hay, đơn giản hơn,

$$\sigma_H \sigma_Q \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right|. \quad [3.72]$$

Hãy định nghĩa $\Delta E \equiv \sigma_H$, và

$$\Delta t \equiv \frac{\sigma_Q}{|d\langle Q \rangle/dt|}. \quad [3.73]$$

Khi đó

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}, \quad [3.74]$$

Và đó là nguyên lý bất định năng lượng – thời gian. Nhưng lưu ý rằng Δt có nghĩa gì ở đây. Vì

$$\sigma_Q = \left| \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right| \Delta t,$$

Δt biểu diễn *lượng thời gian cần để giá trị trung bình của Q thay đổi một độ lệch chuẩn*.²³ Đặc biệt, Δt phụ thuộc hoàn toàn vào đại lượng nào (Q) bạn cần xét – sự thay đổi có thể nhanh cho một đại lượng và chậm cho một đại lượng khác. Nhưng nếu ΔE nhỏ, thì tốc độ thay đổi của mọi đại lượng phải rất chậm; hay, để nói cách khác, nếu *mọi* đại lượng thay đổi nhanh, “độ bất định” của năng lượng phải lớn.

²³ Đây đôi khi được gọi là công thức “Mandelstam - Tamm” của nguyên lý bất định năng lượng – thời gian. Để ôn lại nhiều cách tiếp cận khác, xem Paul Busch, Found. Phys. 20, 1 (1990).

Ví dụ 3.5 Trong trường hợp của một trạng thái dừng, sao cho năng lượng được xác định duy nhất, mọi trị trung bình là hằng số theo thời gian ($\Delta E = 0 \Rightarrow \Delta t = \infty$) – như ta đã lưu ý trước đây (xem Pt 2.9). Để làm điều này *xảy ra* bạn phải lấy một tổ hợp tuyến tính của ít nhất hai trạng thái tĩnh – tức:

$$\Psi(x, t) = a\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + b\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}.$$

Nếu a, b, ψ_1 , và ψ_2 là thực,

$$|\Psi(x, t)|^2 = a^2(\psi_1(x))^2 + b^2(\psi_2(x))^2 + 2ab\psi_1(x)\psi_2(x) \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar}t\right).$$

Chu kỳ dao động là $\tau = 2\pi\hbar/(E_2 - E_1)$. Nói chặt chẽ, $\Delta E = E_2 - E_1$ và $\Delta t = \tau$ (cho tính toán *chính xác* xem bài toán 3.18), nên

$$\Delta E \Delta t = 2\pi\hbar,$$

chính là $\geq \hbar/2$.

Ví dụ 3.6 Cần bao lâu để một bó sóng của hạt tự do đi qua một điểm cụ thể (hình 3.1)? Về mặt định tính (một phiên bản chính xác được xét trong bài toán 3.19), $\Delta t = \Delta x/v = m\Delta x/p$, nhưng $E = p^2/2m$, nên $\Delta E = p\Delta p/m$. Do đó

$$\Delta E \Delta t = \frac{p\Delta p}{m} \frac{m\Delta x}{p} = \Delta x \Delta p,$$

là $\geq \hbar/2$ do nguyên lý bất định tọa độ – xung lượng.

Ví dụ 3.7 Hạt Δ tồn tại khoảng 10^{-23} giây, trước khi phân rã tự phát. Nếu bạn làm một biểu đồ của mọi phép đo khối lượng của nó, bạn thu được một loại đường cong hình chuông ở $1232 \text{ MeV}/c^2$, có độ rộng cỡ $120 \text{ MeV}/c^2$ (hình 3.2). Tại sao khối lượng nghi (mc^2) đôi khi lớn hơn 1232, và đôi khi nhỏ hơn? Đây là sai số thí nghiệm? Không phải, vì

$$\Delta E \Delta t = \left(\frac{120}{2} \text{ MeV}\right) (10^{-23} \text{ sec}) = 6 \times 10^{-22} \text{ MeV sec},$$

trong đó $\hbar/2 = 3 \times 10^{-22} \text{ MeV giây}$. Nên độ mở rộng của m nhỏ như nguyên lý bất định cho phép – một hạt có thời gian sống ngắn như vậy không có một khối lượng xác định tốt.²⁴

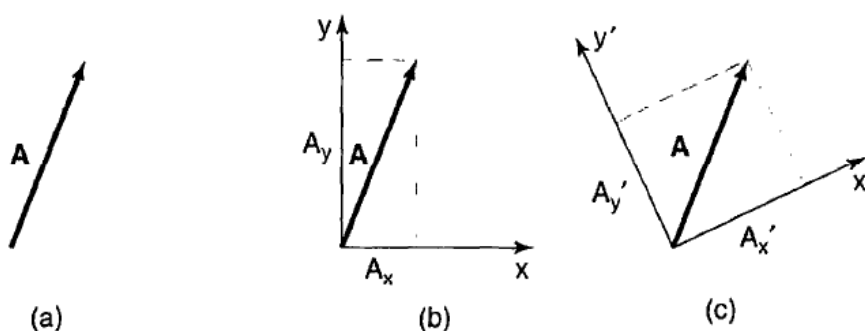
Lưu ý rằng nhiều ý nghĩa cụ thể gắn với số hạng Δt trong những ví dụ này – Trong ví dụ 3.5 nó là một chu kỳ dao động; trong ví dụ 3.6 nó là thời gian hạt cần để đi qua một điểm; trong ví dụ 3.7 nó là thời gian sống của một hạt không bền. Tuy nhiên trong mọi trường hợp, Δt là thời gian hệ cần để thực hiện sự thay “đáng kể”.

Họ thường nói rằng nguyên lý bất định nghĩa là năng lượng không bảo toàn một cách chặt chẽ trong cơ học lượng tử – rằng bạn được phép “mượn” năng lượng ΔE , chừng nào bạn

“trả lại” trong một khoảng thời gian $\Delta t \approx \hbar/(2\Delta E)$; sự vi phạm càng lớn, thời gian mà nó xuất hiện càng nhỏ. Bây giờ có nhiều tài liệu đáng tin cậy về nguyên lý bất định năng lượng – thời gian, nhưng đây không phải vậy. Cơ học lượng tử không bao giờ cho phép vi phạm bảo toàn năng lượng, và chắc chắn không có quyền đó khi dẫn ra Pt 3.74. Nhưng nguyên lý bất định cực kỳ chắc chắn: nó có thể được dùng sai mà không gây ra kết quả sai lệch nghiêm trọng, và là một hệ quả mà các nhà vật lý có thói quen áp dụng nó một cách khá cẩn thận.

3.6 KÍ HIỆU DIRAC

Hãy hình dung một vector $\mathbf{A}$ thông thường trong hai chiều (Hình 3.3(a)). Bạn sẽ mô tả vector này cho người khác như thế nào? Cách thuận tiện nhất là thiết lập các trục Descartes, x và y , và xác định các thành phần của $\mathbf{A}$: $A_x = \hat{i} \cdot \vec{A}$, $A_y = \hat{j} \cdot \vec{A}$ (Hình 3.3(b)). Dĩ nhiên chị của bạn có thể vẽ một tập hợp các trục khác, x' và y' , và chị ta sẽ báo các thành phần khác $A'_x = \hat{i}' \cdot \vec{A}$, $A'_y = \hat{j}' \cdot \vec{A}$ (Hình 3.3(c)). Nhưng nó là cùng một *vector* – ta chỉ biểu diễn nó theo hai hai cơ sở khác nhau ($\{\hat{i}, \hat{j}\}$ và $\{\hat{i}', \hat{j}'\}$). Chính vector nằm “trong không gian,” độc lập với bất cứ sự lựa chọn (tùy ý) các tọa độ.



Hình 3.3: (a) Vector $\mathbf{A}$. (b) Các thành phần của $\mathbf{A}$ theo các trục xy .

(c) Các thành phần của $\mathbf{A}$ theo các trục $x'y'$.

Điều này cũng đúng cho trạng thái của một hệ trong cơ học lượng tử. Nó được biểu diễn bằng một *vector*, $|s(t)\rangle$, nằm “trong không gian Hilbert,” nhưng bạn có thể *biểu diễn* nó theo bất cứ số *cơ sở* khác nhau. Hàm sóng $\Psi(x, t)$ thực sự là hệ số trong khai triển của $|s\rangle$ trong cơ sở của các hàm riêng tọa độ:

$$\Psi(x, t) = \langle x | \mathcal{J}(t) \rangle. \quad [3.75]$$

(có $|x\rangle$ biểu diễn cho hàm riêng của x với trị riêng x),²⁵ còn hàm sóng trong không gian xung lượng $\Phi(p, t)$ là khai triển của $|s\rangle$ trong cơ sở của các hàm riêng xung lượng:

$$\Phi(p, t) = \langle p | \mathcal{J}(t) \rangle \quad [3.76]$$

(có $|p\rangle$ biểu diễn hàm riêng của p với trị riêng p).²⁶ Hay ta có thể khai triển $|s\rangle$ trong cơ sở của hàm riêng năng lượng (để đơn giản hãy giả sử rằng phổ là rời rạc):

$$c_n(t) = \langle n | \mathcal{J}(t) \rangle \quad [3.77]$$

(có $|n\rangle$ biểu diễn hàm riêng thứ n của H) – Pt 3.46. Nhưng nó là cùng trạng thái; các hàm sóng Ψ và Φ , và tập hợp các hệ số $\{c_n\}$, hoàn toàn chứa cùng thông tin – chúng chỉ là ba cách khác nhau để mô tả cùng vector:

$$\begin{aligned}\Psi(x, t) &= \int \Psi(y, t) \delta(x - y) dy = \int \Phi(p, t) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} dp \\ &= \sum c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x).\end{aligned}\quad [3.78]$$

Các toán tử (biểu diễn những đại lượng quan sát được) là những phép biến đổi tuyến tính – chúng chuyển “một vectơ” thành một vectơ khác:

$$|\beta\rangle = \hat{Q}|\alpha\rangle. \quad [3.79]$$

Cũng giống như vectơ được biểu diễn, theo một cơ sở cụ thể $\{|e_n\rangle\}$,²⁷ nhờ các thành phần của chúng,

$$|\alpha\rangle = \sum_n a_n |e_n\rangle, \text{ with } a_n = \langle e_n | \alpha \rangle; \quad |\beta\rangle = \sum_n b_n |e_n\rangle, \text{ with } b_n = \langle e_n | \beta \rangle, \quad [3.80]$$

các toán tử được biểu diễn (theo một cơ sở cụ thể) bằng các **thành phần ma trận** của chúng²⁸

$$\langle e_m | \hat{Q} | e_n \rangle \equiv Q_{mn}. \quad [3.81]$$

²⁷ Tôi sẽ giả sử cơ sở này là rời rạc; nếu không n trở thành một chỉ số liên tục và các tổng được thay bằng tích phân.

²⁸ Thuật ngữ này được lấy cảm hứng, dĩ nhiên, từ trường hợp hữu hạn chiều, nhưng “ma trận” bây giờ sẽ có vô số phần tử (thậm chí có thể không đếm được).

Trong kí hiệu này Pt 3.79 có dạng

$$\sum_n b_n |e_n\rangle = \sum_n a_n \hat{Q} |e_n\rangle, \quad [3.82]$$

hay, lấy tích trong với $|e_m\rangle$,

$$\sum_n b_n \langle e_m | e_n \rangle = \sum_n a_n \langle e_m | \hat{Q} | e_n \rangle, \quad [3.83]$$

và do đó

$$b_m = \sum_n Q_{mn} a_n. \quad [3.84]$$

Do đó các thành phần ma trận cho ta biết các thành phần này biến đổi ra sao.

Sau này ta sẽ xét những hệ chỉ cho phép một số hữu hạn (N) các trạng thái độc lập tuyến tính. Trong trường hợp đó $|s(t)\rangle$ nằm trong một không gian vectơ N chiều; nó có thể được biểu diễn bằng một cột các thành phần (N) (so với một cơ sở cho trước), và các toán tử có dạng ma trận ($N \times N$) thông thường. Đây là những hệ lượng tử đơn giản nhất – không có sự tinh tế nào liên quan đến các không gian vectơ vô hạn chiều. Dễ nhất trong số này là hệ hai trạng thái, mà ta xét trong ví dụ sau.

Ví dụ 3.8 Hãy hình dung một hệ trong đó chỉ có *hai* trạng thái độc lập tuyến tính.²⁹

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

²⁹ Về mặt kỹ thuật, các dấu “bằng” ở đây nghĩa là “được biểu diễn bằng,” nhưng tôi không nghĩ dễ gây nhầm lẫn ở đây nếu ta dùng kí hiệu không chính thức quen thuộc này.

Trạng thái tổng quát nhất là một tổ hợp tuyến tính được chuẩn hóa:

$$|\mathcal{J}\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad \text{with } |a|^2 + |b|^2 = 1.$$

Hamiltonian có thể được biểu diễn là một ma trận (hermit); giả sử nó có dạng cụ thể

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} h & g \\ g & h \end{pmatrix},$$

trong đó g và h là những hằng số thực. Nếu hệ bắt đầu (ở $t = 0$) trong trạng thái $|1\rangle$, trạng thái của nó ở thời điểm t là như thế nào?

Lời giải: Phương trình Schrödinger (phụ thuộc thời gian) là

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\mathcal{J}\rangle = H|\mathcal{J}\rangle. \quad [3.85]$$

Lúc nào cũng vậy, ta bắt đầu bằng cách giải phương trình Schrödinger độc lập thời gian:

$$H|\mathcal{J}\rangle = E|\mathcal{J}\rangle; \quad [3.86]$$

tức là, ta tìm các vector riêng và trị riêng của H . Phương trình đặc trưng xác định các trị riêng:

$$\det \begin{pmatrix} h - E & g \\ g & h - E \end{pmatrix} = (h - E)^2 - g^2 = 0 \Rightarrow h - E = \mp g \Rightarrow E_{\pm} = h \pm g.$$

Rõ ràng các năng lượng được phép là $(h + g)$ và $(h - g)$. Để xác định các vector riêng, ta viết

$$\begin{pmatrix} h & g \\ g & h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = (h \pm g) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow h\alpha + g\beta = (h \pm g)\alpha \Rightarrow \beta = \pm \alpha,$$

nên các vector riêng được chuẩn hóa là

$$|\mathcal{J}_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}.$$

Kế đến ta khai triển trạng thái đầu tiên thành một tổ hợp tuyến tính các vector riêng của Hamiltonian:

$$|\mathcal{J}(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathcal{J}_{+}\rangle + |\mathcal{J}_{-}\rangle).$$

Cuối cùng, ta gán vào phần phụ thuộc thời gian tiêu chuẩn $\exp(-iE_n t/\hbar)$:

$$\begin{aligned} |\mathcal{J}(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{-i(h+g)t/\hbar} |\mathcal{J}_{+}\rangle + e^{-i(h-g)t/\hbar} |\mathcal{J}_{-}\rangle] \\ &= \frac{1}{2} e^{-iht/\hbar} \left[e^{-igt/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + e^{igt/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{1}{2} e^{-iht/\hbar} \begin{pmatrix} e^{-igt/\hbar} + e^{igt/\hbar} \\ e^{-igt/\hbar} - e^{igt/\hbar} \end{pmatrix} = e^{-iht/\hbar} \begin{pmatrix} \cos(gt/\hbar) \\ -i \sin(gt/\hbar) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Nếu bạn nghi ngờ kết quả này, hãy kiểm tra nó: Liệu nó có thỏa phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian? Liệu nó có khớp trạng thái ban đầu khi $t = 0$?

Đây là một mô hình thô thiển (trong nhiều mô hình khác) cho **dao động neutrino**. Trong trường hợp đó $|1\rangle$ biểu diễn neutrino electron, và $|2\rangle$ biểu diễn neutrino muon; nếu Hamiltonian có một số hạng ngoài đường chéo khác không (g) thì theo thời gian neutrino electron sẽ chuyển thành một neutrino muon (và ngược lại).

Dirac đề xuất cắt kí hiệu ngoặc nhọn cho tích trong, $\langle\alpha|\beta\rangle$ thành hai phần, mà ông gọi là **bra**, $\langle\alpha|$, và **ket**, $|\beta\rangle$ (Tôi không biết điều gì xảy ra với chữ cái “c” trong “bracket”). Cái sau là một vector, còn cái đầu là cái gì? Nó là một *hàm tuyến tính* của các vector, theo nghĩa khi nó tác động một vector (từ bên phải của nó) nó cho một số (phức) – tích trong. (Khi một *toán tử* tác động lên một vector, nó cho một vector khác; còn một *bra* tác động một vector, nó cho một con số.) Trong một không gian hàm, bra có thể được xem là một cách để lấy tích phân:

$$\langle f| = \int f^*[\dots] dx,$$

với chỗ [...] chờ được lấp vào bằng bất cứ hàm nào mà bra tác động lên ket ở bên phải. Trong một không gian hữu hạn chiều, có các vector được biểu diễn bằng các cột,

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \quad [3.87]$$

bra tương ứng là một vector hàng:

$$\langle\alpha| = (a_1^* \ a_2^* \ \dots \ a_n^*). \quad [3.88]$$

Tập hợp các bra tạo thành một không gian vector khác – được gọi là **không gian đối ngẫu**.

Điều kiện để xét riêng các bra là những thực thể độc lập cho phép kí hiệu hữu hiệu và đẹp (mặc dù tôi sẽ không xét nó trong cuốn sách này). Chẳng hạn, nếu $|\alpha\rangle$ là một vector được chuẩn hóa, toán tử

$$\hat{P} \equiv |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad [3.89]$$

lấy ra phần của vector bất kỳ “nằm dọc” $|\alpha\rangle$:

$$\hat{P}|\beta\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle|\alpha\rangle;$$

ta gọi nó là **toán tử chiếu** lên không gian con một chiều do $|\alpha\rangle$ lấp đầy. Nếu $\{|e_n\rangle\}$ là một cơ sở trực chuẩn rời rạc,

$$\langle e_m|e_n\rangle = \delta_{mn}, \quad [3.90]$$

khi đó

$$\sum_n |e_n\rangle\langle e_n| = 1 \quad [3.91]$$

(toán tử đơn vị). Vì nếu ta cho toán tử này tác động lên vector $|\alpha\rangle$, ta thu lại khai triển của $|\alpha\rangle$ trong cơ sở $\{|e_n\rangle\}$:

$$\sum_n |e_n\rangle \langle e_n| \alpha\rangle = |\alpha\rangle. \quad [3.92]$$

Tương tự, nếu $\{|e_z\rangle\}$ là một cơ sở liên tục trực chuẩn *Dirac*,

$$\langle e_z|e_{z'}\rangle = \delta(z - z'), \quad [3.93]$$

thì

$$\int |e_z\rangle \langle e_z| dz = 1. \quad [3.94]$$

Pt 3.91 và 3.94 là cách ngắn gọn nhất để biểu diễn tính đầy đủ.

CHƯƠNG 4

CƠ HỌC LƯỢNG TỬ TRONG BA CHIỀU

4.1 PHƯƠNG TRÌNH SCHRÖDINGER TRONG TỌA ĐỘ CẦU

Sự tổng quát hóa cho ba chiều thì đơn giản. Phương trình Schrödinger là

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi; \quad [4.1]$$

Toán tử¹ Hamiltonian H thu được từ năng lượng cổ điển

$$\frac{1}{2}mv^2 + V = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V$$

nhờ phép thực hiện tiêu chuẩn (bây giờ áp dụng cho y và z , cũng như cho x):

$$p_x \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}, \quad [4.2]$$

hay

$$\mathbf{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla,$$

 [4.3]

cho gọn. Do đó

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi,$$

 [4.4]

trong đó

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad [4.5]$$

là **Laplacian**, trong tọa độ Descartes.

Thế năng V và hàm sóng Ψ bây giờ là những hàm của $\mathbf{r} = (x, y, z)$ và t . Xác suất tìm thấy hạt trong thể tích vô cùng bé $d^3\mathbf{r} = dxdydz$ bằng $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r}$, và điều kiện chuẩn hóa là

$$\int |\Psi|^2 d^3\mathbf{r} = 1, \quad [4.6]$$

có tích phân lấy trên toàn không gian. Nếu thế độc lập thời gian, sẽ có một tập đầy đủ các trạng thái dừng,

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r})e^{-iE_n t/\hbar}, \quad [4.7]$$

trong đó hàm sóng không gian ψ_n thỏa phương trình Schrödinger *độc lập* thời gian

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi. \quad [4.8]$$

Nghiệm tổng quát cho phương trình Schrödinger (*phụ thuộc* thời gian) là

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum c_n \psi_n(\mathbf{r}) e^{-i E_n t / \hbar}, \quad [4.9]$$

có các hằng số c_n được xác định bằng hàm sóng ban đầu, $\Psi(\mathbf{r}, 0)$, theo cách thông thường. (Nếu thế cho những trạng thái liên tục, thì tổng trong Pt 4.9 trở thành một tích phân.)

4.1.1 Tách biến

Thông thường, thế chỉ là một hàm của khoảng cách tới gốc tọa độ. Trong trường hợp đó ta thường chuyển qua **tọa độ cầu** (r, θ, ϕ) (xem Hình 4.1). Trong tọa độ cầu Laplacian có dạng²

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right). \quad [4.13]$$

Khi đó, trong tọa độ cầu, phương trình Schrödinger độc lập thời gian là

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) \right] + V\psi = E\psi. \quad [4.14]$$

Ta bắt đầu tìm nghiệm tách được bằng các tích:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi). \quad [4.15]$$

Đưa điều này vào Pt 4.14, ta có

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{Y}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{R}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{R}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] + VRY = ERY.$$

Chia cho RY và nhân với $-2mr^2/\hbar^2$:

$$\left\{ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] \right\} + \frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right\} = 0.$$

Số hạng trong ngoặc nhọn đầu tiên chỉ phụ thuộc vào r , còn phần còn lại chỉ phụ thuộc vào θ và ϕ ; theo đó, mỗi số hạng phải bằng một hằng số. Vì những lý do sẽ xuất hiện sau,³ tôi sẽ viết “hằng số tách biến” này có dạng $l(l+1)$:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] = l(l+1); \quad [4.16]$$

$$\frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right\} = -l(l+1). \quad [4.17]$$

³ Lưu ý rằng không mất tính tổng quát ở đây – ở giai đoạn này l có thể là số phức bất kỳ. Sau này ta sẽ phát hiện rằng thật ra l phải là một *số nguyên*, và do dự đoán được kết quả đó mà tôi đã biểu diễn hằng số tách biến theo cách có vẻ kì cục như vậy.

4.1.2 Phương trình góc

Pt 4.17 xác định sự phụ thuộc của ψ vào θ và ϕ , nhân cho $Y \sin^2 \theta$, nó trở thành

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} = -l(l+1) \sin^2 \theta Y. \quad [4.18]$$

Ta có thể nhận ra phương trình này – nó xuất hiện trong nghiệm của phương trình Laplace trong điện động lực học cổ điển. Lúc nào cũng vậy, ta thử tách biến:

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \Phi(\phi). \quad [4.19]$$

Đưa nó vào, và chia cho $\Theta \Phi$, ta tìm được:

$$\left\{ \frac{1}{\Theta} \left[\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + l(l+1) \sin^2 \theta \right\} + \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = 0.$$

Số hạng đầu tiên là một hàm chỉ của θ , và số hạng thứ hai là một hàm chỉ của ϕ , nên mỗi số hạng phải bằng một hằng số. Lần này⁴ tôi sẽ gọi hằng số tách biến là m^2 :

$$\frac{1}{\Theta} \left[\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + l(l+1) \sin^2 \theta = m^2; \quad [4.20]$$

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -m^2. \quad [4.21]$$

⁴ Lại nữa, không mất tính tổng quát ở đây, vì lúc này m có thể là số phức bất kỳ: tuy nhiên, lát nữa, ta sẽ phát hiện ra rằng thật ra m phải là một *số nguyên*. Cần thận: chữ cái m ở đây làm hai nhiệm vụ, là *khối lượng* và là một hằng số tách biến. Không có cách nào để tránh sự trùng lặp này, vì cả hai cách dùng đều đã quen. Một số tác giả chuyển thành M hay μ cho khối lượng, nhưng tôi ghét phải thay kí hiệu giữa chừng, và tôi không nghĩ có nhầm lẫn ở đây, chừng nào bạn biết vấn đề này.

Phương trình của ϕ dễ:

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -m^2 \Phi \Rightarrow \Phi(\phi) = e^{im\phi}. \quad [4.22]$$

[Thật vậy, có *hai* nghiệm: $\exp(im\phi)$ và $\exp(-im\phi)$, nhưng ta sẽ bao gồm nghiệm sau bằng cách cho m âm. Cũng có thể có một thừa số hằng đằng trước, nhưng ta cũng có thể đưa nó vào Θ . Vô tình, trong điện động lực học ta viết hàm của góc phương vị (Φ) theo sin và cos, thay vì theo các hàm mũ, vì điện thế phải *thực*. Trong cơ học lượng tử không có ràng buộc như vậy, và các hàm mũ dễ tính hơn nhiều.] Bây giờ, khi ϕ tăng 2π , ta phải trở lại cùng một điểm trong không gian (xem Hình 4.1), nên thật tự nhiên khi yêu cầu⁵

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi). \quad [4.23]$$

⁵ Điều này trông khó hơn. Rốt cuộc, mật độ *xác suất* ($|\Phi|^2$) là đơn vị *bất kể* m . Trong mục 4.3 ta sẽ thu được điều kiện của m bằng một lập luận hoàn toàn khác và thuyết phục hơn.

Nói cách khác, $\exp[im(\phi + 2\pi)] = \exp(im\phi)$ hay $\exp(2\pi im) = 1$. Từ đó ta có rằng m phải là một số nguyên:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad [4.24]$$

Phương trình của θ ,

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + [l(l+1) \sin^2 \theta - m^2] \Theta = 0, \quad [4.25]$$

không đơn giản như vậy. Nghiệm là

$$\Theta(\theta) = A P_l^m(\cos \theta), \quad [4.26]$$

trong đó P_l^m là **hàm Legendre liên kết**, được xác định nhờ⁶

$$P_l^m(x) \equiv (1-x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m|} P_l(x). \quad [4.27]$$

và $P_l(x)$ là **đa thức Legendre** bậc l , được xác định bằng **hệ thức Rodrigues**:

$$P_l(x) \equiv \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l. \quad [4.28]$$

⁶ Lưu ý rằng $P_l^{-m} = P_l^m$. Một số tác giả dùng một qui ước dấu khác cho những giá trị âm của m ; xem Boas (chú thích 2), p. 505.

Chẳng hạn,

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

$$P_2(x) = \frac{1}{4 \cdot 2} \left(\frac{d}{dx} \right)^2 (x^2 - 1)^2 = \frac{1}{2} (3x^2 - 1),$$

và cứ vậy. Vài đa thức đầu tiên được liệt kê trong bảng 4.1. Như tên gọi đã nói, $P_l(x)$ là một đa thức (bậc l) theo x , và nó chẵn hay lẻ tùy thuộc vào l . Nhưng $P_l^m(x)$ nói chung không phải là một đa thức – nếu m lẻ nó mang một thừa số $\sqrt{1-x^2}$.

$$P_2^0(x) = \frac{1}{2} (3x^2 - 1), \quad P_2^1(x) = (1-x^2)^{1/2} \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{2} (3x^2 - 1) \right] = 3x \sqrt{1-x^2},$$

$$P_2^2(x) = (1-x^2) \left(\frac{d}{dx} \right)^2 \left[\frac{1}{2} (3x^2 - 1) \right] = 3(1-x^2),$$

v.v. (Nói cách khác, cái ta cần là $P_l^m(\cos \theta)$, và $\sqrt{1-\cos^2 \theta} = \sin \theta$, nên $P_l^m(\cos \theta)$ lúc nào cũng là một đa thức theo $\cos \theta$, nhân với – nếu m lẻ – $\sin \theta$. Một số hàm Legendre liên kết của $\cos \theta$ được liệt kê trong bảng 4.2.)

Lưu ý rằng l phải là một số nguyên không âm, để hệ thức Rodrigues có nghĩa; hơn nữa, nếu $|m| > l$, thì Pt 4.27 nói rằng $P_l^m = 0$. Với l cho trước, thì có $(2l + 1)$ giá trị khả dĩ của m :

$$l = 0, 1, 2, \dots; \quad m = -l, -l + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l - 1, l. \quad [4.29]$$

Nhưng chờ đã! Pt 4.25 là một phương trình vi phân bậc hai: Nó phải có *hai* nghiệm độc lập tuyến tính, cho mọi giá trị của l và m . Những nghiệm còn lại đâu? *Trả lời*: Dĩ nhiên chúng tồn tại như những nghiệm toán học cho phương trình, nhưng chúng không được chấp nhận về mặt vật lý, vì chúng phân kỳ ở $\theta = 0$ và/hoặc $\theta = \pi$ (xem bài toán 4.4).

Bây giờ, phần tử thể tích trong tọa độ cầu⁷ là

$$d^3\mathbf{r} = r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi, \quad [4.30]$$

nên điều kiện chuẩn hóa (Pt 4.6) trở thành

$$\int |\psi|^2 r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi = \int |R|^2 r^2 \, dr \int |Y|^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi = 1.$$

Sẽ tiện khi chuẩn hóa R và Y riêng biệt:

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 \, dr = 1 \quad \text{and} \quad \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y|^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi = 1. \quad [4.31]$$

Hàm sóng góc được chuẩn hóa⁸ được gọi là **hàm điều hòa cầu**:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \epsilon \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta). \quad [4.32]$$

trong đó $\epsilon = (-1)^m$ cho $m \geq 0$ và $\epsilon = 1$ cho $m \leq 0$. Như ta sẽ chứng tỏ sau, chúng tự động trực giao, nên

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi [Y_l^m(\theta, \phi)]^* [Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi)] \sin \theta \, d\theta \, d\phi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad [4.33]$$

⁸ Thừa số chuẩn hóa được dẫn ra trong bài toán 4.54: ϵ (luôn bằng 1 hoặc -1) được chọn để tương thích với kí hiệu ta sẽ dùng trong lý thuyết về momen xung lượng; nó là tiêu chuẩn, mặc dù một số giáo trình cũ hơn dùng những qui ước khác. Lưu ý rằng

$$Y_l^{-m} = (-1)^m (Y_l^m)^*$$

Trong bảng 4.3 tôi đã liệt kê một số hàm điều hòa cầu. Vì lý do lịch sử, l được gọi là **số lượng tử phương vị**, và m là **số lượng tử từ**.

4.1.3 Phương trình xuyên tâm

Lưu ý rằng phần góc của hàm sóng, $Y(\theta, \phi)$, cũng như vậy cho mọi thể đối xứng cầu; *hình dáng* thực sự của thể, $V(r)$, chỉ ảnh hưởng đến phần *xuyên tâm* của hàm sóng, $R(r)$, được xác định bằng Pt 4.16:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] R = l(l+1)R. \quad [4.35]$$

Phương trình này đơn giản nếu ta đổi biến. Cho

$$u(r) \equiv r R(r), \quad [4.36]$$

sao cho $R = u/r$, $dR/dr = [r(du/dr) - u]/r^2$, $(d/dr)[r^2(dR/dr)] = rd^2u/dr^2$, và do đó

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[V + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu.} \quad [4.37]$$

Đây được gọi là **phương trình xuyên tâm**;⁹ nó *đồng nhất về dạng* với phương trình Schrödinger một chiều (Pt 2.5), trừ việc *thể hiệu dụng*,

$$V_{\text{eff}} = V + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}, \quad [4.38]$$

chứa thêm một số hạng, được gọi là **số hạng li tâm**, $(\hbar^2/2m)[l(l+1)/r^2]$. Nó có xu hướng ném hạt ra ngoài (ra xa gốc tọa độ), giống như (giả) lực ly tâm trong cơ học cổ điển. Trong khi đó, điều kiện chuẩn hóa (Pt 4.31) trở thành

$$\int_0^\infty |u|^2 dr = 1. \quad [4.39]$$

Đó là cái ta có thể tới chừng nào ta được cho một thể cụ thể $V(r)$.

Ví dụ 4.1 Xét giếng cầu vô hạn,

$$V(r) = \begin{cases} 0, & \text{if } r \leq a; \\ \infty, & \text{if } r > a. \end{cases} \quad [4.40]$$

Tìm các hàm sóng và các năng lượng được phép.

Lời giải: Bên ngoài giếng, hàm sóng bằng không; bên trong giếng, phương trình xuyên tâm bằng

$$\frac{d^2 u}{dr^2} = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - k^2 \right] u, \quad [4.41]$$

trong đó

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad [4.42]$$

như thường thấy. Vấn đề của ta là giải phương trình này, chịu điều kiện biên $u(a) = 0$. Trường hợp $l = 0$ dễ:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} = -k^2 u \Rightarrow u(r) = A \sin(kr) + B \cos(kr).$$

Nhưng nhớ rằng, hàm sóng xuyên tâm thực sự là $R(r) = u(r)/r$, và $[\cos(kr)]/r$ phân kỳ khi $r \rightarrow 0$. Nên¹⁰ ta phải chọn $B = 0$. Điều kiện biên khi đó yêu cầu $\sin(ka) = 0$, và do đó $ka = n\pi$, cho n nguyên. Các năng lượng được phép rõ ràng bằng

$$E_{n0} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad [4.43]$$

¹⁰ Thật vậy, mọi cái ta cần là hàm sóng chuẩn hóa được, ta không cần nó hữu hạn: $R(r) \approx 1/r$ ở gốc tọa độ là chuẩn hóa được (do r^2 trong Pt 4.31). Cho một chứng minh thuyết phục hơn rằng $B = 0$, xem R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics* (Plenum, New York, 1980), p. 351.

cũng giống như cho giếng vuông vô hạn một chiều (Pt 2.27). Chuẩn hóa $u(r)$ cho $A = \sqrt{2/a}$; gắn vào phần góc (hiện tại dễ vì $Y_0^0(\theta, \phi) = 1/4\pi$), ta kết luận rằng

$$\psi_{n00} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{\sin(n\pi r/a)}{r}. \quad [4.44]$$

[Lưu ý rằng các trạng thái dừng được kí hiệu bằng ba **số lượng tử**, n , l , và m : $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$. Tuy nhiên, *năng lượng* chỉ phụ thuộc vào n và l : E_{nl} .]

Nghiệm tổng quát cho Pt 4.41 (cho một số nguyên l bất kỳ) không quen thuộc lắm:

$$u(r) = Ar j_l(kr) + Br n_l(kr). \quad [4.45]$$

trong đó $j_l(x)$ là hàm Bessel cầu bậc l , và $n_l(x)$ là hàm Neumann cầu bậc l . Chúng được xác định như sau:

$$j_l(x) \equiv (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x}; \quad n_l(x) \equiv -(-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\cos x}{x}. \quad [4.46]$$

Chẳng hạn,

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}; \quad n_0(x) = -\frac{\cos x}{x};$$

$$j_1(x) = (-x) \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \left(\frac{\sin x}{x} \right) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x};$$

và cứ vậy. Vài hàm Bessel và Neumann cầu đầu tiên được liệt kê trong bảng 4.4. Với x nhỏ (ở đó $\sin x = x - x^3/3! + x^5/5! - \dots$ và $\cos x = 1 - x^2/2 + x^4/4! - \dots$),

$$j_0(x) \approx 1; \quad n_0(x) \approx -\frac{1}{x}; \quad j_1(x) \approx \frac{x}{3}; \quad j_2(x) \approx \frac{x^2}{15};$$

v.v. Lưu ý rằng các hàm Bessel là *hữu hạn* ở gốc tọa độ, nhưng các hàm *Neumann phân kỳ* ở gốc tọa độ. Theo đó, ta phải có $B_l = 0$, và do đó

$$R(r) = A j_l(kr). \quad [4.47]$$

Vẫn còn điều kiện biên, $R(a) = 0$. Rõ ràng k phải được chọn sao cho

$$j_l(ka) = 0; \quad [4.48]$$

tức là, (ka) là một nghiệm của hàm Bessel cầu bậc l . Lúc này, các hàm Bessel có dạng dao động (xem hình 4.2); mỗi hàm có vô số nghiệm,

Nhưng (không may cho ta) chúng không nằm ở những điểm dễ dàng (như n , hay $n\pi$, hay cái gì khác): chúng phải được tính bằng số.¹¹ Ở mọi lúc, điều kiện biên yêu cầu rằng

$$k = \frac{1}{a} \beta_{nl}. \quad [4.49]$$

trong đó β_{nl} là nghiệm thứ n của hàm Bessel cầu thứ l . Các năng lượng được phép, khi đó, được cho bởi

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \beta_{nl}^2. \quad [4.50]$$

và các hàm sóng là

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = A_{nl} j_l(\beta_{nl} r/a) Y_l^m(\theta, \phi). \quad [4.51]$$

có hằng số A_{nl} được xác định từ sự chuẩn hóa. Mỗi mức năng lượng suy biến bậc $(2l+1)$, vì có $(2l+1)$ giá trị khác nhau của m cho mỗi giá trị của l (xem Pt 4.29).

4.2 NGUYÊN TỬ HYDRO

Nguyên tử hydro gồm một proton nặng, gần như không chuyển động (ta có thể đặt nó ở gốc tọa độ), có điện tích e , cùng với một electron nhẹ hơn nhiều (điện tích $-e$) quay quanh nó, được giữ bằng lực hút tương hỗ của các điện tích trái dấu (xem Hình 4.3). Từ định lý Coulomb, thế năng (trong đơn vị SI) bằng

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad [4.52]$$

và phương trình xuyên tâm (Pt 4.37) là

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} \right] u = E u. \quad [4.53]$$

Bài toán của ta là giải phương trình này cho $u(r)$, và xác định các năng lượng được phép E . Nguyên tử hydro là một trường hợp quan trọng đến nỗi tôi sẽ không đưa bạn lời giải lần này – ta sẽ tìm ra nó một cách chi tiết, bằng phương pháp ta đã dùng trong khi tìm lời giải giải tích của dao động tử điều hòa. (Nếu bất cứ bước nào trong quá trình này không rõ, bạn có thể xem lại mục 2.3.2 cho lời giải thích đầy đủ hơn.)

Tình cờ, thế Coulomb (Pt 4.52) cho trạng thái *liên tục* ($E > 0$), mô tả tán xạ electron-proton, cũng như trạng thái *liên kết* rời rạc, *biểu diễn nguyên tử hydro*, nhưng ta sẽ để ý đến trạng thái sau.

4.2.1 Hàm sóng xuyên tâm

Nhiệm vụ đầu tiên là làm gọn kí hiệu. Cho

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}. \quad [4.54]$$

(Cho trạng thái liên kết, E âm, nên κ thực.) Chia Pt 4.53 cho E , ta có

$$\frac{1}{\kappa^2} \frac{d^2 u}{dr^2} = \left[1 - \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa} \frac{1}{(kr)} + \frac{l(l+1)}{(\kappa r)^2} \right] u.$$

Điều này gợi ý rằng ta đưa ra

$$\rho \equiv \kappa r, \quad \text{and} \quad \rho_0 \equiv \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa}, \quad [4.55]$$

sao cho

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u. \quad [4.56]$$

Kể đến ta kiểm tra dạng tiệm cận của các nghiệm. Khi $\rho \rightarrow \infty$, số hạng hằng trong ngoặc chiếm ưu thế, nên (gần đúng)

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = u.$$

Nghiệm tổng quát là

$$u(\rho) = Ae^{-\rho} + Be^{\rho}. \quad [4.57]$$

Nhưng e^{ρ} phân kỳ (khi $\rho \rightarrow \infty$), nên $B = 0$. Rõ ràng,

$$u(\rho) \sim Ae^{-\rho}. \quad [4.58]$$

cho ρ lớn. Mặt khác, khi $\rho \rightarrow 0$ số hạng ly tâm chiếm ưu thế;¹² khi đó gần đúng:

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \frac{l(l+1)}{\rho^2} u.$$

¹² Lập luận này không áp dụng khi $l = 0$ (mặc cho kết luận này, Pt 4.59 thật ra đúng cho cả trường hợp đó). Nhưng đừng lo: cái tôi đang cố gắng làm là cho bạn ý tưởng để đổi biến.

Nghiệm tổng quát (kiểm tra nó!) là

$$u(\rho) = C\rho^{l+1} + D\rho^{-l}.$$

nhưng ρ^{-l} phân kỳ (khi $\rho \rightarrow 0$), nên $D = 0$. Do đó

$$u(\rho) \sim C\rho^{l+1}, \quad [4.59]$$

cho ρ nhỏ.

Bước kế tiếp là bỏ đi trạng thái tiệm cận, đưa ra hàm mới $v(\rho)$:

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho), \quad [4.60]$$

với hy vọng $v(\rho)$ sẽ trở nên đơn giản hơn $u(\rho)$. Các dấu hiệu đầu tiên không tốt lành lắm:

$$\frac{du}{d\rho} = \rho^l e^{-\rho} \left[(l+1-\rho)v + \rho \frac{dv}{d\rho} \right],$$

và

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \rho^l e^{-\rho} \left\{ \left[-2l - 2 + \rho + \frac{l(l+1)}{\rho} \right] v + 2(l+1-\rho) \frac{dv}{d\rho} + \rho \frac{d^2v}{d\rho^2} \right\}.$$

Khi đó, theo $v(\rho)$, phương trình xuyên tâm (Pt 4.56) là

$$\rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{dv}{d\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)]v = 0. \quad [4.61]$$

Cuối cùng, ta giả sử nghiệm, $v(\rho)$, có thể được biểu diễn là một chuỗi lũy thừa theo ρ :

$$v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j. \quad [4.62]$$

Bài toán của ta là xác định các hệ số ($c_0, c_1, c_2, \dots$). Lấy đạo hàm từng số hạng:

$$\frac{dv}{d\rho} = \sum_{j=0}^{\infty} j c_j \rho^{j-1} = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) c_{j+1} \rho^j.$$

[Trong tổng thứ hai tôi đã đặt lại tên “chỉ số cam”: $j \rightarrow j+1$. Nếu điều này làm bạn phiền, viết ra vài số hạng đầu, và *kiểm tra* lại. Bạn có thể phản đối rằng tổng phải bắt đầu ở $j=-1$, nhưng thừa số $(j+1)$ làm mất số hạng đó, nên ta cũng có thể bắt đầu từ không.] Lấy đạo hàm lần nữa,

$$\frac{d^2 v}{d\rho^2} = \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) c_{j+1} \rho^{j-1}.$$

Đưa chúng vào Pt 4.61, ta có

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) c_{j+1} \rho^j + 2(l+1) \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) c_{j+1} \rho^j \\ - 2 \sum_{j=0}^{\infty} j c_j \rho^j + [\rho_0 - 2(l+1)] \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j = 0. \end{aligned}$$

Cân bằng các hệ số của các lũy thừa giống nhau đưa tới

$$j(j+1) c_{j+1} + 2(l+1)(j+1) c_{j+1} - 2j c_j + [\rho_0 - 2(l+1)] c_j = 0.$$

hay

$$c_{j+1} = \left\{ \frac{2(j+l+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2l+2)} \right\} c_j. \quad [4.63]$$

Công thức truy hồi này xác định các hệ số, và do đó xác định hàm $v(\rho)$: Ta bắt đầu với c_0 (đây trở thành một hằng số toàn thể, được cố định bằng sự chuẩn hóa), và Pt 4.63 cho ta c_1 ; đưa vào lại, ta thu được c_2 , và cứ vậy.¹³

Bây giờ hãy xem các hệ số này trông như thế nào cho j lớn (điều này ứng với ρ lớn, ở đó các lũy thừa cao hơn chiếm ưu thế). Trong điều kiện này hệ thức truy hồi cho¹⁴

$$c_{j+1} \cong \frac{2j}{j(j+1)} c_j = \frac{2}{j+1} c_j.$$

Giả sử hiện thời rằng điều này *đúng*. Khi đó

$$c_j = \frac{2^j}{j!} c_0, \quad [4.64]$$

nên

$$v(\rho) = c_0 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2^j}{j!} \rho^j = c_0 e^{2\rho},$$

và do đó

$$u(\rho) = c_0 \rho^{l+1} e^\rho, \quad [4.65]$$

phân kỳ ở ρ lớn. Hàm mũ dương chính là trạng thái tiệm cận ta không muốn, trong Pt 4.57. (Không phải ngẫu nhiên nó xuất hiện lại ở đây; rốt cuộc, nó biểu diễn trạng thái tiệm cận của một số nghiệm của phương trình xuyên tâm – chúng chỉ không phải là cái ta quan tâm, vì chúng không chuẩn hóa được.) Chỉ có một cách để ra khỏi thế tiến thoái lưỡng nan này: *Chuỗi này phải kết thúc*. Phải xuất hiện một số nguyên cực đại nào đó, $j_{\max}$, sao cho

$$c_{(j_{\max}+1)} = 0, \quad [4.66]$$

(và sau đó mọi hệ số tự động triệt tiêu). Rõ ràng (Pt 4.63)

$$2(j_{\max} + l + 1) - \rho_0 = 0.$$

Xác định

$$n \equiv j_{\max} + l + 1 \quad [4.67]$$

(được gọi là **số lượng tử chính**), ta có

$$\rho_0 = 2n. \quad [4.68]$$

Nhưng ρ_0 xác định E (Pt 4.54 và 4.55):

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = -\frac{me^4}{8\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 \rho_0^2}, \quad [4.69]$$

nên các năng lượng được phép là

$$E_n = -\left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right] \frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

[4.70]

Đây là **công thức Bohr** nổi tiếng – là kết quả quan trọng nhất trong cơ học lượng tử. Bohr thu được nó năm 1913 bằng một sự trộn dể chịu của vật lý cổ điển không áp dụng được và lý thuyết tiền lượng tử (mãi đến năm 1924 phương trình Schrödinger mới xuất hiện).

Kết hợp Pt 4.55 và 4.68, ta tìm được

$$\kappa = \left(\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2} \right) \frac{1}{n} = \frac{1}{an}, \quad [4.71]$$

trong đó

$$a \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m} \quad [4.72]$$

là **bán kính Bohr**.¹⁵ Theo đó (lại nữa, từ Pt 4.55)

$$\rho = \frac{r}{a}. \quad [4.73]$$

Các hàm sóng không gian cho hydro được kí hiệu bằng ba số lượng tử (n , l , và m):

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi), \quad [4.74]$$

trong đó (trở lại Pt 4.36 và 4.60)

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r} \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho), \quad [4.75]$$

và $v(\rho)$ là một đa thức bậc $j_{\max} = n - l - 1$ theo ρ , có các hệ số được xác định (tới một thừa số chuẩn hóa) bằng công thức truy hồi

$$c_{j+1} = \frac{2(j+l+1-n)}{(j+1)(j+2l+2)} c_j. \quad [4.76]$$

Trạng thái cơ bản (tức là trạng thái có năng lượng thấp nhất) là trường hợp $n = 1$; đặt vào các giá trị được chấp nhận cho các hằng số vật lý, ta có:

$$E_1 = \left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right] = 13.6 \text{ eV}. \quad [4.77]$$

Rõ ràng **năng lượng liên kết** của hydro (lượng năng lượng bạn sẽ có để lấy electron trong trạng thái cơ bản để ion hóa nguyên tử) là 13.6eV. Pt 4.68 bắt $l = 0$, tức là $m = 0$ (xem Pt 4.29), nên

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = R_{10}(r) Y_0^0(\theta, \phi). \quad [4.78]$$

Công thức truy hồi bị cắt sau số hạng đầu tiên (Pt 4.76 với $j = 0$ cho $c_1 = 0$), nên $v(\rho)$ là một hằng số (c_0), và

$$R_{10}(r) = \frac{c_0}{a} e^{-r/a}. \quad [4.79]$$

Chuẩn hóa nó, theo Pt 4.31:

$$\int_0^\infty |R_{10}|^2 r^2 dr = \frac{|c_0|^2}{a^2} \int_0^\infty e^{-2r/a} r^2 dr = |c_0|^2 \frac{a}{4} = 1,$$

nên $c_0 = 2/\sqrt{a}$. Trong khi đó, $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$, và do đó trạng thái cơ bản của hydro là

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}. \quad [4.80]$$

Nếu $n = 2$ năng lượng bằng

$$E_2 = \frac{-13.6 \text{ eV}}{4} = -3.4 \text{ eV}; \quad [4.81]$$

Đây là trạng thái kích thích thứ nhất – hay, *những trạng thái*, vì ta có thể có hoặc $l = 0$ (trong trường hợp này $m = 0$) hoặc $l = 1$ (với $m = -1, 0$, hay $+1$); rõ ràng bốn trạng thái có chung năng lượng. Nếu $l = 0$, hệ thức truy hồi (Pt 4.76) cho

$$c_1 = -c_0 \text{ (dùng } j = 0), \quad \text{và} \quad c_2 = 0 \text{ (dùng } j = 1)$$

nên $v(\rho) = c_0(1 - \rho)$, và do đó

$$R_{20}(r) = \frac{c_0}{2a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a}. \quad [4.82]$$

[Lưu ý rằng các hệ số khai triển $\{c_j\}$ hoàn toàn khác cho các số lượng tử n và l khác nhau.] Nếu $l = 1$ hệ thức truy hồi kết thúc chuỗi sau một số hạng duy nhất; $v(\rho)$ là một hằng số, và ta tìm được

$$R_{21}(r) = \frac{c_0}{4a^2} r e^{-r/2a}. \quad [4.83]$$

(Trong mỗi trường hợp hằng số c_0 được xác định từ sự chuẩn hóa – xem bài toán 4.11.)

Với n bất kỳ, các giá trị khả dĩ của l (tương thích với Pt 4.67) là

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1, \quad [4.84]$$

và với mỗi l có $(2l+1)$ giá trị khả dĩ của m (Pt 4.29), nên độ suy biến toàn phần của mức năng lượng E_n bằng

$$d(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \quad [4.85]$$

Đa thức $v(\rho)$ (được xác định từ hệ thức truy hồi, Pt 4.76) là một hàm rất quen thuộc với các nhà toán học ứng dụng; ngoài việc chuẩn hóa, nó có thể được viết là

$$v(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho), \quad [4.86]$$

trong đó

$$L_{q-p}^p(x) \equiv (-1)^p \left(\frac{d}{dx}\right)^p L_q(x) \quad [4.87]$$

là một **đa thức Laguerre liên kết**, và

$$L_q(x) \equiv e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^q (e^{-x} x^q) \quad [4.88]$$

là **đa thức Laguerre** thứ q .¹⁶ (Một số đa thức Laguerre đầu tiên được liệt kê trong bảng 4.5; một số đa thức Laguerre liên kết được cho trong bảng 4.6. Một số hàm sóng xuyên tâm đầu

tiên được liệt kê trong bảng 4.7, và được vẽ trong Hình 4.4.) Các hàm sóng chuẩn hóa của hydro là¹⁷

$$\psi_{nlm} = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^l \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na)\right] Y_l^m(\theta, \phi). \quad [4.89]$$

Chúng không đẹp lắm, nhưng đừng phàn nàn – đây là một trong số rất ít hệ thực tế có thể được giải chính xác. Lưu ý rằng trong khi hàm sóng phụ thuộc vào cả ba số lượng tử, các *năng lượng* (Pt 4.70) được xác định chỉ bằng n . Đây là một sự kỳ cục của thế Coulomb; trong trường hợp của giếng cầu, bạn có thể nhớ lại, năng lượng cũng phụ thuộc vào l (Pt 4.50). Các hàm sóng trực giao từng đôi một:

$$\int \psi_{nlm}^* \psi_{n'l'm'} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad [4.90]$$

Điều này có được từ tính trực giao của các hàm điều hòa cầu (Pt 4.33) và (với $n \neq n'$) từ việc chúng là các hàm riêng của H với các trị riêng khác nhau.

Hình dung các hàm sóng của hydro không dễ. Các nhà hóa học thích vẽ “đồ thị mật độ,” trong đó độ sáng của đám mây tỉ lệ với $|\psi|^2$ (Hình 4.5). Các bề mặt có mật độ xác suất không đổi thì định lượng hơn (nhưng có lẽ khó đọc hơn) (Hình 4.6).

4.2.2 Phổ của hydro

Về nguyên tắc, nếu bạn đặt một nguyên tử hydro vào trạng thái dừng Ψ_{nlm} nào đó, nó sẽ ở đó mãi mãi. Tuy nhiên, nếu bạn *chạm nhẹ* vào nó (bằng cách va chạm với một nguyên tử khác, hay chiếu ánh sáng vào nó), electron sẽ thực hiện một **sự chuyển dời** tới trạng thái dừng khác – hoặc bằng cách *hấp thu* năng lượng, và di chuyển lên một trạng thái năng lượng cao hơn, hoặc *từ bỏ* năng lượng (thông thường dưới dạng bức xạ điện từ), và đi xuống.¹⁸ Trong thực tế những nhiễu loạn như vậy *luôn* hiện diện; sự chuyển dời (hoặc, như chúng thường được gọi, “bước nhảy lượng tử”) luôn xuất hiện, và kết quả là một bình chứa hydro giải phóng ánh sáng (các photon), có năng lượng ứng với sự *khác biệt* về năng lượng giữa trạng thái đầu và cuối:

$$E_\gamma = E_i - E_f = -13.6 \text{ eV} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right). \quad [4.91]$$

¹⁸ Về bản chất, điều này liên quan đến một tương tác phụ thuộc thời gian, và các chi tiết sẽ phải chờ tới Chương 9; cho những mục đích hiện tại cơ chế thực sự không quan trọng.

Bây giờ, theo **công thức Planck**,¹⁹ năng lượng của một photon tỉ lệ với tần số của nó:

$$E_\gamma = h\nu. \quad [4.92]$$

¹⁹ Photon là một lượng tử của bức xạ điện từ; nó là một đối tượng tương đối tính nếu có photon, và do đó nằm ngoài phạm vi của cơ học lượng tử phi tương đối tính. Sẽ hữu ích trong vài chỗ khi nói về photon, và đưa ra hệ thức Planck cho năng lượng của nó, nhưng xin hãy nhớ rằng nó nằm ngoài lý thuyết mà ta đang phát triển.

Trong khi đó, *bước sóng* được cho bởi $\lambda = c/\nu$, nên

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \quad [4.93]$$

trong đó

$$R \equiv \frac{m}{4\pi c \hbar^3} \left(\frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} \right)^2 = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \quad [4.94]$$

được biết là **hằng số Rydberg**. Pt 4.93 là **hệ thức Rydberg** cho phổ của hydro; nó được tìm ra bằng thực nghiệm vào thế kỷ mười chín, và thành công lớn nhất của lý thuyết Bohr là khả năng giải thích kết quả này – và tính R theo các hằng số cơ bản của tự nhiên. Các sự chuyển dời về trạng thái cơ bản ($n_f = 1$) nằm trong vùng cực tím; chúng được các nhà phổ học gọi là **dãy Lyman**. Những sự chuyển dời tới trạng thái kích thích thứ nhất ($n_f = 2$) nằm trong vùng khả kiến; chúng tạo thành **dãy Balmer**. Những sự chuyển dời tới $n_f = 3$ (**dãy Paschen**) nằm trong vùng hồng ngoại; và cứ vậy (xem Hình 4.7). (Ở nhiệt độ phòng, hầu hết các nguyên tử hydro nằm ở trạng thái cơ bản; để thu được phổ phát xạ đầu tiên bạn cho electron lên nhiều trạng thái kích thích; thông thường điều này được thực hiện bằng cách cho một tia lửa điện đi qua chất khí.)

4.3 MOMEN XUNG LƯỢNG

Như ta đã thấy, các trạng thái dừng của nguyên tử hydro được kí hiệu bằng ba số lượng tử: n , l , và m . Số lượng tử chính (n) xác định năng lượng của trạng thái (Pt 4.70); như đã biết, l và m liên hệ với momen xung lượng quỹ đạo. Trong lý thuyết cổ điển về lực xuyên tâm, năng lượng và momen xung lượng là những đại lượng bảo toàn cơ bản, và không ngạc nhiên khi momen xung lượng đóng một vai trò đáng kể (thực ra, thậm chí quan trọng hơn) trong lý thuyết lượng tử.

Về mặt cổ điển, momen xung lượng của một hạt (so với gốc tọa độ) được cho bởi hệ thức

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \quad [4.95]$$

tức,

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x. \quad [4.96]$$

Toán tử lượng tử tương ứng thu được theo cách quen thuộc $p_x \rightarrow -i\hbar \partial / \partial x$, $p_y \rightarrow -i\hbar \partial / \partial y$, $p_z \rightarrow -i\hbar \partial / \partial z$. Trong mục sau ta sẽ thu được các trị riêng của các toán tử momen xung lượng bằng một kỹ thuật thuần túy đại số tương tự với cái ta đã dùng trong Chương 2 để thu được các mức năng lượng của dao động tử điều hòa; nó hoàn toàn dựa vào việc khai thác thông minh các hệ thức giao hoán. Sau đó ta sẽ đi tới vấn đề khó khăn hơn là xác định các hàm riêng.

4.3.1 Trị riêng

Các toán tử L_x và L_y không giao hoán, thực vậy²¹

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z]. \end{aligned} \quad [4.97]$$

²¹ Lưu ý rằng mọi toán tử ta xét đến trong cơ học lượng tử (chú thích 15, Chương 1) có tính phân phối với phép cộng: $A(B + C) = AB + AC$. Đặc biệt, $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$

Từ các hệ thức giao hoán chính tắc (Pt 4.10) ta biết rằng các toán tử không giao hoán ở đây là x với p_x , y với p_y , và z với p_z . Nên hai số hạng ở giữa bỏ đi, để lại

$$[L_x, L_y] = yp_x[p_z, z] + xp_y[z, p_z] = i\hbar(xp_y - yp_x) = i\hbar L_z. \quad [4.98]$$

Dĩ nhiên ta có thể bắt đầu với $[L_y, L_z]$ hay $[L_z, L_x]$, nhưng không cần tính riêng lẻ – ta có thể thu ngay chúng bằng phép hoán vị vòng các chỉ số ($x \rightarrow y, y \rightarrow z, z \rightarrow x$):

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z; \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x; \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y. \quad [4.99]$$

Đây là các hệ thức giao hoán cơ bản cho momen xung lượng; mọi hệ thức khác có được từ chúng.

Lưu ý rằng L_x, L_y , và L_z là những đại lượng *không tương thích*. Theo nguyên lý bất định tổng quát (Pt 3.62),

$$\sigma_{L_x}^2 \sigma_{L_y}^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle i\hbar L_z \rangle \right)^2 = \frac{\hbar^2}{4} \langle L_z \rangle^2,$$

hay

$$\sigma_{L_x} \sigma_{L_y} \geq \frac{\hbar}{2} |\langle L_z \rangle|. \quad [4.100]$$

Do đó sẽ vô ích nếu tìm những trạng thái đồng thời là hàm riêng của L_x và L_y . Mặt khác, *bình phương* của momen xung lượng *toàn phần*,

$$L^2 \equiv L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, \quad [4.101]$$

giao hoán với L_x :

$$\begin{aligned} [L^2, L_x] &= [L_x^2, L_x] + [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] \\ &= L_y[L_y, L_x] + [L_y, L_x]L_y + L_z[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_z \\ &= L_y(-i\hbar L_z) + (-i\hbar L_z)L_y + L_z(i\hbar L_y) + (i\hbar L_y)L_z \\ &= 0. \end{aligned}$$

(Tôi đã dùng Pt 3.64 để đơn giản các giao hoán tử; cũng lưu ý rằng *mọi* toán tử giao hoán với *chính nó*.) Dĩ nhiên theo đó L^2 cũng giao hoán với L_y và L_z :

$$[L^2, L_x] = 0, \quad [L^2, L_y] = 0, \quad [L^2, L_z] = 0, \quad [4.102]$$

hay gọn hơn,

$$[L^2, \mathbf{L}] = 0. \quad [4.103]$$

Nên L^2 tương thích với mỗi thành phần của $\mathbf{L}$, và ta *có thể* hy vọng tìm thấy những trạng thái riêng đồng thời của L^2 và L_z (chẳng hạn):

$$L^2 f = \lambda f \quad \text{and} \quad L_z f = \mu f. \quad [4.104]$$

Tôi sẽ dùng kỹ thuật “toán tử thang”, rất tương tự với cái ta đã dùng cho dao động tử điều hòa ở Mục 2.3.1. Cho

$$L_{\pm} \equiv L_x \pm iL_y. \quad [4.105]$$

Giao hoán tử với L_z bằng

$$[L_z, L_{\pm}] = [L_z, L_x] \pm i[L_z, L_y] = i\hbar L_y \pm i(-i\hbar L_x) = \pm \hbar(L_x \pm iL_y),$$

nên

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm}. \quad [4.106]$$

Và, dĩ nhiên,

$$[L^2, L_{\pm}] = 0. \quad [4.107]$$

Tôi nói rằng nếu f là một hàm riêng của L^2 và L_z , thì $L_{\pm}f$ cũng vậy: Pt 4.107 nói rằng

$$L^2(L_{\pm}f) = L_{\pm}(L^2f) = L_{\pm}(\lambda f) = \lambda(L_{\pm}f), \quad [4.108]$$

nên $L_{\pm}f$ là một hàm riêng của L^2 , với cùng trị riêng λ , và Pt 4.106 nói

$$\begin{aligned} L_z(L_{\pm}f) &= (L_zL_{\pm} - L_{\pm}L_z)f + L_{\pm}L_zf = \pm \hbar L_{\pm}f + L_{\pm}(\mu f) \\ &= (\mu \pm \hbar)(L_{\pm}f), \end{aligned} \quad [4.109]$$

nên $L_{\pm}f$ là một hàm riêng của L_z với trị riêng *mới* $\mu \pm \hbar$. Ta gọi L_+ là toán tử lên, vì nó làm *tăng* trị riêng của L_z lên $\hbar$, và L_- là toán tử xuống, vì nó làm *giảm* trị riêng $\hbar$.

Cho một giá trị cho trước của λ , khi đó, ta thu được một cái “thang” các trạng thái, có mỗi “bậc” cách các bậc lân cận một đơn vị của $\hbar$ trong trị riêng của L_z (xem Hình 4.8). Để đi lên thang ta áp toán tử lên, và để đi xuống, ta áp toán tử xuống. Nhưng quá trình này không thể tiếp tục mãi: Thật vậy ta sẽ đạt tới một trạng thái ở đó thành phần z vượt quá giá trị *toàn phần*, và điều đó không thể.²² Phải tồn tại một “bậc trên cùng”, f_t , sao cho²³

$$L_+f_t = 0. \quad [4.110]$$

²² Về hình thức, $\langle L^2 \rangle = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \langle L_z^2 \rangle$, nhưng $\langle L_x^2 \rangle = \langle f | L_x^2 f \rangle = \langle L_x f | L_x f \rangle \geq 0$ (và tương tự cho y), nên $\lambda = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \mu^2 \geq \mu^2$.

²³ Thật vậy, mọi cái ta có thể kết luận là L_+f_t không chuẩn hóa được – chuẩn của nó có thể vô hạn, thay vì bằng không. Bài toán 4.18 xét điều này.

Cho $\hbar l$ là trị riêng của L_z ở bậc trên cùng này (sự phù hợp của kí tự “ l ” sẽ xuất hiện lát nữa):

$$L_zf_t = \hbar lf_t; \quad L^2f_t = \lambda f_t. \quad [4.111]$$

Bây giờ,

$$\begin{aligned} L_{\pm}L_{\mp} &= (L_x \pm iL_y)(L_x \mp iL_y) = L_x^2 + L_y^2 \mp i(L_xL_y - L_yL_x) \\ &= L^2 - L_z^2 \mp i(i\hbar L_z), \end{aligned}$$

hay, ghi nó cách khác,

$$L^2 = L_{\pm}L_{\mp} + L_z^2 \mp \hbar L_z. \quad [4.112]$$

Theo đó

$$L^2f_t = (L_-L_+ + L_z^2 + \hbar L_z)f_t = (0 + \hbar^2l^2 + \hbar^2l)f_t = \hbar^2l(l+1)f_t,$$

và do đó

$$\lambda = \hbar^2 l(l+1). \quad [4.113]$$

Điều này cho ta trị riêng của L^2 theo trị riêng *cực đại* của L_z .

Trong khi đó, cũng có (với cùng lý do) một bậc *thấp nhất*, f_b , sao cho

$$L_- f_b = 0. \quad [4.114]$$

Cho $\hbar \bar{l}$ là trị riêng của L_z ở bậc thấp nhất này:

$$L_z f_b = \hbar \bar{l} f_b; \quad L^2 f_b = \lambda f_b. \quad [4.115]$$

Dùng Pt 4.112, ta có

$$L^2 f_b = (L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z) f_b = (0 + \hbar^2 \bar{l}^2 - \hbar^2 \bar{l}) f_b = \hbar^2 \bar{l}(\bar{l} - 1) f_b,$$

và do đó

$$\lambda = \hbar^2 \bar{l}(\bar{l} - 1). \quad [4.116]$$

So sánh 4.112 và 4.116, ta thấy rằng $l(l+1) = \bar{l}(\bar{l}-1)$, nên hoặc là $\bar{l} = l+1$ (điều này phi lý – bậc thấp nhất sẽ cao hơn bậc cao nhất!) hoặc

$$\bar{l} = -l. \quad [4.117]$$

Rõ ràng, các trị riêng của L_z là $m\hbar$, trong đó m (sự phù hợp của kí tự này cũng sẽ rõ ràng lát nữa) đi từ $-l$ tới $+l$ với N bước nguyên. Đặc biệt, theo đó $l = -l + N$, và do đó $l = N/2$, nên l phải là một *số nguyên hoặc số bán nguyên*. Các trị riêng được đặc trưng bằng các con số l và m :

$$L^2 f_l^m = \hbar^2 l(l+1) f_l^m; \quad L_z f_l^m = \hbar m f_l^m, \quad [4.118]$$

trong đó

$$l = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots; \quad m = -l, -l+1, \dots, l-1, l. \quad [4.119]$$

Với một giá trị cho trước của l , có $2l+1$ giá trị khác nhau của m (ví dụ, $2l+1$ “bậc” của cái “thang”).

Một số người thích minh họa kết quả này bằng giản đồ trong Hình 4.9 (được vẽ cho trường hợp $l=2$). Các mũi tên được giả sử biểu diễn các momen xung lượng khả dĩ – theo đơn vị của $\hbar$ chúng có cùng độ dài $\sqrt{l(l+1)}$ (trong trường hợp này $\sqrt{6} = 2.45$), và các thành phần z của chúng là các giá trị được phép của m ($-2, -1, 0, 1, 2$). Lưu ý rằng độ lớn của các vector (bán kính của hình cầu) *lớn hơn* thành phần z cực đại! (Nói chung, $\sqrt{l(l+1)} > l$, trừ trường hợp “tầm thường” $l=0$.) Rõ ràng bạn không thể thu được momen xung lượng hướng hoàn toàn theo hướng z . Ban đầu điều này có vẻ phi lý. “Tại sao tôi không thể lấy các trục sao cho z chỉ dọc theo vector momen xung lượng?” Để làm điều đó bạn sẽ phải biết đồng thời cả ba thành phần, và nguyên lý bất định (Pt 4.100) nói rằng điều đó không thể. “Được rồi, nhưng chắc chắn một lần, do may mắn, tôi sẽ hướng trục z của tôi dọc theo hướng của $\mathbf{L}$.” Không! Bạn đã bỏ qua điểm này. Không đơn thuần là bạn không biết cả ba thành phần của $\mathbf{L}$; chỉ là không có ba thành phần – một hạt chỉ không thể có một vector momen xung lượng xác định, cũng như nó không thể đồng thời có một vị trí và xung lượng xác định. Nếu L_z có một giá trị xác định tốt, thì L_x và L_y không có. Thật lừa đảo nếu vẽ các vector trong hình 4.9 –

tốt nhất chúng phải được làm nhòe quanh các đường kinh độ, để chỉ ra rằng L_x và L_y không xác định.

Tôi hy vọng bạn cảm thấy ấn tượng: Bằng *phương tiện thuần túy đại số*, bắt đầu với các hệ thức giao hoán cơ bản cho momen xung lượng (Pt 4.9), ta đã xác định các trị riêng của L^2 và L_z - mà không cần biết các hàm riêng! Bây giờ ta trở lại vấn đề thiết lập các hàm riêng, nhưng tôi phải cảnh báo bạn rằng đây là một công việc phức tạp hơn nhiều. Vì như bạn biết ta đi đâu, tôi sẽ bắt đầu bằng kết luận: $f_l^m = Y_l^m$ - các hàm riêng của L^2 và L_z không gì khác mà là các hàm điều hòa cầu, mà ta đã đi bằng một con đường khá khác trong Mục 4.1.2 (đó là lý do tại sao tôi đã chọn các chữ cái l và m , dĩ nhiên). Và tôi có thể nói cho bạn tại sao các hàm điều hòa cầu trực giao: chúng là những hàm riêng của những toán tử hermit (L^2 và L_z) thuộc về những trị riêng khác nhau (Định lý 2, Mục 3.3.1).

4.3.2 Hàm riêng

Trước hết ta cần viết lại L_x , L_y , và L_z trong tọa độ cầu. Bây giờ, $\mathbf{L} = (\hbar/i)(\mathbf{r} \times \nabla)$, và gradient, trong tọa độ cầu, bằng:²⁴

$$\nabla = \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\phi} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}; \quad [4.123]$$

trong đó, $\vec{r} = r\hat{r}$, nên

$$\mathbf{L} = \frac{\hbar}{i} \left[r(\hat{r} \times \hat{r}) \frac{\partial}{\partial r} + (\hat{r} \times \hat{\theta}) \frac{\partial}{\partial \theta} + (\hat{r} \times \hat{\phi}) \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right].$$

Nhưng $(\hat{r} \times \hat{r}) = 0$, $(\hat{r} \times \hat{\theta}) = \hat{\phi}$, và $(\hat{r} \times \hat{\phi}) = -\hat{\theta}$ (xem Hình 4.1), và do đó

$$\mathbf{L} = \frac{\hbar}{i} \left(\hat{\phi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right). \quad [4.124]$$

Các vector đơn vị $\hat{\theta}$ và $\hat{\phi}$ có thể được phân tích theo các thành phần Descartes:

$$\hat{\theta} = (\cos \theta \cos \phi) \hat{i} + (\cos \theta \sin \phi) \hat{j} - (\sin \theta) \hat{k}; \quad [4.125]$$

$$\hat{\phi} = -(\sin \phi) \hat{i} + (\cos \phi) \hat{j}, \quad [4.126]$$

Do đó

$$\begin{aligned} \mathbf{L} = \frac{\hbar}{i} \left[(-\sin \phi \hat{i} + \cos \phi \hat{j}) \frac{\partial}{\partial \theta} \right. \\ \left. - (\cos \theta \cos \phi \hat{i} + \cos \theta \sin \phi \hat{j} - \sin \theta \hat{k}) \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right], \end{aligned}$$

Rõ ràng

$$L_x = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad [4.127]$$

$$L_y = \frac{\hbar}{i} \left(+\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad [4.128]$$

và

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad [4.129]$$

Ta cũng sẽ cần các toán tử lên và xuống:

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y = \frac{\hbar}{i} \left[(-\sin \phi \pm i \cos \phi) \frac{\partial}{\partial \theta} - (\cos \phi \pm i \sin \phi) \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right],$$

Nhưng $\cos \phi \pm i \sin \phi = e^{\pm i \phi}$, nên

$$L_{\pm} = \pm \hbar e^{\pm i \phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right). \quad [4.130]$$

Đặc biệt (bài toán 4.21(a)):

$$L_+ L_- = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + i \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad [4.131]$$

và do đó (bài toán 4.21(b)):

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad [4.132]$$

Bây giờ ta xác định $f_l^m(\theta, \phi)$. Nó là một hàm riêng của L^2 , với trị riêng $\hbar^2 l(l+1)$:

$$L^2 f_l^m = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] f_l^m = \hbar^2 l(l+1) f_l^m.$$

Nhưng đây chính là “phương trình góc” (Pt 4.18). Và nó cũng là một hàm riêng của L_z , với trị riêng $m\hbar$:

$$L_z f_l^m = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} f_l^m = m\hbar f_l^m,$$

nhưng đây tương đương với phương trình góc phương vị (Pt 4.21). Ta đã giải hệ phương trình này: Kết quả (được chuẩn hóa phù hợp) là hàm điều hòa cầu, $Y_l^m(\theta, \phi)$. *Kết luận*: Các hàm cầu là những hàm riêng của L^2 và L_z . Khi ta giải phương trình Schrödinger bằng cách tách biến, trong Mục 4.1, ta đã thiết lập một cách không chủ ý các hàm riêng đồng thời của ba toán tử giao hoán H , L^2 , và L_z :

$$H\psi = E\psi, \quad L^2\psi = \hbar^2 l(l+1)\psi, \quad L_z\psi = m\hbar\psi. \quad [4.133]$$

Vô tình, ta có thể dùng Pt 4.132 để viết lại phương trình Schrödinger (Pt 4.14) gọn hơn:

$$\frac{1}{2mr^2} \left[-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + L^2 \right] \psi + V\psi = E\psi.$$

Có một bước chuyển cuối cùng gây tò mò cho câu chuyện này, vì lý thuyết *đại số* của momen xung lượng cho phép l (và đó cũng là m) lấy những giá trị *bán nguyên* (Pt 4.119), còn phép tách biến chỉ cho những hàm riêng với những giá trị *nguyên* (Pt 4.29). Bạn có thể giả định rằng các nghiệm bán nguyên là giả, nhưng thực ra nó có tầm quan trọng sâu xa, như ta sẽ thấy trong các mục sau.

4.4 SPIN

Trong cơ học *cổ điển*, một vật rắn có hai loại momen xung lượng: *quĩ đạo* ($\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$), liên quan đến chuyển động của khối tâm, và *spin* ($\mathbf{S} = I\boldsymbol{\omega}$), liên quan đến chuyển động quanh khối tâm. Chẳng hạn, trái đất có momen xung lượng quỹ đạo do sự quay hằng năm quanh mặt trời, và momen xung lượng spin đến từ sự quay hằng ngày quanh trục bắc-nam. Trong trường hợp cổ điển sự phân biệt này phần lớn là một vấn đề tiện lợi, vì khi bạn đi vào bên trong, $\mathbf{S}$ chính là tổng toàn phần của momen xung lượng “quĩ đạo” của tất cả đất đá tạo thành trái đất, khi chúng quay quanh trục này. Nhưng một điều tương tự xảy ra trong cơ học lượng tử, và ở đây sự phân biệt là tuyệt đối cơ bản. Ngoài momen xung lượng quỹ đạo, liên hệ (trong trường hợp hydro) với chuyển động của electron quanh hạt nhân (và được mô tả bằng các hàm điều hòa cầu), electron cũng mang một dạng *khác* của momen xung lượng, không liên quan gì đến chuyển động trong không gian (và do đó không được mô tả bằng bất cứ hàm nào của các biến vị trí r, θ, ϕ) nhưng tương tự theo kiểu nào đó với spin cổ điển (và do đó, ta dùng cùng một từ). Không cần nhấn mạnh tính tương tự này quá xa: Electron (đến giờ) là một hạt điểm không có cấu trúc, và momen xung lượng spin của nó không thể được tách thành các momen xung lượng quỹ đạo của những phần cấu thành (xem bài toán 4.25).²⁵ Dù nói rằng các hạt cơ bản mang momen xung lượng *nội tại* ($\mathbf{S}$) ngoài momen xung lượng “ngoại tại” ($\mathbf{L}$).

Lý thuyết *đại số* của spin là bản copy của lý thuyết về momen xung lượng quỹ đạo, bắt đầu với các hệ thức giao hoán cơ bản:²⁶

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \quad [S_y, S_z] = i\hbar S_x, \quad [S_z, S_x] = i\hbar S_y. \quad [4.134]$$

Theo đó (như trước đây) các vector riêng của S^2 và S_z thỏa²⁷

$$S^2|s\,m\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s\,m\rangle; \quad S_z|s\,m\rangle = \hbar m|s\,m\rangle; \quad [4.135]$$

và

$$S_{\pm}|s\,m\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)}|s\,(m \pm 1)\rangle, \quad [4.136]$$

²⁷ Bởi vì các trạng thái riêng của spin không phải là *hàm số*, tôi sẽ dùng kí hiệu “ket” cho chúng (đáng lẽ tôi đã làm điều này trong mục 4.3, viết $|l\,m\rangle$ thay cho Y_l^m , nhưng trong tình huống đó kí hiệu hàm có vẻ tự nhiên hơn.) Nhân đây, tôi đang thiếu chữ cái, nên tôi sẽ dùng m cho trị riêng của S_z , như tôi đã làm với L_z (một số tác giả viết m_l và m_s , chỉ để rõ ràng một cách tuyệt đối).

Trong đó $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$. Nhưng lần này các vector riêng không phải là các hàm điều hòa cầu (chúng không phải là hàm của θ và ϕ), và không có lý do gì để loại bỏ những giá trị bán nguyên của s và m :

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots; \quad m = -s, -s+1, \dots, s-1, s. \quad [4.137]$$

Mỗi hạt cơ bản có một giá trị *cụ thể và không thay đổi* s , mà ta gọi là **spin** của loại cụ thể đó: meson pi có spin 0; electron có spin $\frac{1}{2}$; photon có spin 1; delta có spin $\frac{3}{2}$; graviton có spin 2; và cứ vậy. Trái lại, số lượng tử l của momen xung lượng *quỹ đạo* (cho một electron trong một nguyên tử hydro) có thể lấy bất cứ giá trị (nguyên) nào bạn thích, và sẽ thay đổi từ giá trị này qua giá trị khác khi hệ bị ảnh hưởng. Nhưng s *cố định*, cho bất cứ hạt nào cho trước, và điều này làm cho lý thuyết về spin tương đối đơn giản.²⁸

4.4.1 Spin $\frac{1}{2}$

Đến giờ trường hợp quan trọng nhất là $s = \frac{1}{2}$, vì đó là spin của các hạt cấu thành nên vật chất thông thường (proton, neutron, và electron), cũng như các quark và các lepton. Hơn nữa, một khi bạn hiểu spin $\frac{1}{2}$, tìm ra hình thức luận cho spin cao hơn là một vấn đề đơn giản. Chỉ có hai trạng thái riêng: $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$, mà ta gọi là **spin up** (không chính thức, $\uparrow$), và $|\frac{1}{2}, (-\frac{1}{2})\rangle$, mà ta gọi là **spin down** ($\downarrow$). Dùng chúng là những vectơ cơ sở, trạng thái tổng quát của một hạt có spin $\frac{1}{2}$ có thể được biểu diễn là một ma trận cột hai thành phần (hay **spinor**):

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\chi_+ + b\chi_-, \quad [4.139]$$

có

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad [4.140]$$

biểu diễn spin up, và

$$\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad [4.141]$$

cho spin down

Trong khi đó, các toán tử spin trở thành các ma trận 2×2 , mà ta có thể tìm ra bằng cách lưu ý ảnh hưởng của nó lên χ_+ và χ_- . Pt 4.135 nói

$$\mathbf{S}^2 \chi_+ = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_+ \quad \text{and} \quad \mathbf{S}^2 \chi_- = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_-. \quad [4.142]$$

Nếu ta viết $\mathbf{S}^2$ là một ma trận có các thành phần chưa được xác định,

$$\mathbf{S}^2 = \begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix},$$

thì phương trình đầu tiên cho

$$\begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{or} \quad \begin{pmatrix} c \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4} \hbar^2 \\ 0 \end{pmatrix},$$

nên $c = (3/4)\hbar^2$ và $e = 0$. Phương trình thứ hai cho

$$\begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \text{or} \quad \begin{pmatrix} d \\ f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{3}{4} \hbar^2 \end{pmatrix},$$

nên $d = 0$ và $f = (3/4)\hbar^2$. *Kết luận:*

$$\mathbf{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad [4.143]$$

Tương tự,

$$\mathbf{S}_z \chi_+ = \frac{\hbar}{2} \chi_+, \quad \mathbf{S}_z \chi_- = -\frac{\hbar}{2} \chi_-, \quad [4.144]$$

từ đó ta có

$$\mathbf{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad [4.145]$$

Trong khi đó, Pt 4.136 nói

$$\mathbf{S}_+ \chi_- = \hbar \chi_+, \quad \mathbf{S}_- \chi_+ = \hbar \chi_-, \quad \mathbf{S}_+ \chi_+ = \mathbf{S}_- \chi_- = 0,$$

nên

$$\mathbf{S}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad [4.146]$$

Bây giờ $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$, nên $S_x = (1/2)(S_+ + S_-)$ và $S_y = (1/2)(S_+ - S_-)$, và do đó

$$\mathbf{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad [4.147]$$

Vì S_x , S_y , và S_z đều mang một thừa số $\hbar/2$, sẽ gọn hơn nếu viết $\mathbf{S} = (\hbar/2)\boldsymbol{\sigma}$, trong đó

$$\boxed{\sigma_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.} \quad [4.148]$$

Đây là những **ma trận spin Pauli** nổi tiếng. Lưu ý rằng S_x , S_y , S_z , và $\mathbf{S}^2$ đều *hermit* (chúng phải vậy, vì chúng biểu diễn những đại lượng quan sát được). Mặt khác, S_+ và S_- *không* hermit – rõ ràng chúng không quan sát được.

Spinor riêng của S_z là (dĩ nhiên):

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \left(\text{eigenvalue} + \frac{\hbar}{2}\right); \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \left(\text{eigenvalue} - \frac{\hbar}{2}\right). \quad [4.149]$$

Nếu bạn đo S_z trên một hạt trong trạng thái tổng quát χ (Pt 4.139), bạn có thể thu được $+\hbar/2$, với xác suất $|a|^2$, hoặc $-\hbar/2$, với xác suất $|b|^2$. Vì đây là những khả năng *duy nhất*,

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \quad [4.150]$$

(tức là, spinor phải được *chuẩn hóa*).²⁹

²⁹ Người ta thường nói rằng $|a|^2$ là “xác suất mà hạt ở trong trạng thái spin up,” nhưng đó là cách dùng ẩu; chúng có ý nghĩa là nếu bạn đo S_z , $|a|^2$ là xác suất mà bạn thu được $\hbar/2$. Xem chú thích 16 trong Chương 3.

Nhưng thay vì vậy, nếu bạn chọn đo S_x thì sao? Các kết quả khả dĩ là gì, và xác suất tương ứng của chúng bằng bao nhiêu? Theo diễn giải thông kê tổng quát, ta cần biết các trị riêng và spinor riêng của S_x . Phương trình đặc trưng là

$$\begin{vmatrix} -\lambda & \hbar/2 \\ \hbar/2 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \Rightarrow \lambda = \pm \frac{\hbar}{2}.$$

Không ngạc nhiên, các giá trị khả dĩ của S_x cũng giống như của S_z . Các spinor riêng thu được theo cách thông thường:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \pm \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix},$$

nên $\beta = \pm \alpha$. Rõ ràng các spinor riêng (được chuẩn hóa) của S_x là

$$\chi_+^{(x)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \left(\text{eigenvalue} + \frac{\hbar}{2}\right); \quad \chi_-^{(x)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \left(\text{eigenvalue} - \frac{\hbar}{2}\right). \quad [4.151]$$

Là các vector riêng của một ma trận hermit, chúng trải ra toàn không gian; spinor χ (Pt 4.139) có thể được biểu diễn là một tổ hợp tuyến tính của chúng:

$$\chi = \left(\frac{a+b}{\sqrt{2}}\right) \chi_+^{(x)} + \left(\frac{a-b}{\sqrt{2}}\right) \chi_-^{(x)}. \quad [4.152]$$

Nếu bạn đo S_x , xác suất thu được $+\hbar/2$ bằng $(1/2)|a+b|^2$, và xác suất thu được $-\hbar/2$ bằng $(1/2)|a-b|^2$. (Bạn nên tự kiểm tra rằng những xác suất này cộng lại bằng 1.)

Ví dụ 4.3 Giả sử một hạt có spin $1/2$ ở trong trạng thái

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1+i \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Xác suất thu được $+\hbar/2$ và $-\hbar/2$ bằng bao nhiêu, nếu bạn đo S_z và S_x ?

Lời giải: Ở đây $a = (1+i)/\sqrt{6}$ và $b = 2/\sqrt{6}$, nên đối với S_z xác suất thu được $+\hbar/2$ bằng $|(1+i)/\sqrt{6}|^2 = 1/3$, và xác suất thu được $-\hbar/2$ bằng $|2/\sqrt{6}|^2 = 2/3$. Đối với S_x xác suất thu được $+\hbar/2$ bằng $(1/2)|(3+i)/\sqrt{6}|^2 = 5/6$, và xác suất thu được $-\hbar/2$ bằng $(1/2)|(-1+i)/\sqrt{6}|^2 = 1/6$. Tiện đây, trị *trung bình* của S_x bằng

$$\frac{5}{6} \left(+\frac{\hbar}{2}\right) + \frac{1}{6} \left(-\frac{\hbar}{2}\right) = \frac{\hbar}{3}.$$

Mà ta cũng có thể thu được một cách trực tiếp hơn:

$$\langle S_x \rangle = \chi^\dagger \mathbf{S}_x \chi = \begin{pmatrix} (1-i)/\sqrt{6} & 2/\sqrt{6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (1+i)/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{3}.$$

Bây giờ tôi muốn đưa bạn tới một kịch bản đo đặc trưng tương liên quan đến spin $1/2$, vì nó giúp minh họa theo những thuật ngữ cụ thể nhất một số ý tưởng trừu tượng ta đã bàn tới trong Chương 1. Hãy giả sử ta bắt đầu với một hạt trong trạng thái χ_+ . Nếu ai đó hỏi, “đâu là

thành phần z của momen xung lượng spin của hạt đó?”, bạn có thể trả lời không mơ hồ: $+\hbar/2$. Vì một phép đo S_z chắc chắn cho giá trị đó. Nhưng nếu người chất vấn hỏi, “Đâu là thành phần x của momen xung lượng spin của hạt đó?” ta buộc phải lập lờ: Nếu bạn đo S_x , khả năng là 50-50 thu được hoặc $\hbar/2$ hoặc $-\hbar/2$. Nếu người hỏi là một nhà vật lý cổ điển, hoặc một “nhà thực chứng” (theo nghĩa của mục 1.2), anh ta xem nó là một câu trả lời không thỏa đáng – nếu không muốn nói là vô lý: “Bạn đang nói với tôi rằng bạn *không biết* trạng thái thực của hạt đó?” Trái lại; tôi biết *chính xác* trạng thái của hạt là gì: χ_+ . “Vậy thì, làm sao bạn lại không thể cho tôi biết thành phần x của spin của nó là gì?” Vì nó *không có* một thành phần x cụ thể của spin. Thật vậy, nó *không thể*, vì nếu cả S_x và S_z được xác định đúng, nguyên lý bất định sẽ bị vi phạm.

Ở điểm này người thách thức ta cầm lấy cái ống kiểm tra và *đo* thành phần x của spin của nó; giả sử anh ta thu được giá trị $+\hbar/2$. “Aha” (anh ta hét lên sung sướng), “Bạn *nói dối!* Hạt này có một giá trị xác định hoàn hảo của S_x : $\hbar/2$.” Chắc chắn, - bây giờ nó như vậy, nhưng điều đó không chứng tỏ nó đã có giá trị đó, trước khi bạn đo. “Chắc chắn bạn đã chệch sợi tóc làm tư. Và dù sao, điều gì đã xảy ra với nguyên lý bất định của bạn?” Bây giờ tôi biết cả S_x và S_z . Tôi xin lỗi, nhưng bạn không có được: Khi bạn đo, bạn đã thay đổi trạng thái của hạt: bây giờ nó ở trong trạng thái $\chi_+^{(x)}$, và trong khi bạn biết giá trị của S_x , bạn không còn biết giá trị của S_z . “Nhưng tôi cực kỳ cẩn thận để không làm ảnh hưởng đến hạt khi tôi đo S_x .” Rất tốt, nếu bạn không tin tôi, hãy *kiểm tra* đi: Đo S_z , và xem bạn có gì. (Dĩ nhiên, anh ta có thể thu được $+\hbar/2$, điều đó sẽ làm tôi xấu hổ – nhưng nếu ta lặp lại toàn bộ kịch bản này nhiều lần, phân nửa thời gian anh ta sẽ thu được $-\hbar/2$.)

Đối với người không chuyên, triết gia, hay nhà vật lý cổ điển, một phát biểu có dạng “hạt này không có một vị trí xác định” (hoặc xung lượng, hoặc thành phần x của momen xung lượng spin, hoặc bất cứ cái gì) có vẻ mơ hồ, nghiệp dư, hoặc (tệ nhất) thâm thúy. Nó không phải vậy. Nhưng ý nghĩa chính xác là, tôi nghĩ, không thể thuyết phục bất cứ người nào không học cơ học lượng tử sâu. Nếu bạn thấy mình rơi vào sự khó hiểu này, từ từ (nếu bạn không muốn, có lẽ bạn đã không hiểu vấn đề này), trở lại hệ spin $1/2$: nó là trường hợp đơn giản nhất và rõ ràng nhất để nghĩ về các nghịch lý liên quan đến khái niệm của cơ học lượng tử.

4.4.2 Electron trong từ trường

Một hạt mang điện đang quay cầu thành một lưỡng cực từ. **Momen lưỡng cực từ**, μ , tỉ lệ với momen xung lượng spin của nó, $\mathbf{S}$:

$$\mu = \gamma \mathbf{S}; \quad [4.156]$$

Hằng số tỉ lệ, γ , được gọi là **tỉ số từ trở**.³⁰ Khi một lưỡng cực từ được đặt trong một từ trường $\mathbf{B}$, nó chịu một ngẫu lực, $\mu \times \mathbf{B}$, có xu hướng làm nó hướng song song với trường (giống như một kim la bàn). Năng lượng liên hệ với ngẫu lực này là³¹

$$H = -\mu \cdot \mathbf{B}, \quad [4.157]$$

nên Hamiltonian của một hạt mang điện đang quay, tại chỗ³² trong một từ trường $\mathbf{B}$, là

$$H = -\gamma \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}. \quad [4.158]$$

³² Nếu hạt được phép *di chuyển*, cũng cần xét động năng; hơn nữa, nó sẽ chịu lực Lorentz ($q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$), vốn không được dẫn ra từ một hàm thế năng, và do đó không khớp với phương trình Schrödinger mà ta đã phát

biểu đến giờ. Tôi sẽ chứng tỏ cho bạn sau khi xét điều này (Bài toán 4.59), nhưng hiện tại hãy giả sử rằng hạt tự do đang *quay*, nhưng nếu không phải vậy thì nó dừng.

Ví dụ 4.3 Hôï chuyển Larmor: Hình dung một hạt có spin $\frac{1}{2}$ đứng yên trong một từ trường đồng nhất, hướng theo trục z :

$$\mathbf{B} = B_0 \hat{k}. \quad [4.159]$$

Hamiltonian (Pt 4.158), dưới dạng ma trận, bằng

$$\mathbf{H} = -\gamma B_0 \mathbf{S}_z = -\frac{\gamma B_0 \hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad [4.160]$$

Các trạng thái riêng của $\mathbf{H}$ cũng giống như của $\mathbf{S}_z$:

$$\begin{cases} \chi_+, & \text{with energy } E_+ = -(\gamma B_0 \hbar)/2, \\ \chi_-, & \text{with energy } E_- = +(\gamma B_0 \hbar)/2. \end{cases} \quad [4.161]$$

Rõ ràng năng lượng là thấp nhất khi momen lưỡng cực song song với trường – giống như cổ điển.

Vì Hamiltonian độc lập thời gian, nghiệm tổng quát cho phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian,

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = \mathbf{H}\chi, \quad [4.162]$$

có thể được biểu diễn theo các trạng thái dừng:

$$\chi(t) = a\chi_+ e^{-iE_+t/\hbar} + b\chi_- e^{-iE_-t/\hbar} = \begin{pmatrix} ae^{i\gamma B_0 t/2} \\ be^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix}.$$

Các hằng số a và b được xác định từ các điều kiện ban đầu:

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

(dĩ nhiên, $|a|^2 + |b|^2 = 1$). Không hề mất tính tổng quát cốt yếu³³ tôi sẽ viết $a = \cos(\alpha/2)$ và $b = \sin(\alpha/2)$, trong đó α là một góc cố định có ý nghĩa vật lý sẽ xuất hiện lát nữa. Do đó

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2)e^{i\gamma B_0 t/2} \\ \sin(\alpha/2)e^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix}. \quad [4.163]$$

³³ Điều này giả sử rằng a và b là thực; bạn có thể tính trường hợp tổng quát nếu bạn muốn, nhưng cái nó làm là đưa thêm một hằng số vào t .

Để hiểu điều gì đang xảy ra ở đây, hãy tính giá trị trung bình của $\mathbf{S}$, là một hàm của thời gian:

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \chi(t)^\dagger \mathbf{S}_x \chi(t) = (\cos(\alpha/2)e^{-i\gamma B_0 t/2} \quad \sin(\alpha/2)e^{i\gamma B_0 t/2}) \\ &\quad \times \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2)e^{i\gamma B_0 t/2} \\ \sin(\alpha/2)e^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \sin \alpha \cos(\gamma B_0 t). \end{aligned} \quad [4.164]$$

Tương tự,

$$\langle S_y \rangle = \chi(t)^\dagger \mathbf{S}_y \chi(t) = -\frac{\hbar}{2} \sin \alpha \sin(\gamma B_0 t), \quad [4.165]$$

và

$$\langle S_z \rangle = \chi(t)^\dagger \mathbf{S}_z \chi(t) = \frac{\hbar}{2} \cos \alpha. \quad [4.166]$$

Rõ ràng $\langle \mathbf{S} \rangle$ bị nghiêng một góc không đổi α với trục z , và quay quanh trường với **tần số Larmor**

$$\omega = \gamma B_0, \quad [4.167]$$

Như cổ điển³⁴ (xem hình 4.10). Không có gì ngạc nhiên ở đây – định lý Ehrenfest (dưới dạng được dẫn ra trong bài toán 4.20) đảm bảo rằng $\langle \mathbf{S} \rangle$ tiến triển theo định luật cổ điển. Nhưng thật hay để thấy điều này được thực hiện ra sao trong một trường hợp cụ thể.

Ví dụ 4.4 Thí nghiệm Stern-Gerlach: Trong một từ trường *không đồng nhất*, không chỉ có một *ngẫu lực*, mà còn có một *lực*, lên một lưỡng cực từ.³⁵

$$\mathbf{F} = \nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}). \quad [4.168]$$

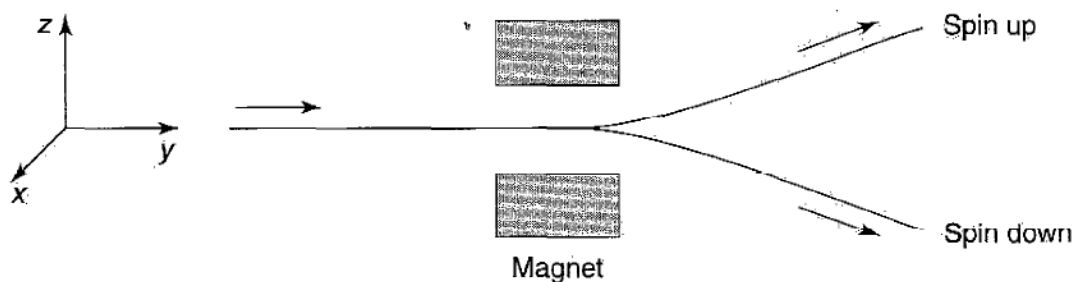
Lực này có thể được dùng để tách các hạt có một định hướng spin cụ thể, như sau. Hình dung một chùm các nguyên tử trung hòa tương đối nặng,³⁶ di chuyển theo trục y , đi qua một vùng có từ trường không đều (Hình 4.11) – tức,

$$\mathbf{B}(x, y, z) = -\alpha x \hat{i} + (B_0 + \alpha z) \hat{k}, \quad [4.169]$$

trong đó B_0 là một trường đồng nhất mạnh và hằng số α mô tả một độ lệch nhỏ khỏi tính đồng nhất. (Thật ra, cái ta muốn chỉ là thành phần z , nhưng không may điều này không thể – nó sẽ vi phạm định luật điện từ $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$; dù thích hay không, một thành phần x cũng có mặt.) Lực lên những nguyên tử này bằng

$$\mathbf{F} = \gamma \alpha (-S_x \hat{i} + S_z \hat{k}).$$

³⁶ Ta làm chúng trung hòa để tránh độ lệch lớn có thể có từ lực Lorentz, và nặng để ta có thể xây dựng các bó sóng định xứ và xét chuyển động theo các lộ trình hạt cổ điển. Trong thực tế, thí nghiệm Stern-Gerlach không làm được, chẳng hạn, với một chùm các electron tự do.



Hình 4.11: Thiết bị của thí nghiệm Stern-Gerlach.

Nhưng vì sự hồi chuyển Larmor quanh B_0 , S_x dao động nhanh, và *trung bình* bằng không; *hợp lực* là theo trục z :

$$F_z = \gamma \alpha S_z, \quad [4.170]$$

và chùm hạt bị lệch lên hoặc xuống, tỉ lệ với thành phần z của momen xung lượng spin. *Về mặt cổ điển* ta trông chờ một sự *nhòe* (vì S_z không bị lượng tử hóa), nhưng thật ra chùm hạt

bị tách thành $2s + 1$ dòng riêng lẻ, minh họa tuyệt đẹp sự lượng tử hóa của momen xung lượng. (Nếu bạn dùng các nguyên tử bạc chẳng hạn, mọi electron bên trong kết cặp, sao cho các momen xung lượng quỹ đạo và spin triệt tiêu. Spin tổng cộng chỉ là của electron không kết cặp ngoài cùng, nên trong trường hợp này $s = 1/2$, và chùm hạt bị tách thành hai.)

Bây giờ, lập luận đó thuần túy *cổ điển*, đến chính bước cuối cùng, “lực” không có chỗ trong một tính toán lượng tử chính gốc, và do đó bạn có thể thích cách tiếp cận sau đây cho cùng bài toán.³⁷ Ta xét quá trình từ phương diện của một hệ qui chiếu chuyển động dọc theo chùm hạt. Trong hệ qui chiếu này Hamiltonian bắt đầu bằng không, bật lên trong một thời gian T (khi hạt đi qua nam châm), và sau đó lại tắt:

$$H(t) = \begin{cases} 0, & \text{for } t < 0, \\ -\gamma(B_0 + \alpha z)S_z, & \text{for } 0 \leq t \leq T, \\ 0, & \text{for } t > T. \end{cases} \quad [4.171]$$

(Tôi bỏ qua thành phần x của $\mathbf{B}$, mà - vì lý do được đề cập ở trên - không quan trọng cho bài toán.) Giả sử nguyên tử có spin $1/2$, và bắt đầu trong trạng thái

$$\chi(t) = a\chi_+ + b\chi_-, \quad \text{for } t \leq 0.$$

Trong khi Hamiltonian tác dụng, $\chi(t)$ tiến triển theo cách thông thường:

$$\chi(t) = a\chi_+ e^{-iE_+ t/\hbar} + b\chi_- e^{-iE_- t/\hbar}, \quad \text{for } 0 \leq t \leq T,$$

trong đó (từ pt 4.158)

$$E_{\pm} = \mp \gamma(B_0 + \alpha z) \frac{\hbar}{2}, \quad [4.172]$$

và do đó nó xuất hiện trong trạng thái

$$\chi(t) = \left(a e^{i\gamma T B_0/2} \chi_+ \right) e^{i(\alpha\gamma T/2)z} + \left(b e^{-i\gamma T B_0/2} \chi_- \right) e^{-i(\alpha\gamma T/2)z}, \quad [4.173]$$

(cho $t \geq T$). Hai số hạng bây giờ mang *xung lượng* theo hướng z (xem Pt 3.32); thành phần spin up có xung lượng

$$p_z = \frac{\alpha\gamma T \hbar}{2}, \quad [4.174]$$

và nó di chuyển theo trục z dương; thành phần spin down có xung lượng trái dấu, và nó di chuyển theo trục z âm. Do đó chùm hạt bị tách thành hai như trước (Lưu ý rằng Pt 4.174 tương thích với kết quả trước (Pt 4.170), vì trong trường hợp này $S_z = \hbar/2$, và $p_z = F_z T$.)

Thí nghiệm Stern-Gerlach đóng một vai trò quan trọng trong triết học của cơ học lượng tử, ở đó nó vừa phục vụ là hình mẫu cho sự chuẩn bị của một trạng thái lượng tử, vừa là một mô hình minh họa cho một kiểu đo lường từ nào đó. Ta dần dần có xu hướng giả sử rằng trạng thái *bán đầu* của một hệ là *được biết* (phương trình Schrödinger cho ta biết nó tiến triển ra sao sau đó) - nhưng sẽ tự nhiên khi tự hỏi bạn đưa một hệ vào một trạng thái cụ thể ra sao lúc đầu. Nếu bạn muốn chuẩn bị một chùm nguyên tử trong một cấu hình spin cho trước, bạn đưa một chùm không phân cực qua một nam châm Stern-Gerlach, và chọn chùm hạt ra mà bạn thích (đóng chùm còn lại với cái nắp). Ngược lại, nếu bạn muốn *đo* thành phần z của spin nguyên tử, bạn đưa nó qua một thiết bị Stern-Gerlach, và ghi lại nó ra phần nào. Tôi không nói rằng đây luôn là cách *tiện* nhất để làm việc này, nhưng về *mặt khái niệm*

nó rất rõ ràng, và do đó là một trường hợp hữu ích để khám phá các vấn đề của việc chuẩn bị và đo trạng thái.

4.4.3 Cộng momen xung lượng

Bây giờ giả sử ta có hai hạt có spin $\frac{1}{2}$ - chẳng hạn, electron và proton trong trạng thái cơ bản³⁸ của hydro. Mỗi hạt có thể có spin up hoặc spin down, nên có bốn khả năng cả thảy.³⁹

$$\uparrow\uparrow, \uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow, \downarrow\downarrow, \quad [4.175]$$

Trong đó mũi tên đầu tiên chỉ electron và mũi tên thứ hai chỉ proton. *Câu hỏi:* Momen xung lượng *tổng phần* của nguyên tử bằng bao nhiêu? Cho

$$\mathbf{S} \equiv \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}. \quad [4.176]$$

³⁸ Tôi đặt chúng vào trạng thái cơ bản để không phải lo có bất cứ momen xung lượng quỹ đạo nào.

³⁹ Chính xác hơn, mỗi hạt ở trong một *tổ hợp tuyến tính* của spin up và spin down, và hệ tích hợp ở trong một *tổ hợp tuyến tính* của bốn trạng thái được liệt kê.

Mỗi trạng thái trong bốn trạng thái tích hợp này là một trạng thái riêng của S_z – các thành phần z chỉ *cộng lại*:

$$\begin{aligned} S_z \chi_1 \chi_2 &= (S_z^{(1)} + S_z^{(2)}) \chi_1 \chi_2 = (S_z^{(1)} \chi_1) \chi_2 + \chi_1 (S_z^{(2)} \chi_2) \\ &= (\hbar m_1 \chi_1) \chi_2 + \chi_1 (\hbar m_2 \chi_2) = \hbar(m_1 + m_2) \chi_1 \chi_2, \end{aligned}$$

(Lưu ý rằng $\mathbf{S}^{(1)}$ chỉ tác dụng lên χ_1 , và $\mathbf{S}^{(2)}$ chỉ tác dụng lên χ_2 ; kí hiệu này có thể không đẹp, nhưng nó làm được việc). Nên m (số lượng tử của hệ tích hợp) bằng $m_1 + m_2$:

$$\uparrow\uparrow: m = 1;$$

$$\uparrow\downarrow: m = 0;$$

$$\downarrow\uparrow: m = 0;$$

$$\downarrow\downarrow: m = -1.$$

Thoạt nhìn, điều này có vẻ không đúng: m được giả định tiến theo từng bước nguyên, từ $-s$ tới $+s$, nên có vẻ $s = 1$ – nhưng có thêm một trạng thái với $m = 0$. Một cách để tháo gỡ vấn đề này là áp dụng toán tử xuống, $S_- = S_-^{(1)} + S_-^{(2)}$ cho trạng thái $\uparrow\uparrow$, dùng Pt 4.146:

$$\begin{aligned} S_-(\uparrow\uparrow) &= (S_-^{(1)} \uparrow) \uparrow + \uparrow (S_-^{(2)} \uparrow) \\ &= (\hbar \downarrow) \uparrow + \uparrow (\hbar \downarrow) = \hbar(\downarrow\uparrow + \uparrow\downarrow). \end{aligned}$$

Rõ ràng ba trạng thái có $s = 1$ là (theo kí hiệu $|s\ m\rangle$):

$$\left\{ \begin{array}{l} |1\ 1\rangle = \uparrow\uparrow \\ |1\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) \\ |1\ -1\rangle = \downarrow\downarrow \end{array} \right\} \quad s = 1 \text{ (triplet)}. \quad [4.177]$$

(hãy áp dụng toán tử xuống cho $|1\ 0\rangle$ để kiểm tra: bạn thu được gì? Xem bài toán 4.34(a).) Đây được gọi là tổ hợp **tam tuyến**, vì lý do hiển nhiên. Trong khi đó, trạng thái trực giao có $m = 0$ mang $s = 0$:

$$\left\{ |0\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) \right\} \quad s = 0 \text{ (singlet)}. \quad [4.178]$$

(Nếu bạn áp dụng toán tử lên hoặc xuống cho trạng thái này, bạn sẽ thu được *không*. Xem bài toán 4.34(b).)

Khi đó tôi nói rằng tổ hợp của hai hạt có spin $\frac{1}{2}$ có thể mang một spin toàn phần 1 hoặc 0, phụ thuộc vào việc chúng chiếm cấu hình tam tuyến hay đơn tuyến. Để *khẳng định* điều này, tôi cần chứng minh rằng các trạng thái tam tuyến là những vector riêng của S^2 với trị riêng $2\hbar^2$, và trạng thái đơn tuyến là một vector riêng của S^2 với trị riêng 0. Bây giờ,

$$S^2 = (\mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}) \cdot (\mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}) = (S^{(1)})^2 + (S^{(2)})^2 + 2\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)}. \quad [4.179]$$

Dùng Pt 4.145 và 4.147, ta có

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)} (\uparrow\downarrow) &= (S_x^{(1)} \uparrow)(S_x^{(2)} \downarrow) + (S_y^{(1)} \uparrow)(S_y^{(2)} \downarrow) + (S_z^{(1)} \uparrow)(S_z^{(2)} \downarrow) \\ &= \left(\frac{\hbar}{2} \downarrow\right) \left(\frac{\hbar}{2} \uparrow\right) + \left(\frac{i\hbar}{2} \downarrow\right) \left(\frac{-i\hbar}{2} \uparrow\right) + \left(\frac{\hbar}{2} \uparrow\right) \left(\frac{-\hbar}{2} \downarrow\right) \\ &= \frac{\hbar^2}{4} (2 \downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow). \end{aligned}$$

Tương tự,

$$\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)} (\downarrow\uparrow) = \frac{\hbar^2}{4} (2 \uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow).$$

Theo đó

$$\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)} |1\ 0\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\sqrt{2}} (2 \downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow + 2 \uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) = \frac{\hbar^2}{4} |1\ 0\rangle, \quad [4.180]$$

và

$$\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)} |0\ 0\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\sqrt{2}} (2 \downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow - 2 \uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) = -\frac{3\hbar^2}{4} |0\ 0\rangle. \quad [4.181]$$

Trở lại Pt 4.179 (và dùng Pt 4.142), ta kết luận rằng

$$S^2 |1\ 0\rangle = \left(\frac{3\hbar^2}{4} + \frac{3\hbar^2}{4} + 2\frac{\hbar^2}{4} \right) |1\ 0\rangle = 2\hbar^2 |1\ 0\rangle, \quad [4.182]$$

nên $|1\ 0\rangle$ thực ra là một trạng thái riêng của S^2 với trị riêng $2\hbar^2$; và

$$S^2 |0\ 0\rangle = \left(\frac{3\hbar^2}{4} + \frac{3\hbar^2}{4} - 2\frac{3\hbar^2}{4} \right) |0\ 0\rangle = 0, \quad [4.183]$$

nên $|0\ 0\rangle$ là một trạng thái riêng của S^2 với trị riêng 0. (Tôi sẽ để lại nó cho bạn kiểm chứng rằng $|1\ 1\rangle$ và $|1\ -1\rangle$ là những trạng thái riêng của S^2 , với trị riêng phù hợp – xem bài toán 4.34(c).)

Cái ta vừa làm (kết hợp spin $\frac{1}{2}$ với spin $\frac{1}{2}$ để có spin 1 và spin 0) là ví dụ đơn giản nhất của một bài toán lớn hơn: Nếu bạn kết hợp spin s_1 với spin s_2 , bạn có thể thu được spin toàn phần s nào? ⁴⁰ Câu trả lời ⁴¹ là bạn thu được mọi spin từ $(s_1 + s_2)$ xuống $(s_1 - s_2)$ – hoặc $(s_2 - s_1)$, nếu $s_2 > s_1$ – theo từng bước nguyên:

$$s = (s_1 + s_2), (s_1 + s_2 - 1), (s_1 + s_2 - 2), \dots, |s_1 - s_2|. \quad [4.184]$$

(Nói nôm na, spin toàn phần cao nhất xuất hiện khi các spin riêng lẻ hướng song song với nhau, và spin thấp nhất xuất hiện khi chúng đối song.) Chẳng hạn, nếu bạn xếp cùng nhau một hạt có spin $3/2$ với một hạt có spin 2, bạn có thể thu được một spin toàn phần $7/2, 5/2, 3/2$, hoặc $1/2$, phụ thuộc vào cấu hình. Một ví dụ khác: Nếu một nguyên tử hydro ở trạng thái ψ_{nlm} , momen xung lượng toàn phần của electron (spin cộng quỹ đạo) là $l + \frac{1}{2}$ hoặc $l - \frac{1}{2}$; nếu bây giờ bạn bỏ vào spin của *proton*, số lượng tử momen xung lượng *toàn phần* của nguyên tử bằng $l + 1, l$, hoặc $l - 1$ (và l có thể thu được theo hai cách khác nhau, phụ thuộc vào việc một mình electron ở trong cấu hình $l + \frac{1}{2}$ hay cấu hình $l - \frac{1}{2}$).

Trạng thái kết hợp $|s\ m\rangle$ có spin toàn phần s và thành phần z là m sẽ là tổ hợp tuyến tính của các trạng thái tích hợp $|s_1\ m_1\rangle|s_2\ m_2\rangle$:

$$|s\ m\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} C_{m_1 m_2 m}^{s_1 s_2 s} |s_1\ m_1\rangle |s_2\ m_2\rangle \quad [4.185]$$

(vì các thành phần z cộng vào, chỉ các trạng thái phức hợp đóng góp sao cho $m_1 + m_2 = m$). Pt 4.177 và 4.178 là những trường hợp đặc biệt của dạng tổng quát này, có $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ (tôi đã dùng kí hiệu thông thường $\uparrow = |\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\rangle, \downarrow = |\frac{1}{2}\ (-\frac{1}{2})\rangle$). Các hằng số $C_{m_1 m_2 m}^{s_1 s_2 s}$ được gọi là **hệ số**

Clebsch-Gordan. Một vài ví dụ đơn giản nhất được liệt kê trong bảng 4.8. ⁴² Chẳng hạn, cột tô của bảng 2×1 cho ta biết rằng

$$|3\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} |2\ 1\rangle |1\ -1\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}} |2\ 0\rangle |1\ 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}} |2\ -1\rangle |1\ 1\rangle.$$

Đặc biệt, nếu hai hạt (có spin 2 và spin 1) đứng yên trong một cái hộp, và spin *toàn phần* bằng 3, và thành phần z của nó bằng 0, thì một phép đo $S_z^{(1)}$ có thể cho giá trị $\hbar$ (với xác suất $1/5$), hoặc 0 (với xác suất $3/5$), hoặc $-\hbar$ (với xác suất $1/5$). Lưu ý rằng các xác suất cộng lại bằng 1 (tổng bình phương của bất cứ cột nào trên bảng Clebsch-Gordan bằng 1).

Những bảng này cũng đúng theo cách khác:

$$|s_1\ m_1\rangle |s_2\ m_2\rangle = \sum_s C_{m_1 m_2 m}^{s_1 s_2 s} |s\ m\rangle. \quad [4.186]$$

Chẳng hạn, hàng tô trong bảng $3/2 \times 1$ cho ta biết rằng

$$|\frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\rangle |1\ 0\rangle = \sqrt{\frac{3}{5}} |\frac{5}{2}\ \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{15}} |\frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\rangle.$$

Nếu bạn đặt các hạt có spin $3/2$ và spin 1 trong hộp, và bạn biết rằng hạt đầu có $m_1 = 1/2$ và hạt sau có $m_2 = 0$ (để cho m nhất thiết bằng $1/2$), và bạn đo spin toàn phần s , bạn có thể thu được $5/2$ (với xác suất $3/5$), hoặc $3/2$ (với xác suất $1/15$), hoặc $1/2$ (với xác suất $1/3$). Lại nữa, tổng của các xác suất bằng 1 (tổng của bình phương mỗi hàng trên bảng Clebsch-Gordan bằng 1).

Nếu bạn nghĩ điều này bắt đầu có vẻ giống số học kỳ bí, tôi không trách bạn. Ta sẽ không dùng bảng Clebsch-Gordan nhiều trong phần còn lại, nhưng tôi muốn bạn biết chỗ gắn chúng vào, trong trường hợp bạn gặp chúng sau này. Theo một nghĩa toán học đây là toàn bộ **lý thuyết nhóm** ứng dụng – cái ta đang nói là tách tích trực tiếp của hai biểu diễn bất khả qui của nhóm quay thành một tổng trực tiếp các biểu diễn bất khả qui (bạn có thể dẫn lại điều này, để gây ấn tượng với bạn bè).

CHƯƠNG 5

CÁC HẠT ĐỒNG NHẤT

5.1 HỆ HAI HẠT

Đối với một hạt, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ là một hàm của các tọa độ không gian, $\mathbf{r}$, và thời gian, t (tạm thời tôi sẽ bỏ qua spin). Trạng thái của một hệ *hai* hạt là một hàm của các tọa độ của hạt một ($\mathbf{r}_1$), các tọa độ của hạt hai ($\mathbf{r}_2$), và thời gian:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t). \quad [5.1]$$

Sự tiến triển theo thời gian được xác định (luôn luôn) bằng phương trình Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi, \quad [5.2]$$

trong đó H là Hamiltonian cho cả hệ:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \quad [5.3]$$

(chỉ số dưới trên ∇ chỉ phép lấy đạo hàm theo các tọa độ của hạt 1 hoặc hạt 2, như trong trường hợp này). Diễn giải thống kê được đưa ra theo cách thông thường:

$$|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|^2 d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \quad [5.4]$$

là xác suất tìm thấy hạt 1 trong thể tích $d^3\mathbf{r}_1$ và hạt 2 trong thể tích $d^3\mathbf{r}_2$; rõ ràng Ψ phải được chuẩn hóa sao cho

$$\int |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|^2 d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 = 1. \quad [5.5]$$

Đối với các thể độc lập thời gian, ta thu được một tập đầy đủ các nghiệm bằng cách tách biến:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{-iEt/\hbar}, \quad [5.6]$$

trong đó hàm sóng không gian (ψ) thỏa phương trình Schrödinger độc lập thời gian:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 \psi + V\psi = E\psi, \quad [5.7]$$

và E là năng lượng toàn phần của hệ.

5.1.1 Boson và Fermion

Giả sử hạt 1 ở trạng thái (một hạt) $\psi_a(\mathbf{r})$, và hạt 2 ở trạng thái $\psi_b(\mathbf{r})$. (Nhớ rằng: tạm thời, tôi bỏ qua spin.) Trong trường hợp đó $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ là một *tích* đơn giản.²

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_a(\mathbf{r}_1) \psi_b(\mathbf{r}_2). \quad [5.9]$$

Dĩ nhiên, điều này giả định rằng ta có thể phân biệt các hạt – nếu không sẽ không có nghĩa khi nói rằng số 1 là ở trạng thái ψ_a và số 2 ở trạng thái ψ_b ; cái ta có thể nói là một trong

chúng ở trạng thái ψ_a và hạt còn lại ở trạng thái ψ_b , nhưng ta sẽ không biết cái nào là cái nào. Nếu ta đang nói về cơ học *cổ điển* thì điều này sẽ là một sự phản đối ngu xuẩn: Bạn *luôn* có thể phân biệt chúng, về nguyên tắc – chỉ cần sơn đỏ một hạt và sơn xanh hạt còn lại, hoặc dán những con số nhận dạng lên chúng, hoặc thuê những thám tử tư để theo dõi chúng. Nhưng trong cơ học lượng tử tình huống này khác về cơ bản: bạn không thể sơn một electron màu đỏ, hoặc dán nhãn lên nó, và những quan sát của một thám tử sẽ thay đổi trạng thái của nó một cách không tiên đoán được và không thể tránh được, tạo ra nghi ngờ rằng liệu hai hạt có lẽ đã đổi chỗ cho nhau. Thật ra, mọi electron đều *hoàn toàn đồng nhất*, theo cách mà không có hai đối tượng cổ điển nào có thể có. Ta chỉ không biết electron nào là hạt nào; *Thượng đế* không biết hạt nào với hạt nào, vì không *có cái nào* là electron “này”, hoặc electron “kia”; mọi cái ta có thể nói một cách hợp pháp là một electron nào đó.

Cơ học lượng tử dàn xếp một cách rõ ràng sự tồn tại của những hạt về *nguyên tắc không phân biệt được*: Ta chỉ thiết lập một hàm sóng mà *không cam kết* hạt nào ở trạng thái nào. Thật vậy có *hai* cách để làm điều đó

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) \pm \psi_b(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2)]. \quad [5.10]$$

Do đó lý thuyết này chấp nhận hai loại hạt đồng nhất: các **boson**, mà ta sẽ dùng dấu cộng, và các **fermion**, mà ta sẽ dùng dấu trừ. Photon và meson là boson ; proton và electron là fermion. Thật ra

các hạt có spin *nguyên* là boson, và [5.11]

các hạt có spin *bán nguyên* là fermion

Mối liên hệ này giữa **spin** và **thống kê** (như ta sẽ thấy, boson và fermion có những tính chất thống kê khá khác nhau) có thể được *chứng minh* trong cơ học lượng tử *tương đối tính* ; trong lý thuyết phi tương đối tính này nó được xem là một tiên đề.³

Đặc biệt, theo đó *hai fermion đồng nhất* (chẳng hạn, hai electron) *không thể chiếm cùng trạng thái*. Vì nếu $\psi_a = \psi_b$, thì

$$\psi_{-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2) - \psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2)] = 0,$$

và chúng ta không có hàm sóng nào cả.⁴ Đây là **nguyên lý loại trừ Pauli** nổi tiếng. Nó không phải là một giả thiết cho trước kì cục, chỉ được áp dụng cho các electron, mà là một hệ quả của các qui tắc xây dựng hàm sóng hai hạt, áp dụng cho *mọi* fermion đồng nhất.

⁴ Đừng quên tôi vẫn bỏ qua spin – nếu điều này làm bạn phiền (rất cuộc, một fermion không có spin là một mẫu thuẫn về thuật ngữ), giả sử chúng ở *cùng* trạng thái spin. Lát nữa tôi sẽ đưa spin vào.

Tôi đã giả sử, để đơn giản, rằng một hạt ở trạng thái ψ_a và hạt kia ở trạng thái ψ_b , nhưng có một cách tổng quát hơn (và phức tạp hơn) để mô tả vấn đề này. Hãy định nghĩa **toán tử hoán vị**, P , đổi chỗ hai hạt :

$$Pf(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = f(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \quad [5.12]$$

Rõ ràng, $P^2 = 1$, và theo đó (hãy tự chứng minh) rằng các trị riêng của P bằng ± 1 . Lúc này, nếu hai hạt đồng nhất, Hamiltonian phải xét chúng như nhau : $m_1 = m_2$ và $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$. Theo đó P và H là những đại lượng tương thích,

$$[P, H] = 0, \quad [5.13]$$

và do đó ta có thể tìm ra một tập hợp đầy đủ các hàm đồng thời là trạng thái riêng của cả hai. Tức là, ta có thể tìm những nghiệm của phương trình Schrödinger hoặc đối xứng (trị riêng +1) hoặc phản xứng (trị riêng -1) dưới phép hoán vị :

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \pm \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \quad [5.14]$$

Hơn nữa, nếu một hệ bắt đầu trong một trạng thái như vậy, nó sẽ vẫn ở trong trạng thái như vậy. Định luật *mới* (tôi sẽ gọi nó là **yêu cầu về tính đối xứng**) là đối với những hạt đồng nhất hàm sóng không chỉ *được phép*, mà *được yêu cầu* thỏa Pt 5.14, với dấu cộng cho boson, và dấu trừ cho fermion.⁵ Đây là phát biểu *tổng quát*, mà Pt 5.10 là một trường hợp đặc biệt.

Ví dụ 5.1 Giả sử ta có hai hạt không tương tác – chúng chỉ đi qua nhau ... đừng lo bằng cách nào bạn sẽ thiết lập điều này trong thực tế !, cả hai có khối lượng m , trong giếng vuông vô cùng (mục 2.2). Các trạng thái một hạt là

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad E_n = n^2 K$$

(trong đó $K = \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$, cho tiện). Nếu các hạt là *phân biệt được*, với #1 trong trạng thái n_1 và #1 trong trạng thái n_2 , hàm sóng tích hợp là một tích đơn giản :

$$\psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2), \quad E_{n_1 n_2} = (n_1^2 + n_2^2) K.$$

Chẳng hạn, trạng thái cơ bản là

$$\psi_{11} = \frac{2}{a} \sin(\pi x_1/a) \sin(\pi x_2/a), \quad E_{11} = 2K;$$

trạng thái kích thích thứ nhất suy biến bội hai :

$$\psi_{12} = \frac{2}{a} \sin(\pi x_1/a) \sin(2\pi x_2/a), \quad E_{12} = 5K,$$

$$\psi_{21} = \frac{2}{a} \sin(2\pi x_1/a) \sin(\pi x_2/a), \quad E_{21} = 5K;$$

và cứ vậy. Nếu hai hạt là những *boson* đồng nhất, trạng thái cơ bản không thay đổi, nhưng trạng thái kích thích thứ nhất là *không suy biến* :

$$\frac{\sqrt{2}}{a} [\sin(\pi x_1/a) \sin(2\pi x_2/a) + \sin(2\pi x_1/a) \sin(\pi x_2/a)]$$

(vẫn có năng lượng $5K$). Và nếu các hạt là những *fermion* đồng nhất, *không* có trạng thái có năng lượng $2K$; trạng thái cơ bản là

$$\frac{\sqrt{2}}{a} [\sin(\pi x_1/a) \sin(2\pi x_2/a) - \sin(2\pi x_1/a) \sin(\pi x_2/a)],$$

và năng lượng của nó bằng $5K$.

5.1.2 Lực trao đổi

Để giúp bạn hiểu yêu cầu về tính đối xứng thực sự làm gì, tôi sẽ tính cụ thể một ví dụ một chiều đơn giản. Giả sử một hạt ở trạng thái $\psi_a(x)$, và hạt kia ở trạng thái $\psi_b(x)$, và hai trạng thái này là trực giao và chuẩn hóa. Nếu hai hạt là phân biệt được, và số 1 là hạt ở trạng thái ψ_a , thì hàm sóng kết hợp là

$$\psi(x_1, x_2) = \psi_a(x_1)\psi_b(x_2); \quad [5.15]$$

nếu chúng là những boson đồng nhất, hàm sóng tích hợp là (xem bài toán 5.4 cho sự chuẩn hóa)

$$\psi_+(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) + \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)]; \quad [5.16]$$

và nếu chúng là những fermion đồng nhất, nó là

$$\psi_-(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)]. \quad [5.17]$$

Hãy tính giá trị trung bình của bình phương khoảng cách giữa hai hạt này,

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x_1^2 \rangle + \langle x_2^2 \rangle - 2\langle x_1 x_2 \rangle, \quad [5.18]$$

Trường hợp 1: Các hạt phân biệt được. Đối với hàm sóng trong Pt 5.15,

$$\langle x_1^2 \rangle = \int x_1^2 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x^2 \rangle_a$$

(trị trung bình của x^2 trong trạng thái một hạt ψ_a),

$$\langle x_2^2 \rangle = \int |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2^2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x^2 \rangle_b,$$

và

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \int x_1 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b.$$

Trong trường hợp đó, thì,

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_d = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b. \quad [5.19]$$

(Nhân đây, dĩ nhiên câu trả lời sẽ như nhau nếu hạt 1 ở trạng thái ψ_b , và hạt 2 ở trạng thái ψ_a .)

Trường hợp 2: Các hạt đồng nhất. Đối với những hàm sóng trong Pt 5.16 và 5.17,

$$\begin{aligned}
\langle x_1^2 \rangle &= \frac{1}{2} \left[\int x_1^2 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 \right. \\
&\quad + \int x_1^2 |\psi_b(x_1)|^2 dx_1 \int |\psi_a(x_2)|^2 dx_2 \\
&\quad \pm \int x_1^2 \psi_a(x_1)^* \psi_b(x_1) dx_1 \int \psi_b(x_2)^* \psi_a(x_2) dx_2 \\
&\quad \left. \pm \int x_1^2 \psi_b(x_1)^* \psi_a(x_1) dx_1 \int \psi_a(x_2)^* \psi_b(x_2) dx_2 \right] \\
&= \frac{1}{2} [\langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b \pm 0 \pm 0] = \frac{1}{2} (\langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b).
\end{aligned}$$

Tương tự,

$$\langle x_2^2 \rangle = \frac{1}{2} (\langle x^2 \rangle_b + \langle x^2 \rangle_a).$$

(Tự nhiên, $\langle x_2^2 \rangle = \langle x_1^2 \rangle$, vì bạn không thể phân biệt được.) Nhưng

$$\begin{aligned}
\langle x_1 x_2 \rangle &= \frac{1}{2} \left[\int x_1 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 \right. \\
&\quad + \int x_1 |\psi_b(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_a(x_2)|^2 dx_2 \\
&\quad \pm \int x_1 \psi_a(x_1)^* \psi_b(x_1) dx_1 \int x_2 \psi_b(x_2)^* \psi_a(x_2) dx_2 \\
&\quad \left. \pm \int x_1 \psi_b(x_1)^* \psi_a(x_1) dx_1 \int x_2 \psi_a(x_2)^* \psi_b(x_2) dx_2 \right] \\
&= \frac{1}{2} (\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b + \langle x \rangle_b \langle x \rangle_a \pm \langle x \rangle_{ab} \langle x \rangle_{ba} \pm \langle x \rangle_{ba} \langle x \rangle_{ab}) \\
&= \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b \pm |\langle x \rangle_{ab}|^2,
\end{aligned}$$

trong đó

$$\langle x \rangle_{ab} \equiv \int x \psi_a(x)^* \psi_b(x) dx. \quad [5.20]$$

Rõ ràng

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{\pm} = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b \mp 2|\langle x \rangle_{ab}|^2. \quad [5.21]$$

So sánh Pt 5.19 và 5.21, ta thấy rằng mọi sự khác nhau nằm ở số hạng cuối:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle_{\pm} = \langle (\Delta x)^2 \rangle_d \mp 2|\langle x \rangle_{ab}|^2. \quad [5.22]$$

Các boson đồng nhất (dấu bên trên) có vẻ gần nhau hơn, và các fermion đồng nhất (các dấu bên dưới) hơi xa nhau hơn, so với các hạt phân biệt được trong hai trạng thái đó. Lưu ý rằng

$\langle x \rangle_{ab}$ *triệt tiêu* trừ khi hai hàm sóng *phủ* nhau [nếu $\psi_a(x)$ bằng không khi $\psi_b(x)$ khác không, tích phân trong Pt 5.20 bằng không]. Nên nếu ψ_a biểu diễn một electron trong một nguyên tử ở Chicago, và ψ_b biểu diễn một electron trong một nguyên tử ở Seattle, thì sẽ không có sự khác biệt nào cả nếu bạn phản xứng hóa hàm sóng hay không. Do đó là một vấn đề *thực tế*, sẽ được nếu xem rằng những electron có các hàm sóng không phủ nhau là phân biệt được. (Thật vậy, đây là cái duy nhất cho phép các nhà vật lý và hóa học tiếp tục, vì về *nguyên tắc* mọi electron trong vũ trụ có liên kết với nhau, thông qua tính phản xứng của hàm sóng của chúng, và nếu điều này thực sự quan trọng, bạn sẽ không thể nói về một electron bất kỳ trừ khi bạn xét hết chúng!)

Trường hợp *thứ vị* là khi có sự phủ của các hàm sóng. Hệ xử sự như thể có một “lực hút” giữa các boson đồng nhất, kéo chúng lại gần nhau, và một “lực đẩy” giữa các fermion đồng nhất, đẩy chúng ra xa (nhớ rằng ta đang bỏ qua spin). Ta gọi nó là một **lực trao đổi**, mặc dù nó không phải là một lực – không có thực thể vật lý nào tác dụng lên các hạt; thay vào đó nó là một hệ quả thuần túy *hình học* của yêu cầu đối xứng hóa. Nó cũng là một hiện tượng thuần túy cơ học lượng tử, không có sự tương tự cổ điển. Tuy nhiên nó có những hệ quả sâu sắc. Chẳng hạn, xét phân tử hydro (H_2). Nói chung, trạng thái cơ bản gồm một electron trong trạng thái cơ bản của nguyên tử (Pt 4.80) tập trung quanh hạt nhân 1, và một electron trong trạng thái cơ bản của nguyên tử tập trung quanh hạt nhân 2. Nếu các electron là *boson*, yêu cầu đối xứng hóa (hay, nếu bạn thích, “lực trao đổi”) sẽ có xu hướng tập trung các electron vào giữa hai proton (Hình 5.1(a)), và sự tập trung điện tích âm sẽ hút các proton vào nhau, tạo ra **liên kết cộng hóa trị**.⁶ Không may, các electron *không phải* boson, chúng là fermion, và điều này nghĩa là sự tập trung điện tích âm sẽ thực sự chuyển ra hai bên (Hình 5.1(b)), kéo phân tử ra xa!

⁶ Một liên kết hóa học xuất hiện khi các electron dùng chung tập trung giữa các hạt nhân, kéo các nguyên tử lại. Nó không cần liên quan đến hai electron – trong mục 7.3 ta sẽ xét một liên kết cộng hóa trị chỉ với một electron.

Nhưng chờ đã! Ta đã bỏ qua *spin*. Trạng thái *đầy đủ* của electron không chỉ bao gồm hàm sóng vị trí của nó, mà còn có một spinor, mô tả định hướng spin của nó.⁷

$$\psi(\mathbf{r})\chi(\mathbf{s}). \quad [5.23]$$

Khi ta đưa ra trạng thái hai electron, toàn bộ hàm sóng, chứ không chỉ phần không gian, phải phản xứng so với phép hoán vị. Bây giờ, nhìn lại các trạng thái spin tích hợp (Pt 4.177 và 4.178) cho thấy rằng tổ hợp đơn tuyến là phản xứng (và do đó phải được kết hợp với một hàm sóng không gian *đối xứng*), còn ba trạng thái tam tuyến đều đối xứng (và cần một hàm sóng không gian *phản xứng*). Khi đó, rõ ràng, trạng thái đơn tuyến phải đưa tới *liên kết*, và tam tuyến đưa tới *phản liên kết*. Đủ chắc chắn, các nhà hóa học cho ta biết rằng liên kết hóa trị cần hai electron chiếm trạng thái đơn tuyến, có tổng spin bằng không.⁸

5.2 NGUYÊN TỬ

5.2.1 Heli

5.2.2 Bảng tuần hoàn

5.3 CHẤT RẮN

5.4 CƠ HỌC THỐNG KÊ LƯỢNG TỬ

5.4.1 Một ví dụ:

5.4.2 Trường hợp tổng quát

Xét một thể năng bất kỳ, trong đó các năng lượng một hạt là $E_1, E_2, E_3, \dots$, với độ suy biến $d_1, d_2, d_3, \dots$ (tức là có d_n trạng thái một hạt khác nhau có năng lượng E_n). Giả sử ta đặt N hạt (có cùng khối lượng) vào thể năng này; ta quan tâm đến cấu hình ($N_1, N_2, N_3, \dots$), sao cho có N_1 hạt có năng lượng E_1 , N_2 hạt có năng lượng E_2 , và cứ vậy. *Câu hỏi*: Điều này có thể đạt được bằng bao nhiêu cách (hay, chính xác hơn, bao nhiêu trạng thái khác biệt ứng với cấu hình cụ thể này)? Trả lời, $Q(N_1, N_2, N_3, \dots)$ phụ thuộc vào việc các hạt là phân biệt được, fermion đồng nhất, hay boson đồng nhất, nên ta sẽ xét riêng ba trường hợp này.

Đầu tiên, giả sử các hạt là *phân biệt được*. Có bao nhiêu cách để chọn (từ N ứng cử viên) N_1 hạt đặt trong « giỏ » thứ nhất?

Trả lời: **hệ số nhị thức**, « N chọn N_1 , »

$$\binom{N}{N_1} \equiv \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!} \quad [5.73]$$

Vì có N cách để lấy hạt thứ nhất, để lại $(N-1)$ cách cho hạt thứ hai và cứ vậy:

$$N(N-1)(N-2)\dots(N-N_1+1) = \frac{N!}{(N-N_1)!}$$

Tuy nhiên, cách này đếm một cách riêng lẻ $N_1!$ giao hoán khác nhau của N_1 hạt, ở đó ta không quan tâm liệu hạt số 37 được lấy lần đầu, hay lần thứ 29; nên ta chia cho $N_1!$, nhằm khẳng định Pt 5.73. Bây giờ N_1 hạt đó có thể được xếp vào giỏ đầu tiên theo bao nhiêu cách? Có d_1 trạng thái trong giỏ này, nên mỗi hạt có d_1 lựa chọn; rõ ràng có tổng cộng $(d_1)^{N_1}$ khả năng. Do đó số cách để đặt N_1 hạt, được chọn từ tổng cộng N hạt, vào một cái giỏ chứa d_1 khả năng khác nhau, bằng

$$\frac{N! d_1^{N_1}}{N_1!(N-N_1)!}$$

Dĩ nhiên điều này cũng đúng cho giỏ thứ hai, trừ việc bây giờ chỉ còn lại $(N-N_1)$ hạt để lấy:

$$\frac{(N-N_1)! d_2^{N_2}}{N_2!(N-N_1-N_2)!}$$

và cứ vậy. Theo đó

$$\begin{aligned} Q(N_1, N_2, N_3, \dots) &= \frac{N! d_1^{N_1}}{N_1!(N-N_1)!} \frac{(N-N_1)! d_2^{N_2}}{N_2!(N-N_1-N_2)!} \frac{(N-N_1-N_2)! d_3^{N_3}}{N_3!(N-N_1-N_2-N_3)!} \dots \\ &= \frac{N! d_1^{N_1} d_2^{N_2} d_3^{N_3} \dots}{N_1! N_2! N_3! \dots} = N! \prod_{n=1}^{\infty} \frac{d_n^{N_n}}{N_n!} \end{aligned} \quad [5.74]$$

(Bạn nên dừng lại ngay bây giờ và *kiểm tra* kết quả này, cho ví dụ trong mục 5.4.1- xem bài toán 5.24)

Vấn đề này dễ hơn nhiều đối với các *fermion đồng nhất*. Vì chúng không phân biệt được, hạt nào ở trong trạng thái nào không quan trọng – yêu cầu bất đối xứng nghĩa là chỉ có một trạng thái N hạt trong đó một tập hợp cụ thể các trạng thái một hạt bị chiếm. Hơn nữa, chỉ một hạt có thể chiếm bất cứ trạng thái nào. Có

$$\binom{d_n}{N_n}$$

cách để chọn N_n trạng thái chiếm đóng trong giỏ thứ n ,²³ nên

$$Q(N_1, N_2, N_3, \dots) = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{d_n!}{N_n!(d_n - N_n)!} \quad [5.75]$$

²³ Dĩ nhiên số hạng này phải bằng không nếu $N_n > d_n$, và nó là như vậy, nếu ta xem giai thừa của một số âm bằng vô cùng.

Tính toán này là khó nhất đối với trường hợp của các *boson đồng nhất*. Yêu cầu đối xứng nghĩa là chỉ có một trạng thái N hạt trong đó một tập hợp cụ thể các trạng thái một hạt bị chiếm, nhưng lần này không có giới hạn nào lên số hạt có thể có chung trạng thái một hạt. Đối với giỏ thứ n , câu hỏi trở thành : Ta có thể gán N_n hạt đồng nhất cho d_n ngăn khác nhau theo bao nhiêu cách khác nhau ? Có nhiều mẹo để giải quyết bài toán tổ hợp này ; một cách đặc biệt thông minh là như sau : các chấm biểu diễn các hạt và cách gạch chéo biểu diễn vách ngăn, để cho, chẳng hạn, nếu $d_n = 5$ và $N_n = 7$, thì

● ● × ● × ● ● ● × ● ×

chỉ ra rằng có hai hạt trong trạng thái thứ nhất, một hạt trong trạng thái thứ hai, ba hạt trong trạng thái thứ ba, một hạt trong trạng thái thứ tư, và không có hạt nào trong trạng thái thứ năm. Lưu ý rằng có N_n chấm, và $(d_n - 1)$ gạch chéo (chia các chấm thành d_n nhóm). Nếu các chấm và các gạch chéo riêng biệt được đánh dấu, sẽ có $(N_n + d_n - 1)!$ cách khác nhau để sắp xếp chúng. Nhưng đối với mục đích của chúng ta các chấm là tương đương – hoán vị chúng ($N_n!$ cách) không thay đổi trạng thái này. Tương tự, các gạch chéo là tương đương nhau – hoán vị chúng $((d_n - 1)!$ cách) không thay đổi gì cả. Nên thực ra có

$$\frac{(N_n + d_n - 1)!}{N_n!(d_n - 1)!} = \binom{N_n + d_n - 1}{N_n} \quad [5.76]$$

cách khác nhau để gán N_n hạt cho d_n trạng thái một hạt trong giỏ thứ n , và ta kết luận rằng

$$Q(N_1, N_2, N_3, \dots) = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{(N_n + d_n - 1)!}{N_n!(d_n - 1)!} \quad [5.77]$$

(Kiểm tra công thức này cho ví dụ trong mục 5.4.1 – xem bài toán 5.24.)

5.4.3 Cấu hình khả dĩ nhất

5.5

PHẦN II ỨNG DỤNG

CHƯƠNG 6

LÝ THUYẾT NHIỀU LOẠN ĐỘC LẬP THỜI GIAN

6.1 LÝ THUYẾT NHIỀU LOẠN KHÔNG SUY BIẾN

6.1.1 Công thức tổng quát

Giả sử ta đã giải được phương trình Schrödinger (độc lập thời gian) cho thể nào đó (chẳng hạn, giếng vuông vô hạn một chiều):

$$H^0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0, \quad [6.1]$$

thu được một tập đầy đủ các hàm riêng trực chuẩn, ψ_n^0 ,

$$\langle \psi_n^0 | \psi_m^0 \rangle = \delta_{nm}. \quad [6.2]$$

và các trị riêng E_n^0 tương ứng. Bây giờ ta làm nhiều thể một chút (chẳng hạn, đưa vào một đỉnh nhỏ ở đáy của giếng – hình 6.1). Ta muốn tìm các hàm riêng và trị riêng mới:

$$H \psi_n = E_n \psi_n, \quad [6.3]$$

nhưng trừ khi ta rất may mắn, ta sẽ không thể giải chính xác phương trình Schrödinger, cho thể phức tạp hơn này. **Lý thuyết nhiễu loạn** là một qui trình có hệ thống để thu được những nghiệm *gần đúng* cho bài toán nhiễu loạn, bằng cách dựa vào các nghiệm chính xác đã biết của trường hợp *không nhiễu*.

Để bắt đầu ta viết ra Hamiltonian mới là tổng của hai số hạng:

$$H = H^0 + \lambda H', \quad [6.4]$$

trong đó H' là nhiễu loạn (chỉ số trên 0 luôn xác định đại lượng không nhiễu). Hiện tại ta sẽ lấy λ là một số nhỏ; sau này ta sẽ cho nó bằng 1, và H là Hamiltonian thực sự. Kế đến ta viết ψ_n và E_n là chuỗi lũy thừa theo λ :

$$\psi_n = \psi_n^0 + \lambda \psi_n^1 + \lambda^2 \psi_n^2 + \dots; \quad [6.5]$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots. \quad [6.6]$$

Ở đây E_n^1 là **bổ chính bậc một** cho trị riêng thứ n , và ψ_n^1 là bổ chính bậc một cho hàm riêng thứ n ; E_n^2 và ψ_n^2 là các **bổ chính bậc hai**, và cứ vậy. Đưa Pt 6.5 và 6.6 vào Pt 6.3, ta có:

$$\begin{aligned} (H^0 + \lambda H')[\psi_n^0 + \lambda \psi_n^1 + \lambda^2 \psi_n^2 + \dots] \\ = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots)[\psi_n^0 + \lambda \psi_n^1 + \lambda^2 \psi_n^2 + \dots], \end{aligned}$$

hay (chọn các lũy thừa giống nhau của λ):

$$\begin{aligned} H^0 \psi_n^0 + \lambda(H^0 \psi_n^1 + H' \psi_n^0) + \lambda^2(H^0 \psi_n^2 + H' \psi_n^1) + \dots \\ = E_n^0 \psi_n^0 + \lambda(E_n^0 \psi_n^1 + E_n^1 \psi_n^0) + \lambda^2(E_n^0 \psi_n^2 + E_n^1 \psi_n^1 + E_n^2 \psi_n^0) + \dots. \end{aligned}$$

Ở cấp thấp nhất¹ (λ^0) nó cho $H^0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0$, vốn không có gì mới (Pt 6.1). Tới cấp một (λ^1),

$$H^0\psi_n^1 + H'\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^1 + E_n^1\psi_n^0. \quad [6.7]$$

¹ Như thông thường (Chương 2, chú thích 25) tính duy nhất của khai triển chuỗi lũy thừa đảm bảo rằng các hệ số của những lũy thừa giống nhau thì bằng nhau.

Tới cấp hai (λ^2),

$$H^0\psi_n^2 + H'\psi_n^1 = E_n^0\psi_n^2 + E_n^1\psi_n^1 + E_n^2\psi_n^0, \quad [6.8]$$

Và cứ vậy. (tôi đã dùng xong λ , bây giờ – nó chỉ là một công cụ để đánh dấu các bậc khác nhau – nên cho nó bằng 1.)

6.1.2 Lý thuyết bậc một

Lấy tích trong của Pt 6.7 với ψ_n^0 (tức là, nhân cho $(\psi_n^0)^*$ và lấy tích phân),

$$\langle \psi_n^0 | H^0 \psi_n^1 \rangle + \langle \psi_n^0 | H' \psi_n^0 \rangle = E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle + E_n^1 \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle.$$

Nhưng H^0 là hermit, nên

$$\langle \psi_n^0 | H^0 \psi_n^1 \rangle = \langle H^0 \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle = \langle E_n^0 \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle = E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle,$$

Và điều này triệt tiêu số hạng đầu tiên bên phải. Hơn nữa, $\langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = 1$, nên²

$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^0 \rangle.$$

[6.9]

² Trong trường hợp này không quan trọng nếu ta viết $\langle \psi_n^0 | H' \psi_n^0 \rangle$ hay $\langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^0 \rangle$ (có thêm một gạch đứng), vì ta đang dùng chính hàm sóng để “đánh dấu” trạng thái. Nhưng kí hiệu sau tiện hơn, vì ta không phải theo qui ước cụ thể này.

Đây là kết quả cơ bản của lý thuyết nhiễu loạn bậc một; trong *thực tế* nó có lẽ là phương trình quan trọng nhất trong cơ học lượng tử. Nó nói rằng bỏ chính bậc một cho năng lượng là *trị trung bình* của nhiễu loạn, trong trạng thái *không nhiễu*.

Ví dụ 6.1 Các hàm sóng không nhiễu cho giếng vuông vô cùng là (Pt 2.28)

$$\psi_n^0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right).$$

Giả sử ta làm nhiễu hệ bằng cách tăng “nền” của giếng một lượng không đổi V_0 (Hình 6.2). Tìm bỏ chính bậc một cho các năng lượng.

Lời giải: Trong trường hợp này $H' = V_0$, và bỏ chính bậc một cho năng lượng của trạng thái n bằng

$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | V_0 | \psi_n^0 \rangle = V_0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = V_0.$$

Khi đó, các mức năng lượng chỉnh sửa bằng $E_n \cong E_n^0 + V_0$; chúng chỉ được nâng lên lượng V_0 . *Dĩ nhiên!* Điều ngạc nhiên duy nhất là trong trường hợp này lý thuyết bậc một cho câu

trả lời *chính xác*. Rõ ràng với một nhiễu loạn *hằng số* mọi nhiễu loạn bậc cao hơn triệt tiêu.³ Mặt khác, nếu nhiễu loạn chỉ mở rộng nửa bề rộng giếng (Hình 6.3), thì

$$E_n^1 = \frac{2V_0}{a} \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = \frac{V_0}{2}.$$

Trong trường hợp này mỗi mức năng lượng được nâng lên $V_0/2$. Đó không phải là kết quả *chính xác*, nhưng nó có vẻ hợp lý, là một gần đúng bậc một.

³ Tiềm ẩn, ở đây không có gì phụ thuộc vào bản chất cụ thể của giếng vuông vô cùng – điều này đúng cho mọi thể, khi nhiễu loạn là hằng số.

Pt 6.9 là nhiễu loạn bậc một cho *năng lượng*; để tìm nhiễu loạn bậc một cho *hàm sóng*, đầu tiên ta viết lại Pt 6.7:

$$(H^0 - E_n^0)\psi_n^1 = -(H' - E_n^1)\psi_n^0. \quad [6.10]$$

Vế phải là một hàm đã biết, nên nó cho một phương trình vi phân không thuần nhất cho ψ_n^1 . Bây giờ các hàm sóng không nhiễu loạn tạo thành một tập đầy đủ, nên ψ_n^1 (như bất cứ hàm khác) có thể được biểu diễn là một tổ hợp tuyến tính của chúng:

$$\psi_n^1 = \sum_{m \neq n} c_m^{(n)} \psi_m^0. \quad [6.11]$$

Không cần thiết phải bao gồm $m = n$ trong tổng, vì nếu ψ_n^1 thỏa Pt 6.10, thì $(\psi_n^1 + \alpha\psi_n^0)$ cũng vậy, với mọi hằng số α , và ta có thể dùng sự tự do này để trừ số hạng ψ_n^0 .⁴ Nếu ta có thể xác định các hệ số $c_m^{(n)}$, ta đã làm xong việc.

Đặt Pt 6.11 vào Pt 6.10, và dùng việc ψ_n^0 thỏa phương trình Schrödinger không nhiễu loạn (Pt 6.1), ta có

$$\sum_{m \neq n} (E_m^0 - E_n^0) c_m^{(n)} \psi_m^0 = -(H' - E_n^1)\psi_n^0.$$

Lấy tích trong với ψ_l^0 ,

$$\sum_{m \neq n} (E_m^0 - E_n^0) c_m^{(n)} \langle \psi_l^0 | \psi_m^0 \rangle = -\langle \psi_l^0 | H' | \psi_n^0 \rangle + E_n^1 \langle \psi_l^0 | \psi_n^0 \rangle.$$

Nếu $l = n$, vế trái bằng không, và ta thu lại Pt 6.9; nếu $l \neq n$, ta có

$$(E_l^0 - E_n^0) c_l^{(n)} = -\langle \psi_l^0 | H' | \psi_n^0 \rangle,$$

hoặc

$$c_m^{(n)} = \frac{\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0}. \quad [6.12]$$

nên

$$\psi_n^1 = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle}{(E_n^0 - E_m^0)} \psi_m^0. \quad [6.13]$$

Lưu ý rằng mẫu số an toàn (vì không có hệ số với $m = n$) *chứng nào phổ năng lượng không nhiều là không suy biến*. Nhưng nếu hai trạng thái không nhiều khác nhau có chung năng lượng, ta sẽ gặp vấn đề rắc rối (ta chia cho không để có Pt 6.12); trong trường hợp đó ta cần **lý thuyết nhiễu loạn suy biến**, mà tôi sẽ nói tới trong Mục 6.2.

Đó hoàn tất lý thuyết nhiễu loạn bậc một: Bỏ chính bậc một cho năng lượng, E_n^1 , được cho bởi Pt 6.9, và bỏ chính bậc một cho hàm sóng, ψ_n^1 , được cho bởi Pt 6.13. Tôi phải cảnh báo bạn rằng trong khi lý thuyết nhiễu loạn thường mang lại năng lượng chính xác đến ngạc nhiên (tức là, $E_n^0 + E_n^1$ khá gần với giá trị chính xác E_n), các hàm sóng khá tệ.

6.1.3 Năng lượng bậc hai

Như trước đây, ta lấy tích trong của phương trình **bậc hai** (Pt 6.8) với ψ_n^0 :

$$\langle \psi_n^0 | H^0 \psi_n^2 \rangle + \langle \psi_n^0 | H' \psi_n^1 \rangle = E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^2 \rangle + E_n^1 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle + E_n^2 \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle.$$

Lại nữa, ta dùng tính hermit của H^0 :

$$\langle \psi_n^0 | H^0 \psi_n^2 \rangle = \langle H^0 \psi_n^0 | \psi_n^2 \rangle = E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^2 \rangle,$$

nên số hạng đầu tiên ở vế trái triệt tiêu với số hạng đầu tiên ở vế phải. Trong khi đó $\langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = 1$, và ta chỉ còn lại một biểu thức cho E_n^2 :

$$E_n^2 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^1 \rangle - E_n^1 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle. \quad [6.14]$$

Nhưng

$$\langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle = \sum_{m \neq n} c_m^{(n)} \langle \psi_n^0 | \psi_m^0 \rangle = 0,$$

(vì tổng này loại bỏ $m = n$, và mọi cái khác trực giao), nên

$$E_n^2 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^1 \rangle = \sum_{m \neq n} c_m^{(n)} \langle \psi_n^0 | H' | \psi_m^0 \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle \langle \psi_n^0 | H' | \psi_m^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0},$$

hay, cuối cùng,

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}. \quad [6.15]$$

Đây là kết quả cơ bản của lý thuyết nhiễu loạn cấp hai.

Ta có thể tiếp tục tính bổ chính bậc hai cho hàm sóng (ψ_n^2), bổ chính bậc ba cho năng lượng, và cứ vậy, nhưng trên thực tế Pt 6.15 thường là hữu dụng để dùng phương pháp này.⁵

6.2 LÝ THUYẾT NHIỀU LOẠN SUY BIẾN

Nếu các trạng thái không nhiễu loạn là suy biến – tức là, nếu hai (hay nhiều hơn) trạng thái phân biệt (ψ_a^0 và ψ_b^0) có cùng năng lượng – thì lý thuyết nhiễu loạn thông thường thất bại:

$c_a^{(b)}$ (Pt 6.12) và E_a^2 (Pt 6.15) phân kỳ (trừ khi, có lẽ, tử số triệt tiêu, $\langle \psi_a^0 | H' | \psi_b^0 \rangle = 0$ - một lối thoát sẽ quan trọng với ta sau này). Do đó trong trường hợp suy biến, không có lý do để tin tưởng ngay cả bổ chính bậc một cho năng lượng (Pt 6.9), và ta phải tìm cách khác để xét vấn đề này.

6.2.1 Suy biến bội hai

Giả sử rằng

$$H^0 \psi_a^0 = E^0 \psi_a^0, \quad H^0 \psi_b^0 = E^0 \psi_b^0, \quad \langle \psi_a^0 | \psi_b^0 \rangle = 0, \quad [6.16]$$

có ψ_a^0 và ψ_b^0 đều chuẩn hóa. Lưu ý rằng mọi tổ hợp tuyến tính của những trạng thái này,

$$\psi^0 = \alpha \psi_a^0 + \beta \psi_b^0, \quad [6.17]$$

vẫn là một trạng thái riêng của H^0 , có cùng trị riêng E^0 :

$$H^0 \psi^0 = E^0 \psi^0. \quad [6.18]$$

Thông thường, nhiễu loạn (H') sẽ “phá vỡ” (hoặc “loại bỏ”) tính suy biến: Khi ta tăng λ (từ 0 tới 1), năng lượng không nhiễu loạn E^0 tách làm hai (Hình 6.4). Đi theo hướng khác, khi ta tắt nhiễu loạn, trạng thái “trên” qui giản thành một tổ hợp tuyến tính của ψ_a^0 và ψ_b^0 , và trạng thái “dưới” qui giản thành tổ hợp tuyến tính *trực giao* nào đó, nhưng ta không biết trước hai tổ hợp tuyến tính “tốt” sẽ như thế nào. Vì lý do này ta thậm chí không thể tính năng lượng bậc một (Pt 6.9) – ta không biết dùng những trạng thái không nhiễu loạn nào.

Do đó, hiện tại, hãy chỉ viết các trạng thái không nhiễu loạn “tốt” dưới dạng tổng quát (Pt 6.17), giữ α và β thay đổi được. Ta muốn giải phương trình Schrödinger,

$$H \psi = E \psi, \quad [6.19]$$

có $H = H_0 + \lambda H'$ và

$$E = E^0 + \lambda E^1 + \lambda^2 E^2 + \dots, \quad \psi = \psi^0 + \lambda \psi^1 + \lambda^2 \psi^2 + \dots. \quad [6.20]$$

Đưa chúng vào Pt 6.19, và tập hợp những lũy thừa giống nhau của λ (như trước đây) ta tìm được

$$H^0 \psi^0 + \lambda (H' \psi^0 + H^0 \psi^1) + \dots = E^0 \psi^0 + \lambda (E^1 \psi^0 + E^0 \psi^1) + \dots.$$

Nhưng $H^0 \psi^0 = E^0 \psi^0$ (Pt 6.18), nên các số hạng đầu triệt tiêu; ở cấp λ^1 ta có

$$H^0 \psi^1 + H' \psi^0 = E^0 \psi^1 + E^1 \psi^0. \quad [6.21]$$

Lấy tích trong với ψ_a^0 :

$$\langle \psi_a^0 | H^0 \psi^1 \rangle + \langle \psi_a^0 | H' \psi^0 \rangle = E^0 \langle \psi_a^0 | \psi^1 \rangle + E^1 \langle \psi_a^0 | \psi^0 \rangle.$$

Vì H^0 hermit, số hạng đầu tiên ở vế trái triệt tiêu số hạng đầu tiên ở vế phải. Đưa vào Pt 6.17 và dùng điều kiện trực chuẩn (Pt 6.16), ta thu được

$$\alpha \langle \psi_a^0 | H' | \psi_a^0 \rangle + \beta \langle \psi_a^0 | H' | \psi_b^0 \rangle = \alpha E^1,$$

hay, gọn hơn,

$$\alpha W_{aa} + \beta W_{ab} = \alpha E^1, \quad [6.22]$$

trong đó

$$W_{ij} \equiv \langle \psi_i^0 | H' | \psi_j^0 \rangle, \quad (i, j = a, b). \quad [6.23]$$

Tương tự, tích trong với ψ_b^0 cho

$$\alpha W_{ba} + \beta W_{bb} = \beta E^1. \quad [6.24]$$

Lưu ý rằng các W (về nguyên tắc) *đã biết* – chúng chính là các “phần tử ma trận” của H' , theo các hàm sóng không nhiễu ψ_a^0 và ψ_b^0 . Nhân Pt 6.24 cho W_{ab} , và dùng Pt 6.22 để triệt tiêu βW_{ab} , ta tìm được:

$$\alpha [W_{ab} W_{ba} - (E^1 - W_{aa})(E^1 - W_{bb})] = 0. \quad [6.25]$$

Nếu α không bằng không, Pt 6.25 cho một phương trình cho E^1 :

$$(E^1)^2 - E^1(W_{aa} + W_{bb}) + (W_{aa} W_{bb} - W_{ab} W_{ba}) = 0. \quad [6.26]$$

Dùng công thức bình phương, và lưu ý (từ Pt 6.23) rằng $W_{ba} = W_{ab}^*$, ta kết luận rằng

$$E_{\pm}^1 = \frac{1}{2} \left[W_{aa} + W_{bb} \pm \sqrt{(W_{aa} - W_{bb})^2 + 4|W_{ab}|^2} \right]. \quad [6.27]$$

Đây là kết quả cơ bản của lý thuyết nhiễu loạn suy biến: hai nghiệm ứng với hai năng lượng nhiễu loạn.

Nhưng điều gì xảy ra nếu α bằng không? Trong trường hợp đó $\beta = 1$, Pt 6.22 cho $W_{ab} = 0$, và Pt 6.24 cho $E^1 = W_{bb}$. Điều này thực ra đã có trong kết quả tổng quát (Pt 6.27), có dấu trừ (dấu cộng ứng với $\alpha = 1, \beta = 0$). Còn gì nữa, các kết quả,

$$E_+^1 = W_{aa} = \langle \psi_a^0 | H' | \psi_a^0 \rangle, \quad E_-^1 = W_{bb} = \langle \psi_b^0 | H' | \psi_b^0 \rangle.$$

Chính là cái ta đã thu được khi dùng lý thuyết nhiễu loạn *không* suy biến (Pt 6.9). Ta rất *may mắn*: các trạng thái ψ_a^0 và ψ_b^0 *đã* là những tổ hợp tuyến tính “tốt”. Dĩ nhiên, sẽ tuyệt vời nếu ta có thể *đoán* những trạng thái “tốt” từ đầu – khi đó ta có thể tiếp tục dùng lý thuyết nhiễu loạn *không* suy biến. Thật vậy, thông thường ta có thể làm điều này bằng cách dùng định lý sau:

Định lý: Cho A là một toán tử hermit giao hoán với H^0 và H' . Nếu ψ_a^0 và ψ_b^0 (các hàm riêng suy biến của H^0) cũng là các hàm riêng của A , với những trị riêng khác nhau,

$$A\psi_a^0 = \mu\psi_a^0, \quad A\psi_b^0 = \nu\psi_b^0, \quad \text{and } \mu \neq \nu.$$

thì $W_{ab} = 0$ (và do đó ψ_a^0 và ψ_b^0 là những trạng thái “tốt” dùng trong lý thuyết nhiễu loạn).

Chứng minh: Do giả thiết, $[A, H'] = 0$, nên

$$\begin{aligned} \langle \psi_a^0 | [A, H'] | \psi_b^0 \rangle &= 0 \\ &= \langle \psi_a^0 | AH' | \psi_b^0 \rangle - \langle \psi_a^0 | H'A | \psi_b^0 \rangle \\ &= \langle A\psi_a^0 | H' | \psi_b^0 \rangle - \langle \psi_a^0 | H' | \nu\psi_b^0 \rangle \\ &= (\mu - \nu) \langle \psi_a^0 | H' | \psi_b^0 \rangle = (\mu - \nu)W_{ab}. \end{aligned}$$

Nhưng $\mu \neq \nu$, nên $W_{ab} = 0$. ĐPCM

Bài học: Nếu ta đối mặt với những trạng thái suy biến, hãy tìm toán tử hermit A nào đó giao hoán với H^0 và H' ; lấy những trạng thái không suy biến mà đồng thời là những hàm riêng của H^0 và A . Sau đó dùng lý thuyết nhiễu loạn bậc một *thông thường*. Nếu bạn không thể kiểm ra một toán tử như vậy, bạn sẽ phải dùng Pt 6.27, nhưng trong thực tế, điều này hiếm khi cần thiết.

6.2.2 Suy biến bậc cao hơn

Trong mục trước tôi đã giả sử suy biến bội hai, nhưng dễ thấy phương pháp này tổng quát hóa ra sao. Viết lại Pt 6.22 và 6.24 dưới dạng ma trận:

$$\begin{pmatrix} W_{aa} & W_{ab} \\ W_{ba} & W_{bb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E^1 \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}. \quad [6.28]$$

Rõ ràng các E^1 chính là các *trị riêng* của ma trận W ; Pt .26 là phương trình đặc trưng cho ma trận này, và các tổ hợp tuyến tính “tốt” của các trạng thái không nhiễu là các vectơ riêng của W .

Trong trường hợp suy biến bội n , ta tìm các trị riêng của ma trận $n \times n$

$$W_{ij} = \langle \psi_i^0 | H' | \psi_j^0 \rangle. \quad [6.29]$$

Theo cách nói của đại số tuyến tính, tìm các hàm sóng không nhiễu loạn “tốt” liên quan đến thiết lập một cơ sở trong không gian con suy biến mà *chéo hóa* ma trận W . Một lần nữa, nếu bạn có thể nghĩ đến một toán tử A *giao hoán* với H' , và dùng các hàm sóng đồng thời của A và H^0 , thì ma trận W sẽ *tự động* chéo hóa, và bạn sẽ không phải giải phương trình đặc trưng.⁶ (Nếu bạn lo lắng về sự tổng quát hóa tự nhiên của tôi từ tính suy biến bội hai cho suy biến bội n , hãy làm bài tập 6.10.)

⁶ Lý thuyết nhiễu loạn suy biến liên quan đến chéo hóa phần suy biến của Hamiltonian. Sự chéo hóa của các ma trận (và đồng thời tính chéo hóa của các ma trận giao hoán) được bàn tới trong phụ lục (mục A.5).

Ví dụ 6.2 Xét giếng chữ nhật vô hạn ba chiều (bài toán 4.2):

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \text{if } 0 < x < a, 0 < y < a, \text{ and } 0 < z < a; \\ \infty & \text{otherwise.} \end{cases} \quad [6.30]$$

Các trạng thái dừng là

$$\psi_{n_x n_y n_z}^0(x, y, z) = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{a} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{a} z\right), \quad [6.31]$$

trong đó n_x, n_y, n_z là những số nguyên dương. Các năng lượng được phép tương ứng là

$$E_{n_x n_y n_z}^0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2). \quad [6.32]$$

Lưu ý rằng trạng thái cơ bản (ψ_{111}) là không suy biến; năng lượng của nó là

$$E_0^0 \equiv 3 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad [6.33]$$

Nhưng trạng thái kích thích thứ nhất thì suy biến (bậc ba):

$$\psi_a \equiv \psi_{112}, \quad \psi_b \equiv \psi_{121}, \quad \text{and} \quad \psi_c \equiv \psi_{211}, \quad [6.34]$$

tất cả có chung năng lượng

$$E_1^0 \equiv 3 \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2}. \quad [6.35]$$

Bây giờ đưa ra nhiễu loạn

$$H' = \begin{cases} V_0, & \text{if } 0 < x < a/2 \text{ and } 0 < y < a/2; \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad [6.36]$$

Nó làm tăng thế lên một lượng V_0 trong một phần tư của hộp (xem hình 6.5). Bỏ chính bậc một cho năng lượng trạng thái cơ bản được cho bởi Pt 6.9:

$$\begin{aligned} E_0^1 &= \langle \psi_{111} | H' | \psi_{111} \rangle \\ &= \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a} x\right) dx \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a} y\right) dy \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi}{a} z\right) dz \\ &= \frac{1}{4} V_0, \end{aligned} \quad [6.37]$$

là cái ta đang trông chờ.

Đối với trạng thái kích thích thứ nhất ta cần công cụ đầy đủ của lý thuyết nhiễu loạn suy biến. Bước đầu tiên là xây dựng ma trận $\mathbf{W}$. Các phần tử chéo giống như với trạng thái cơ bản (trừ việc đổi số của một trong các hàm sin nhân đôi); bạn có thể tự kiểm tra rằng

$$W_{aa} = W_{bb} = W_{cc} = \frac{1}{4} V_0.$$

Các số hạng ngoài đường chéo thú vị hơn nhiều:

$$W_{ab} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx \\ \times \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) dy \int_0^a \sin\left(\frac{2\pi}{a}z\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz.$$

Nhưng tích phân theo z bằng không (nó cũng sẽ như vậy cho W_{ac}), nên

$$W_{ab} = W_{ac} = 0.$$

Cuối cùng,

$$W_{bc} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) dx \\ \times \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) dy \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz = \frac{16}{9\pi^2} V_0.$$

Do đó

$$\mathbf{W} = \frac{V_0}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \kappa \\ 0 & \kappa & 1 \end{pmatrix} \quad [6.38]$$

trong đó $\kappa \equiv (8/3\pi)^2 \approx 0.7205$.

Phương trình đặc trưng cho $\mathbf{W}$ (hay thay vì vậy, cho $4\mathbf{W}/V_0$, dễ tính hơn) là

$$(1 - w)^3 - \kappa^2(1 - w) = 0,$$

và các trị riêng là

$$w_1 = 1; \quad w_2 = 1 + \kappa \approx 1.705; \quad w_3 = 1 - \kappa \approx 0.2795.$$

Tới bậc một theo λ , khi đó,

$$E_1(\lambda) = \begin{cases} E_1^0 + \lambda V_0/4, \\ E_1^0 + \lambda(1 + \kappa)V_0/4, \\ E_1^0 + \lambda(1 - \kappa)V_0/4. \end{cases} \quad [6.39]$$

trong đó E_1^0 là năng lượng không nhiễu (thông thường) (Pt 6.35). Nhiều loạn loại bỏ suy biến, tách E_1^0 thành ba mức năng lượng khác nhau (xem Hình 6.6). Lưu ý rằng nếu ta áp dụng lý thuyết nhiễu loạn không suy biến một cách ngây thơ cho bài toán này, ta sẽ kết luận rằng bổ chính bậc một (Pt 6.9) như nhau cho cả ba trạng thái, và bằng $V_0/4$ - điều này thực ra chỉ đúng cho trạng thái ở giữa.

Trong khi đó, các trạng thái không nhiễu “tốt” là tổ hợp tuyến tính có dạng

$$\psi^0 = \alpha\psi_a + \beta\psi_b + \gamma\psi_c, \quad [6.40]$$

trong đó các hệ số (α , β , và γ) tạo thành các vectơ riêng của ma trận $\mathbf{W}$:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \kappa \\ 0 & \kappa & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = w \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}.$$

Với $w = 1$ ta thu được $\alpha = 1, \beta = \gamma = 0$; với $w = 1 \pm \kappa$ ta thu được $\alpha = 0, \beta = \pm \gamma = 1/\sqrt{2}$. (Tôi đã chuẩn hóa chúng trong lúc tính.) Do đó các trạng thái “tốt” là⁷

$$\psi^0 = \begin{cases} \psi_a, \\ (\psi_b + \psi_c)/\sqrt{2}, \\ (\psi_b - \psi_c)/\sqrt{2}. \end{cases} \quad [6.41]$$

6.3 CẤU TRÚC TINH TẾ CỦA HYDRO

6.4 HIỆU ỨNG ZEEMAN

6.5 SỰ TÁCH MỨC SIÊU TINH TẾ