

ĐINH PHAN KHÔI

**BÀI GIẢNG**  
**CƠ HỌC LƯỢNG TỬ**  
(DÙNG CHO CAO HỌC)

NĂM 2009

## LỜI NÓI ĐẦU

Tập **Bài giảng Cơ học lượng tử** này được biên soạn nhằm phục vụ cho việc giảng dạy và học tập chuyên đề Cơ học lượng tử I thuộc chương trình cao học chuyên ngành Quang học và chuyên ngành Lí luận và phương pháp dạy học Vật lí.

Các vấn đề trong tập bài giảng đã được chọn lọc để giảng dạy trong những năm gần đây cho học viên cao học ở Trường Đại học Vinh, Trường Đại học Đồng Tháp, Trường Đại học Sài Gòn và Trường dự bị đại học Sầm Sơn.

Khi biên soạn, chúng tôi đã tham khảo từ các sách lí thuyết và bài tập của các tác giả trong và ngoài nước cũng như từ một vài luận văn cao học do tác giả hướng dẫn.

Tác giả xin chân thành cảm ơn các thầy cô giáo, các đồng nghiệp và các học viên cao học đã đóng góp nhiều ý kiến quý báu cho tập bài giảng.

Lần đầu biên soạn, tập bài giảng này khó tránh khỏi hạn chế. Tác giả mong tiếp tục nhận được những ý kiến đóng góp của độc giả để tập bài giảng được hoàn thiện.

*Vinh, ngày 31 tháng 12 năm 2009*

TÁC GIẢ

## Chương I: Mở đầu

### 1.1. Cơ học lượng tử là gì?

Cơ học lượng tử là lí thuyết về các hiện tượng và quá trình vật lí trong thế giới vi mô.

Thế giới vi mô là thế giới của các hạt và hệ hạt có kích thước bé hơn hoặc bằng  $10^{-10}$  m.

Khi đi vào thế giới vi mô, các quy luật vật lí cổ điển phải được thay thế bằng các quy luật lượng tử. Các quy luật lượng tử tổng quát hơn và bao các quy luật cổ điển như các trường hợp riêng.

Nhà vật lí Sidney Coleman từng nói rằng: nếu một ngàn nhà triết học bỏ ra một ngàn năm để tìm kiếm những điều kỳ lạ nhất có thể thì họ cũng không bao giờ tìm thấy thứ gì kỳ lạ như Cơ học lượng tử. Cơ học lượng tử khó hiểu vì các hệ quả của nó quá khác thường và gây ngạc nhiên. Những nguyên lý cơ bản của nó đối lập với những ý tưởng làm nền tảng cho tất cả vật lí học đã biết trước đó và ngược với kinh nghiệm của chúng ta. Muốn hiểu được vật lí hiện đại, cần phải thay đổi những quan niệm cũ, phải hiểu thế giới vi mô đúng như thực tế khách quan, dù nó có khác với cách suy nghĩ thông thường của chúng ta.

### 1.2. Vật lí học cổ điển

Vật lí học cổ điển là vật lí học không kể đến thuyết lượng tử và thuyết tương đối.

Hai cơ sở của vật lí học cổ điển là cơ học Newton và lí thuyết điện từ Maxwell.

Các định luật Newton là cơ sở của toàn bộ cơ học. Nếu thêm vào phương pháp thống kê thì đó còn là cơ sở của nhiệt học.

Hệ phương trình Maxwell về điện từ trường biểu diễn lí thuyết tổng quát cho tất cả các hiện tượng điện từ và quang học.

### **1.3. Những quan niệm cơ sở của Vật lí học cổ điển**

Vật lí học cổ điển được xây dựng dựa trên 3 quan niệm cơ sở:

- 1) Sự biến đổi liên tục của các đại lượng vật lí;*
- 2) Nguyên lí quyết định luận cổ điển;*
- 3) Phương pháp phân tích tách nhỏ để nghiên cứu các đối tượng vật lí.*

### **1.4. Hai ý tưởng cơ bản của Cơ học lượng tử**

Cơ học lượng tử được xây dựng dựa trên 2 ý tưởng cơ bản:

- 1) Ý tưởng lượng tử hoá (còn gọi là tính gián đoạn hay tính nguyên tử):*

Một số đại lượng vật lí liên quan đến việc mô tả các đối tượng vi mô trong những điều kiện nhất định có thể chỉ nhận các giá trị rời rạc xác định. Ta nói chúng bị lượng tử hoá.

Năng lượng của vi hạt ở trạng thái liên kết (ví dụ electron trong nguyên tử) bị lượng tử hoá. Nếu electron chuyển động tự do thì năng lượng không bị lượng tử hoá.

Ý tưởng lượng tử hoá được Planck nêu lên lần đầu tiên vào năm 1900 khi nghiên cứu bức xạ của vật đen tuyệt đối. Năm 1913, Bohr áp dụng ý tưởng lượng tử hoá năng lượng để xét cấu tạo quang phổ vạch của nguyên tử hiđrô cho mẫu hành tinh nguyên tử Rutheford nhằm xây dựng lí thuyết lượng tử cũ (bán cổ điển).

2) *Ý tưởng lưỡng tính sóng hạt:*

Năm 1905, ý tưởng này được Einstein áp dụng cho bức xạ điện từ để nghiên cứu hiện tượng quang điện. Năm 1924, De Broglie mở rộng cho mọi đối tượng vi mô.

### 1.5. Những mốc thời gian đáng ghi nhớ

| <i>Năm</i> | <i>Tác giả</i>     | <i>Hiện tượng vật lí</i>                  |
|------------|--------------------|---|
| 1901       | Planck             | Bức xạ của vật đen                        |
| 1905       | Einstein           | Hiện tượng quang điện                     |
| 1913       | Bohr               | Lí thuyết lượng tử về phổ                 |
| 1922       | Compton            | Tán xạ của photon trên electron           |
| 1924       | Pauli              | Nguyên lí loại trừ                        |
| 1925       | De Broglie         | Sóng vật chất                             |
| 1926       | Schrodinger        | Phương trình sóng                         |
| 1927       | Heisenberg         | Nguyên lí bất định                        |
|            | Davisson và Germer | Thí nghiệm về tính chất sóng của electron |
|            | Born               | Giải thích ý nghĩa vật lí của hàm sóng    |

## 1.6. Cách mô tả các hiện tượng

1) **Vật lí học cổ điển** giả thiết sự độc lập của các quá trình vật lí với các điều kiện quan sát, coi tác động của quan sát không làm nhiễu loạn đáng kể đến trạng thái của hệ.

Vật lí học cổ điển cho ta khả năng mô tả tuyệt đối, cặn kẽ trạng thái chuyển động của hệ vật lí.

2) **Theo Cơ học lượng tử**, khi mô tả lượng tử các hiện tượng, cần phải tính đến khả năng hiện thực của phép đo gắn liền với các tính chất của đối tượng vi mô, đồng thời phải tính tới nhiễu loạn của phép đo đối với trạng thái của nó.

Sự khác nhau về mặt định tính của các định luật và hiện tượng vi mô so với vĩ mô được biểu thị một cách toán học ở chỗ ta dùng các toán tử (chứ không phải các con số!) để mô tả các biến số động lực. Các toán tử không tuân theo quy luật giao hoán của phép nhân các số.

### 3) Tính thống kê của Cơ học lượng tử

Trong các điều kiện bên ngoài cho trước, kết quả của sự tương tác giữa đối tượng vi mô với dụng cụ đo, tức là kết quả của phép đo, nói chung không thể tiên đoán một cách đơn trị được, mà chỉ với một xác suất nào đó. Tập hợp các kết quả như vậy đưa đến thống kê tương ứng với phân bố nhất định của xác suất. Do đó, phải đưa yếu tố xác suất vào cách mô tả đối tượng vi mô và trạng thái, dáng điệu của chúng.

Chú ý rằng trong Vật lí học cổ điển, xác suất được đưa vào chỉ khi điều kiện của bài toán không được biết đầy đủ và khi phải lấy trung bình theo tham số chưa biết, song ở đó ta đã giả thiết rằng về nguyên tắc thì sự trung bình hoá là không cần thiết và luôn có thể chính xác hoá các điều kiện để khẳng định là một trong số các kết

quả khả dĩ được xảy ra hoàn toàn, còn các kết quả khác sẽ không xảy ra. Nguyên tắc quyết định luận Laplace đã loại yếu tố ngẫu nhiên khi mô tả đáng điệu của từng đối tượng riêng biệt.

Trong Cơ học lượng tử, yếu tố ngẫu nhiên có mặt trong đáng điệu của từng đối tượng vi hạt riêng biệt. Cơ học lượng tử là một lí thuyết thống kê về mặt nguyên tắc và xác suất là một trong những đặc điểm của nó.

### 1.7. Giả thuyết De Broglie

Một hạt tự do có năng lượng  $\varepsilon$  và xung lượng  $\vec{p}$  tương ứng với một sóng phẳng có tần số góc  $\omega$  và véctơ sóng  $\vec{k}$ , thoả mãn hệ thức

$$\varepsilon = \hbar\omega; \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}. \quad (1)$$

Theo giả thuyết De Broglie thì các hạt vi mô có tính chất sóng.

### 1.8. Giả thuyết về photon

Một chùm ánh sáng có tần số góc  $\omega$  và véctơ sóng  $\vec{k}$  có thể coi như một dòng photon, mỗi photon có năng lượng  $\varepsilon$  và xung lượng  $\vec{p}$ , thoả mãn hệ thức

$$\varepsilon = \hbar\omega; \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}.$$

Theo giả thuyết về photon thì bức xạ điện từ (sóng) có tính chất như những dòng hạt.

Kết hợp giả thuyết De Broglie và giả thuyết về photon, ta suy ra rằng ánh sáng cũng như các hạt vi mô vừa có tính chất sóng lại vừa có tính chất hạt. Ta nói chúng có lưỡng tính sóng hạt.

Theo quan niệm của Vật lí học cổ điển thì điều này không thể hiểu được vì nó trái với nhận xét thông thường trên các vật vĩ mô xung quanh ta. Muốn hiểu được vật lí hiện đại, cần phải thay đổi những quan niệm cũ, phải hiểu thế giới vi mô đúng như thực tế khách quan, dù nó có khác với cách suy nghĩ thông thường của chúng ta.

## 1.9. Hàm sóng của hạt vật chất

### a) Biểu diễn trạng thái của hạt bằng hàm sóng

Xét hạt tự do có khối lượng nghỉ  $m$  tương ứng với sóng phẳng De Broglie có tần số góc  $\omega$  và vectơ sóng  $\vec{k}$

$$\omega = \frac{E}{\hbar}; \quad \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}. \quad (2)$$

Ta đã biết rằng sóng phẳng có tần số góc  $\omega$  và vectơ sóng  $\vec{k}$  có thể được biểu diễn bởi hàm phức  $\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 \exp[-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})]$ .

Do đó, trạng thái của hạt tự do mà ta xét có thể được biểu diễn bởi hàm  $\psi(\vec{r}, t)$  gọi là hàm sóng của hạt

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})\right] = \varphi(\vec{r})f(t). \quad (3)$$

Ta suy rộng cách biểu diễn trạng thái của hạt tự do bằng hàm sóng và thừa nhận rằng trạng thái bất kì của một hạt vi mô vào thời điểm  $t$  có thể biểu diễn bởi hàm sóng  $\psi(\vec{r}, t)$ . Các thông tin về trạng thái của hạt chứa đựng trong hàm sóng. Hàm sóng nói chung là một số phức.

### b) Ý nghĩa vật lí của hàm sóng

Theo Born, bình phương môđun của hàm sóng tỉ lệ với mật độ xác suất tìm thấy hạt



$$\rho(\vec{r}, t) \propto |\psi(\vec{r}, t)|^2. \quad (4)$$

Cách giả thích này được thừa nhận vì không chứa mâu thuẫn về logic và dẫn tới các kết quả phù hợp với thực nghiệm.

### c) Chuẩn hoá hàm sóng

Hàm sóng  $\psi(\vec{r}, t)$  được xác định sai khác một hằng số  $\psi_0$

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 \exp[-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})].$$

Bình phương môđun của hàm sóng tỉ lệ với mật độ xác suất tìm thấy hạt

$$\rho(\vec{r}, t) \propto |\psi(\vec{r}, t)|^2.$$

$\rho(\vec{r}, t)$  là một đại lượng vật lí có ý nghĩa xác định. Với một giá trị của  $\psi_0$ , ta có một hệ số tỉ lệ  $A$ :

$$\rho(\vec{r}, t) = A |\psi(\vec{r}, t)|^2.$$

Để đơn giản, có thể chọn  $\psi_0$  để  $A=1$ .

Khi đó,  $\psi_0$  thoả mãn điều kiện chuẩn hoá

$$\int \rho dV = \int |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1. \quad (5)$$

Ý nghĩa vật lí của điều kiện chuẩn hoá: Xác suất tìm thấy hạt trong toàn bộ miền không gian mà hạt có thể tồn tại bằng 1 (tức 100%).

## Chương II: Các tiên đề của Cơ học lượng tử. Toán tử, hàm riêng và trị riêng

### 2.1. Các đại lượng quan sát được và các toán tử

#### a) Tiên đề 1

*Nội dung:* Mỗi đại lượng quan sát được hay biến số động lực  $A$  trong Cơ học lượng tử tương ứng với một toán tử  $\hat{A}$  sao cho phép đo  $A$  thu được các giá trị đo được  $a$  là các trị riêng của  $\hat{A}$ , nghĩa là các giá trị  $a$  là những giá trị mà phương trình trị riêng  $\hat{A}\varphi = a\varphi$  có nghiệm  $\varphi$ . Ta nói  $\varphi$  là hàm riêng của toán tử  $\hat{A}$  tương ứng với trị riêng  $a$ .

#### b) Toán tử xung lượng

Ta hãy tìm hàm riêng và trị riêng của toán tử xung lượng  $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ .

Xét hạt chuyển động một chiều trên trục  $x$ . Khi đó ta có  $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$  và phương trình trị riêng của toán tử xung lượng là

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi = p_x\varphi, \quad (1)$$

trong đó  $p_x$  là các giá trị khả dĩ mà ta sẽ thu được khi đo thành phần trên trục  $x$  của xung lượng; hàm sóng  $\varphi(x)$  tương ứng với một giá trị xác định của xung lượng ( $p_x$ ) là hàm mà  $|\varphi(x)|^2 dx$  là xác suất tìm thấy hạt (với xung lượng  $p_x$ ) trong khoảng  $[x, x+dx]$ .

Giả sử hạt tự do (không có điều kiện biên). Khi đó ta có nghiệm

$$\varphi(x) = A \exp\left(\frac{ip_x x}{\hbar}\right) = A e^{ikx}, \text{ trong đó số sóng } k = \frac{p}{\hbar}. \text{ Như vậy } \varphi(x) \text{ là}$$

hàm tuần hoàn theo  $x$ .

Ta hãy tìm bước sóng  $\lambda$ :

$$e^{ikx} = e^{ik(x+\lambda)} = \cos k\lambda + i \sin k\lambda \Rightarrow \begin{cases} \cos k\lambda = 1 \\ \sin k\lambda = 0 \end{cases} \Rightarrow k\lambda = 2\pi, \text{ tức là}$$

$$\frac{p}{\hbar} \lambda = 2\pi \Rightarrow p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} = \frac{h}{\lambda} \text{ (hệ thức De Broglie).}$$

Ta thấy rằng hàm riêng của toán tử xung lượng tương ứng với trị riêng  $p$  có bước sóng là bước sóng De Broglie  $\frac{h}{\lambda}$ .

Vậy hàm riêng và trị riêng của toán tử xung lượng là

$$\varphi_k(x) = A e^{ikx}; \quad p = \hbar k. \quad (2)$$

### c) Toán tử năng lượng $\hat{H}$

Toán tử tương ứng với năng lượng là toán tử năng lượng hay toán tử Hamilton  $\hat{H}$ , trong đó  $\bar{p}$  được thay bởi  $\hat{p}$ .

Toán tử năng lượng của hạt có khối lượng  $m$  trong trường thế  $V(\vec{r})$  là

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}). \quad (3)$$

Phương trình trị riêng có dạng

$$\hat{H}\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}). \quad (4)$$

Đây chính là phương trình Schrodinger không phụ thuộc thời gian.

Xét hạt tự do:  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ . (5)

Đối với hạt tự do một chiều, ta có phương trình trị riêng

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) = E\varphi(x).$$

Đặt  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$  ( $k$  được gọi là số sóng), ta có phương trình

$$\varphi_{xx} + k^2\varphi = 0.$$

Do không có điều kiện biên nên

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (6)$$

$\varphi(x)$  là hàm riêng của toán tử  $\hat{H}$  tương ứng với trị riêng năng lượng  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ .

( $\hbar k$ ) chính là xung lượng của hạt tự do vì với hạt tự do thì năng lượng  $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ .

Ta nhận thấy rằng hàm  $\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$  ứng với  $B=0$  cũng là hàm riêng của toán tử xung lượng  $\hat{p}$ .

Việc 2 toán tử  $\hat{H}$  và  $\hat{p}$  của một hạt tự do có chung hàm riêng là một trường hợp đặc biệt của một định lí tổng quát hơn.

Tiếp theo, ta hãy chứng minh rằng nếu  $\varphi$  là hàm riêng của  $\hat{p}$  thì  $\varphi$  cũng là hàm riêng của  $\hat{H}$ .

Thật vậy, do  $\varphi$  là hàm riêng của  $\hat{p}$  nên ta có

$$\hat{p}\varphi = \hbar k\varphi.$$

$$\text{Do đó } \hat{H}\varphi = \frac{\hat{p}}{2m}(\hat{p}\varphi) = \frac{\hat{p}}{2m}(\hbar k\varphi) = \frac{\hbar k}{2m}(\hat{p}\varphi) = \frac{(\hbar k)^2}{2m}\varphi,$$

tức là  $\varphi$  cũng là hàm riêng của  $\hat{H}$ .

Cả năng lượng và xung lượng của hạt tự do có các giá trị liên tục:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}; \quad p = \hbar k; \quad (7)$$

nghĩa là chúng là trị riêng của bất cứ số sóng  $k$  nào.

Hàm riêng tương ứng là

$$\varphi_k(x) = Ae^{ikx}.$$

Nếu hạt tự do ở trạng thái này thì phép đo xung lượng chắc chắn được giá trị  $\hbar k$ , phép đo năng lượng chắc chắn được giá trị  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ .

Giả sử ta đo vị trí  $x$  của hạt. Hạt sẽ ở đâu?

Theo Born, khi hạt ở trạng thái được mô tả bởi hàm sóng  $\varphi_k(x) = Ae^{ikx}$  thì mật độ xác suất liên quan tới xác suất tìm thấy hạt trong khoảng  $[x, x+dx]$  là  $|\varphi_k|^2 = |A|^2 = \text{const}$ . Mật độ xác suất cùng bằng một hằng số cho mọi  $x$ . Vậy xác suất tìm thấy hạt ở bất cứ vị trí nào, từ  $x = -\infty$  tới  $x = +\infty$  là như nhau.

Chú ý rằng  $E$  và  $t$  là các biến bổ sung:  $\Delta E \Delta t \geq \hbar$ ; nghĩa là nếu năng lượng bất định một lượng  $\Delta E$  thì thời gian cần để đo  $E$  sẽ bất định bởi  $\Delta t \geq \frac{\hbar}{\Delta E}$ . Trong trường hợp này  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ; suy ra  $\Delta E = 0$ .

Để đo  $E$ , ta phải cho hạt tương tác với một dụng cụ đo năng lượng, ví dụ một tấm nối với một lò xo, để đo xung lượng truyền vào tấm khi hạt va vào. Nếu đặt tấm trên hướng đi của hạt thì chúng ta phải đợi bao lâu để phát hiện được hạt? Câu trả lời đúng là: không

biết! Có thể chúng ta chỉ phải đợi trong  $10^{-8}$  s. Cũng có thể chúng ta phải đợi trong  $10^{10}$  năm.

## 2.2. Phép đo trong Cơ học lượng tử (Tiên đề 2)

*Nội dung:* Phép đo biến số động lượng  $A$  thu được giá trị  $a$  đưa hệ về trạng thái  $\varphi_a$ , trong đó  $\varphi_a$  là hàm riêng của toán tử  $\hat{A}$  tương ứng với trị riêng  $a$ .

Ví dụ: hạt tự do chuyển động một chiều. Ta không biết hạt ở trong trạng thái nào. Ở một thời điểm bất kì, ta đo xung lượng của hạt và được giá trị  $p = \hbar k$ . Phép đo này đưa hệ về trạng thái  $\varphi_k$ . Phép đo xung lượng ngay sau đó chắc chắn thu được giá trị  $p = \hbar k$ .

Giả sử ta đo vị trí của một hạt tự do và đo được vị trí  $x = x'$ . Từ 2 tiên đề ta suy ra

- 1) Có một toán tử  $\hat{x}$  tương ứng với phép đo được vị trí  $x$ ;
- 2) Đo  $x$  được giá trị  $x'$  đưa hạt về hàm riêng của toán tử  $\hat{x}$  tương ứng với trị riêng  $x'$ .

Ta có phương trình trị riêng

$$\hat{x}\delta(x-x') = x'\delta(x-x') \text{ (trong biểu diễn tọa độ).}$$

Trong đó  $\delta(x-x')$  là hàm delta Dirac.

## 2.3. Tiên đề 3

(Thiết lập sự tồn tại của hàm trạng thái và mối liên hệ của nó với các tính chất của một hệ)

*Nội dung:* Trạng thái của hệ ở một thời điểm bất kỳ được biểu diễn bởi một hàm trạng thái hay hàm sóng  $\psi$  liên tục và khả tích. Tất cả thông tin liên quan đến trạng thái của hệ được chứa đựng trong hàm sóng.

Cụ thể, nếu hệ ở trạng thái  $\psi(\vec{r}, t)$  thì giá trị trung bình của biến số động lực  $C$  bất kì liên quan với hệ ở thời điểm  $t$  là

$$\langle C \rangle = \int \psi^* \hat{C} \psi d\vec{r}, \quad (8)$$

trong đó  $d\vec{r}$  là vi phân thể tích.  $\langle C \rangle$  còn được gọi là giá trị kì vọng của biến số động lực  $C$ .

### ***Ý nghĩa vật lí của giá trị trung bình của biến số động lực $C$ :***

Biến số động lực  $C$  được đo trong một thí nghiệm xác định  $X$ . Người ta chuẩn bị một số lượng  $N$  rất lớn các phép lặp của  $X$ . Các trạng thái đầu  $\psi(\vec{r}, 0)$  của mọi phép lặp đều như nhau. Ở thời điểm  $t$ , đo  $C$  trong tất cả các thí nghiệm lặp và thu được tập giá trị  $C_1, C_2, \dots, C_N$ . Suy ra

$$\langle C \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C_i.$$

Tiên đề 3 nói rằng giá trị trung bình tính được trong thí nghiệm bằng giá trị trung bình cho bởi tích phân.

$\langle C \rangle$  còn được gọi là giá trị kì vọng của biến số động lực  $C$  vì đó là giá trị mà ta kì vọng thu được trong bất cứ phép đo nào của  $C$ .

## **2.4. Sự tiến triển theo thời gian của hàm trạng thái (Tiên đề 4)**

*Nội dung:* Hàm trạng thái  $\psi(\vec{r}, t)$  của một hệ tiến triển theo thời gian theo phương trình

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t). \quad (9)$$

Đây chính là phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian.

$\hat{H}$  là toán tử năng lượng hay toán tử Hamilton.

Toán tử năng lượng của hạt có khối lượng  $m$  trong trường thế  $V(\vec{r})$  là

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}).$$

Giả sử  $\hat{H}$  không phụ thuộc  $t$ :  $\hat{H} = \hat{H}(\vec{r})$ .

Trong trường hợp này ta có thể tìm nghiệm của phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian nhờ kỹ thuật tách biến:

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

Kết quả, ta tìm được phần phụ thuộc thời gian

$$T(t) = A \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right).$$

Giả sử ta giải phương trình Schrodinger không phụ thuộc thời gian, thu được các hàm riêng  $\varphi_n$  và trị riêng  $E_n$ :

$$\hat{H} \varphi_n = E_n \varphi_n.$$

Với mỗi nghiệm riêng như thế, có một nghiệm riêng tương ứng với phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian.

$$\psi_n(\vec{r}, t) = A \varphi_n(\vec{r}) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (10)$$

Điều này phù hợp khi  $\{\varphi_n\}$  gián đoạn.



Trong trường hợp  $\{\varphi_n\}$  liên tục, ví dụ hạt tự do chuyển động một chiều, từ phương trình phương trình Schrodinger không phụ thuộc thời gian

$$\hat{H}\varphi_k = E_k\varphi_k$$

ta đã thu được hàm riêng  $\varphi_k(x) = Ae^{ikx}$  và trị riêng  $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ .

Với mỗi nghiệm không phụ thuộc thời gian ta có một nghiệm phụ thuộc thời gian tương ứng

$$\psi_k(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}, \text{ trong đó } \hbar\omega = E_k.$$

## Chương III: Hạt chuyển động trong hố thế

### 3.1. Hạt chuyển động trong hố thế

#### a) Hàm riêng và trị riêng

Ta đã biết rằng đối với hạt chuyển động tự do thì phổ trị riêng của toán tử năng lượng là liên tục  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  và các hàm riêng tương ứng là  $\varphi_k(x) = Ae^{ikx}$ .

Bây giờ ta hãy xét trường hợp hạt chuyển động trong hố thế một chiều

$$V(x) = \infty \text{ khi } x \leq 0 \text{ hoặc } x \geq L \text{ (miền 1);}$$

$$V(x) = 0 \text{ khi } 0 < x < L \quad \text{(miền 2).}$$

Trong miền 1: Với  $E$  hữu hạn:  $\hat{H}_1 \varphi = E\varphi$

Do  $E, \varphi$  hữu hạn nên vế phải hữu hạn, suy ra  $\varphi = 0$ ;

$$|\varphi|^2 = 0 \text{ ở miền 1.}$$

Trong miền 2:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x).$$

$$\text{Điều kiện biên: } \varphi_n(0) = \varphi_n(L) = 0.$$

Đặt  $k_n^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2}$ , ta có nghiệm

$$\varphi_n(x) = A \sin k_n x + B \cos k_n x.$$

Từ điều kiện biên suy ra

$$B = 0;$$

$$A \sin k_n L = 0 \text{ hay } k_n L = n\pi; \quad n = 0, 1, 2.$$

Vậy phổ trị riêng và hàm riêng rời rạc.

$$\text{Từ điều kiện chuẩn hoá } \int_0^L |\varphi_n(x)|^2 dx = 1 \text{ ta có } A = \sqrt{\frac{2}{L}}.$$

Vậy hàm riêng và trị riêng của hạt chuyển động trong hố thế đã nêu là

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right); \quad E_n = n^2 E_1; \quad E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}.$$

Ta thấy rằng khi  $n=0$  thì  $\varphi=0$ , do đó  $|\varphi|^2=0$ , hạt không tồn tại ở trạng thái  $n=0$ .

### ***b) Thừa số pha tùy ý***

Ta đã biết rằng hàm sóng  $\psi$  cho thông tin về hệ:

$$\langle C \rangle = \int \psi^* \hat{C} \psi dx.$$

Điều kiện chuẩn hoá của hàm sóng là

$$\int \psi^* \psi dx = 1.$$

Giá trị của các biểu thức nói trên không thay đổi dưới tác dụng của phép biến đổi  $\psi \rightarrow e^{i\alpha} \psi$ , trong đó  $\alpha$  là số thực.

Như vậy hàm sóng được xác định chính xác đến một thừa số pha  $e^{i\alpha}$ . Đại lượng tùy ý này không ảnh hưởng tới bất cứ kết quả vật lí nào.

## **3.2. Kí hiệu Dirac**

Trong Cơ học lượng tử, ngoài kí hiệu tích phân thông thường, ta còn dùng kí hiệu Dirac.

Khi gặp kí hiệu  $\langle \psi | \varphi \rangle$ , ta phải hiểu như sau

- 1) lấy liên hợp phức của đối tượng trong khe thứ nhất:  $\psi \rightarrow \psi^*$ ;
- 2) lấy tích phân của tích  $\psi^* \psi$ .

Các tính chất:

Nếu  $a$  là số phức,  $\psi$  và  $\varphi$  là 2 hàm sao cho

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \varphi dx < \infty$$

thì

- a)  $\langle \psi | a\varphi \rangle = a \langle \psi | \varphi \rangle$ ;
- b)  $\langle a\psi | \varphi \rangle = a^* \langle \psi | \varphi \rangle$ ;
- c)  $\langle \psi | \varphi \rangle^* = \langle \varphi | \psi \rangle$ ;
- d)  $(\langle \psi_1 | + \langle \psi_2 |)(|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle) = \langle \psi_1 | \varphi_1 \rangle + \langle \psi_1 | \varphi_2 \rangle + \langle \psi_2 | \varphi_1 \rangle + \langle \psi_2 | \varphi_2 \rangle$ .

### 3.3. Nguyên lí chồng chập

Trở lại bài toán hố thế một chiều.

Ta hãy tưởng tượng một số lớn các phép lặp đồng nhất của hệ.

Tất cả các hố thế ở cùng trạng thái ban đầu  $\psi(x,0)$ .

Sau khoảng thời gian  $t$ , tất cả các hố thế ở cùng trạng thái  $\psi(x,t)$ .

Năng lượng của hạt trong mỗi hố thế ở thời điểm  $t$  bằng bao nhiêu?

Điều đặc biệt là: năng lượng đo trong các hố thế giống nhau, ở cùng trạng thái  $\psi(x,t)$ , không như nhau!

Các câu hỏi thích hợp hơn có thể đặt ra là:

1) Năng lượng trung bình đo được trong tất cả các hố thế là bao nhiêu?

2) Nếu ta đo năng lượng trong một hố thế thì xác suất đo được một giá trị cụ thể, ví dụ  $E_3$ , là bao nhiêu?

Nếu xác suất tìm thấy giá trị  $E_n$  trong một phép đo năng lượng là  $P(E_n)$  thì năng lượng trung bình của tất cả các phép đo của tất cả các thành viên của tập hợp là

$$\langle E \rangle = \sum_{\forall E_n} P(E_n) E_n. \quad (1)$$

Công thức (1) đúng cho mọi đại lượng vật lí. Ví dụ:

$$\langle x \rangle = \int_0^L x P(x) dx. \quad (2)$$

Theo tiên đề 3:

$$\langle E \rangle = \langle \psi | \hat{H} \psi \rangle. \quad (3)$$

Ta hãy khai triển trạng thái  $\psi$  theo các hàm riêng của  $\hat{H}$ . Các hàm riêng thoả mãn phương trình trị riêng

$$\hat{H} \varphi_n = E_n \varphi_n. \quad (4)$$

Đối với bài toán hố thế sâu vô hạn thì

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right). \quad (5)$$

Khai triển  $\psi$  theo các hàm riêng  $\varphi_n$

$$\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n(t) \varphi_n(x). \quad (6)$$

Nếu viết theo kí hiệu Dirac, ta có

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |b_n \varphi_n\rangle. \quad (7)$$

Thay (7) vào (3) ta có

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \left\langle \sum_n b_n \varphi_n \left| \hat{H} \sum_l b_l \varphi_l \right. \right\rangle = \sum_n \sum_l b_n^* b_l \langle \varphi_n | \hat{H} \varphi_l \rangle = \\ &= \sum_n \sum_l b_n^* b_l E_l \langle \varphi_n | \varphi_l \rangle = \sum_n \sum_l b_n^* b_l E_l \delta_{nl} = \sum_{n=1}^{\infty} |b_n|^2 E_n. \end{aligned} \quad (8)$$

So sánh (8) và (1) ta được

$$\sum_{n=1}^{\infty} |b_n|^2 E_n = \sum_n P(E_n) E_n. \quad (9)$$

Vậy  $|b_n|^2$  chính là xác suất để ở thời điểm  $t$  phép đo năng lượng của hạt ở trạng thái  $\psi(x,t)$  thu được giá trị  $E_n$ :

$$P(E_n) = |b_n|^2. \quad (10)$$

Nếu  $\psi$  và  $\varphi_n$  đã chuẩn hoá thì các hệ số cũng được chuẩn hoá.

Thật vậy:

$$\begin{aligned} 1 = \langle \psi | \psi \rangle &= \left\langle \sum_n b_n \varphi_n \left| \sum_l b_l \varphi_l \right. \right\rangle = \sum_n \sum_l b_n^* b_l \langle \varphi_n | \varphi_l \rangle \\ &= \sum_n \sum_l b_n^* b_l \delta_{nl} = \sum_{n=1}^{\infty} |b_n|^2, \end{aligned} \quad (11)$$

tức là  $|b_n|^2$  là xác suất tuyệt đối.

Nếu  $\psi$  và  $\varphi_n$  chưa chuẩn hoá thì

$$P(E_n) = \frac{|b_n|^2 |c_n|^2}{\sum |b_n|^2 |c_n|^2} = \frac{|b_n|^2 |c_n|^2}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (12)$$

$$|c_n|^2 = \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle.$$

Trở lại khai triển (7) :

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |b_n \varphi_n\rangle.$$

Nhân trái với  $\langle \varphi_n |$ , do tính chất trực giao của tập các hàm riêng  $\{\varphi_n\}$ , ta có

$$b_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle. \quad (13)$$

Như vậy, hệ số  $b_n$  là hình chiếu của  $\psi$  lên vectơ riêng  $\varphi_n$ .

Ý nghĩa vật lí của  $b_n$ :  $|b_n|^2$  là xác suất đo năng lượng được giá trị  $E_n$  khi hệ ở trạng thái  $\psi$ .

Sự mô tả nói trên đúng với bất cứ đại lượng vật lí nào.

Xét toán tử  $\hat{F}$  bất kì.

$$\hat{F}\varphi_n = f_n \varphi_n. \quad (14)$$

Ở thời điểm  $t$ , hệ ở trạng thái  $\psi(x,t)$ . Hỏi xác suất đo  $F$  được giá trị  $f_n$  bằng bao nhiêu?

Trạng thái  $\psi$  là trạng thái chồng chất của các trạng thái riêng của  $\hat{F}$ . Ta giả sử các trạng thái riêng của  $\hat{F}$  là một cơ sở của không gian Hilbert mà  $\psi$  xác định trong đó:

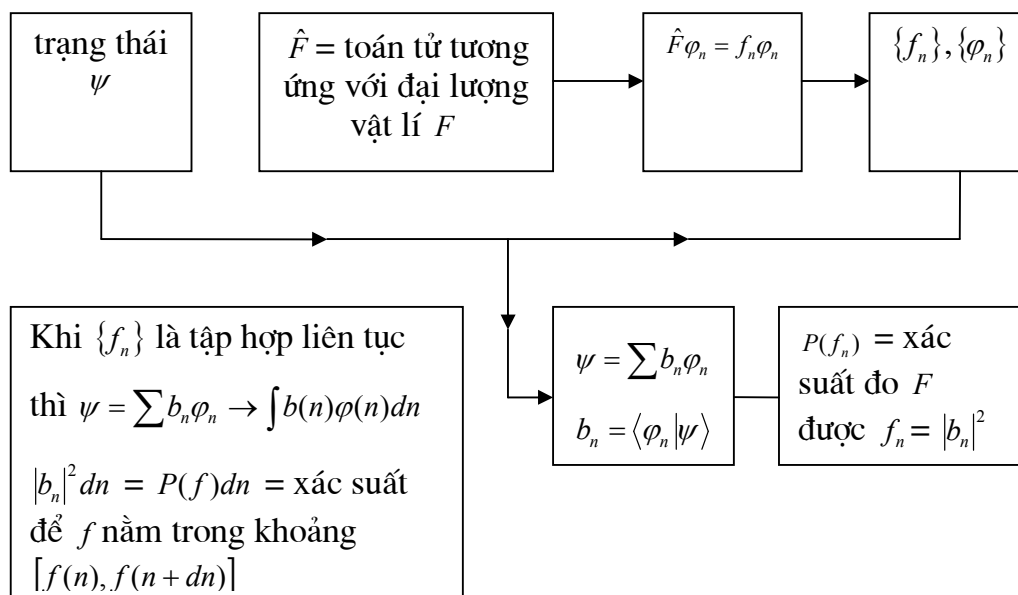
$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |b_n \varphi_n\rangle, \quad (15)$$

$$b_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle.$$

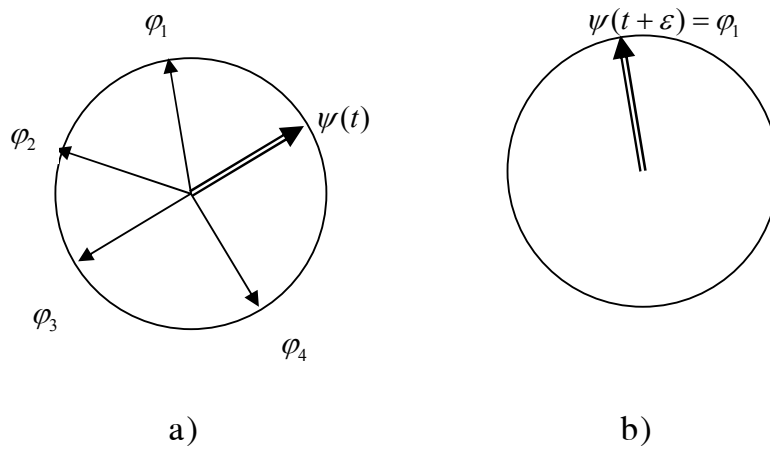
Việc giả thiết rằng một trạng thái bất kì  $\psi$  có thể được biểu diễn như là chồng chất của các trạng thái riêng của một đại lượng

vật lí là cốt lõi của nguyên lí chồng chập. Với  $\{\varphi_n\}$  và  $\psi$  đã chuẩn hoá thì  $P(f_3) = |b_3|^2$ .

Chúng ta có thể tóm tắt những điều vừa trình bày nói trên theo sơ đồ sau đây:



**Giải thích theo không gian Hilbert:**





a) Trạng thái của hệ trước khi đo ở thời điểm  $t$ , chồng chập trên cơ sở  $\{\varphi_n\}$  là các vectơ riêng của toán tử  $\hat{F}$ . Xác suất đo  $F$  được giá trị  $f_n$  tỉ lệ với hình chiếu của  $\psi$  lên  $\varphi_n$ .

b) Trạng thái của hệ ngay sau khi đo được giá trị  $f_1$ . Phép đo đóng vai trò như một “bộ lọc sóng”. Nó lọc ra tất cả các thành phần của chồng chập  $\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n(t)\varphi_n(x)$ , chỉ cho qua sóng  $\varphi_1$ .

Trong không gian Hilbert,  $\{\varphi_n\}$  là tập các vectơ,  $\psi$  là một vectơ khác.

Hệ ở trạng thái  $\psi$ . Phép đo đại lượng vật lí  $F$  làm cho trạng thái  $\psi$  “rơi vào” một trong số các vectơ riêng  $\varphi_n$ .

**Ví dụ minh họa:** Một vi hạt có khối lượng  $m$  chuyển động trong hố thế 1 chiều có bề rộng  $L$ . Khi  $t=0$ , hạt ở trạng thái

$$\psi(x,0) = \frac{3\varphi_3 + 4\varphi_6}{5}, \quad (17)$$

trong đó các hàm  $\varphi_n$  là các trạng thái riêng trực giao của  $\hat{H}$ :

$$\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right). \quad (18)$$

Hỏi ta có thể nói gì về phép đo năng lượng  $E$  tại thời điểm đó ( $t=0$ )?

**Giải:** Trước hết, ta hãy kiểm tra tính chuẩn hoá của hàm sóng  $\psi$ . Dễ thấy rằng  $\langle\psi|\psi\rangle=1$ . Do đó, hàm sóng  $\psi$  đã chuẩn hoá.

Theo nguyên lí chồng chập, muốn tìm xác suất đo năng lượng được giá trị  $E_n$  ta phải khai triển  $\psi$  theo các trạng thái riêng của  $\hat{H}$ . Bình phương biên độ hệ số khai triển của  $\varphi_n$  cho ta xác suất cần tìm.

Trong bài toán này,  $b_5 = \frac{3}{5}$ ,  $b_6 = \frac{4}{5}$ ,  $b_n = 0$  với  $n \neq 5$  hoặc 6.

Vậy xác suất  $P(E_n)$  đo  $E$  tại  $t=0$  được  $E_n$  là

$$P(E_5) = \frac{9}{25} = 36\%, \quad P(E_6) = \frac{16}{25} = 64\%, \quad P(E_n) = 0 \text{ với } n \neq 5 \text{ hoặc } 6.$$

Các giá trị năng lượng là

$$E_n = n^2 E_1, \quad E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

Mặc dầu trạng thái  $\psi(x,0)$  là chồng chập chính xác của các trạng thái riêng được xác định rõ ràng của các đại lượng vật lí được đo nhưng ta không biết chính xác phép đo sẽ thu được kết quả nào.

Đây là điều không có sự tương tự trong cơ học cổ điển.

Mọi sự bất định trong cơ học cổ điển là do số liệu ban đầu không chính xác.

Trong Cơ học lượng tử, mặc dầu trạng thái ban đầu  $\psi(x,0)$  được mô tả chính xác tuyệt đối song ta không thể biết chắc chắn phép đo sẽ đưa hệ về trạng thái riêng  $\varphi_n$  nào.

Tuy nhiên, mỗi khi  $E$  đã được đo và năng lượng  $E_5$  được tìm thấy thì ta biết chắc chắn rằng trạng thái của hệ ngay sau phép đo đó là  $\varphi_5$ .

Nguyên lí chồng chập yêu cầu chúng ta giả thiết rằng giữa các trạng thái có tồn tại các mối liên hệ đặc biệt sao cho mỗi khi hệ ở trong một trạng thái hoàn toàn xác định thì chúng ta có thể xem như nó cũng đang một phần ở trong mỗi một trong số 2 hoặc nhiều hơn các trạng thái khác. Trạng thái ban đầu phải được xem xét như là kết quả của một dạng chồng chập của 2 hoặc nhiều hơn 2 trạng thái khác, theo một cách thức không thể tiếp nhận được theo các ý tưởng cổ điển.

## Chương IV: Dao động tử điều hoà

### 4.1. Dao động tử điều hoà một chiều

Một vi hạt có khối lượng  $m$  chuyển động trong trường có thế năng  $V = \frac{K}{2}x^2$ .

Toán tử Hamilton của hạt là

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{K}{2}x^2. \quad (1)$$

Từ đó, phương trình Schrodinger mô tả chuyển động của hạt có dạng:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{K}{2}x^2 \varphi(x) = E\varphi(x). \quad (2)$$

Ta tìm hàm riêng và trị riêng của toán tử Hamilton bằng phương pháp đại số, dựa vào các toán tử sinh và huỷ.

Ta định nghĩa các toán tử

$$\hat{a} \equiv \frac{\beta}{\sqrt{2}} \left( \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega_0} \right), \quad \hat{a}^+ \equiv \frac{\beta}{\sqrt{2}} \left( \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega_0} \right), \quad (3)$$

trong đó

$$\beta^2 \equiv \frac{m\omega_0}{\hbar}. \quad (4)$$

Để thấy rằng  $\hat{a} \neq \hat{a}^+$ , do đó  $\hat{a}$  không phải là toán tử éc-mít. Từ hệ thức giao hoán giữa toán tử toạ độ và toán tử xung lượng

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

ta chứng minh được hệ thức giao hoán giữa  $\hat{a}$  và  $\hat{a}^+$ :

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1. \quad (5)$$

Từ biểu thức định nghĩa của  $\hat{a}$  và  $\hat{a}^+$ , ta suy ra

$$\hat{x} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^+}{\sqrt{2\beta}}; \quad \hat{p} = \frac{m\omega_0}{i} \frac{\hat{a} - \hat{a}^+}{\sqrt{2\beta}}; \quad \hat{H} = \hbar\omega_0 \left( \hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (6)$$

Như vậy bài toán tìm trị riêng của  $\hat{H}$  trở thành bài toán tìm trị riêng của toán tử

$$\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}.$$

Giả sử  $\varphi_n$  là hàm riêng của toán tử  $\hat{N}$  tương ứng với trị riêng  $n$ :

$$\hat{N}\varphi_n = n\varphi_n. \quad (7)$$

Cho toán tử  $\hat{N}$  tác động lên  $(\hat{a}\varphi_n)$ , ta có

$$\begin{aligned} \hat{N}\hat{a}\varphi_n &= \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a} \varphi_n = (\hat{a} \hat{a}^+ - 1) \hat{a} \varphi_n = \hat{a} (\hat{a}^+ \hat{a} - 1) \varphi_n = \\ &= \hat{a} (\hat{N} - 1) \varphi_n = \hat{a} (n - 1) \varphi_n = (n - 1) \hat{a} \varphi_n. \end{aligned} \quad (8)$$

Hệ thức trên cho thấy rằng  $\hat{a}\varphi_n$  là hàm riêng của toán tử  $\hat{N}$  ứng với trị riêng  $n-1$ , nghĩa là:  $\hat{a}\varphi_n = \varphi_{n-1}$  (ta đã bỏ qua thừa số chuẩn hoá).

Tương tự,  $\hat{a}\varphi_{n-1} = \varphi_{n-2}$ . Vì lí do đó, toán tử  $\hat{a}$  được gọi là toán tử huỷ.

Chúng minh tương tự, ta được:

$$\hat{N}\hat{a}^+ \varphi_n = (n+1)\hat{a}^+ \varphi_n, \quad (9)$$

$\hat{a}^+ \varphi_n$  là hàm riêng của toán tử  $\hat{N}$  ứng với trị riêng  $n+1$ :  $\hat{a}^+ \varphi_n = \varphi_{n+1}$ .

Tương tự,

$$\hat{a}^+ \varphi_{n+1} = \varphi_{n+2}.$$

Toán tử  $\hat{a}^+$  được gọi là toán tử sinh.

Do  $\hat{H}$  là tổng các bình phương của 2 toán tử éc-mít nên

$$\langle H \rangle \geq 0.$$

Khi hệ ở trong trạng thái riêng  $\varphi_n$  thì

$$\hat{H}\varphi_n = \hbar\omega_0\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)\varphi_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right)\varphi_n. \quad (10)$$

Từ đó:

$$\langle \varphi_n | \hat{H}\varphi_n \rangle = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right) \geq 0. \quad (11)$$

Suy ra trị riêng  $n$  phải thoả mãn điều kiện  $n \geq -\frac{1}{2}$ . Mọi trạng thái riêng của  $\hat{H}$  tương ứng với trị riêng  $n < -\frac{1}{2}$  phải bằng 0. Với dao động tử điều hoà, những trạng thái như thế không tồn tại. Điều kiện này được đảm bảo nếu ta đặt

$$\hat{a}\varphi_0 = 0.$$

Từ đó:

$$\hat{a}\varphi_0 = \varphi_{-1} = 0, \quad \hat{a}\varphi_{-1} = \varphi_{-2} = 0. \quad (12)$$

Ngoài ra:

$$\hat{N}\varphi_0 = \hat{a}^+\hat{a}\varphi_0 = 0 = 0.\varphi_0, \quad (13)$$

$$\hat{N}\varphi_1 = \hat{N}\hat{a}^+\varphi_0 = \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+\varphi_0 = \hat{a}^+(\hat{a}^+\hat{a}+1)\varphi_0 = \hat{a}^+\varphi_0 = \varphi_1 = 1.\varphi_1 \dots \quad (14)$$

Như vậy, chỉ số  $n$ , đánh dấu hàm riêng  $\varphi_n$ , là số nguyên.

Trở lại phương trình trị riêng

$$\hat{H}\varphi_n = \hbar\omega_0\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)\varphi_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right)\varphi_n, \quad (15)$$

ta suy ra trị riêng năng lượng của dao động tử điều hoà là:

$$E_n = \hbar\omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (16)$$

Ta có nhận xét rằng các mức năng lượng của dao động tử điều hoà cách đều nhau; khoảng cách giữa các mức là  $\hbar\omega_0$ .

Để tìm hàm riêng của dao động tử điều hoà, ta đặt

$$\zeta^2 \equiv \frac{m\omega_0}{\hbar} x^2 \equiv \beta^2 x^2. \quad (17)$$

Khi đó, các toán tử  $\hat{a}$  và  $\hat{a}^+$  có dạng

$$\hat{a} \equiv \frac{\beta}{\sqrt{2}} \left( \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega_0} \right) = \frac{\beta}{\sqrt{2}} \left( x + \frac{\hbar}{m\omega_0} \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right), \quad (18)$$

$$\hat{a}^+ \equiv \frac{\beta}{\sqrt{2}} \left( \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega_0} \right) = \frac{\beta}{\sqrt{2}} \left( x - \frac{\hbar}{m\omega_0} \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right). \quad (19)$$

Phương trình Schrodinger mô tả chuyển động của hạt trở thành

$$\left( 2\hat{a}^+ \hat{a} + 1 - \frac{2E}{\hbar\omega_0} \right) \varphi = \varphi_{\xi\xi} + \left( \frac{2E}{\hbar\omega_0} - \xi^2 \right) \varphi = 0. \quad (20)$$

Hàm sóng ở trạng thái cơ bản  $\varphi_0$  thoả mãn

$$\hat{a}\varphi_0 = 0,$$

hay, một cách tương đương

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \varphi_0 = 0. \quad (21)$$

Phương trình này có nghiệm

$$\varphi_0(\xi) = A_0 \cdot e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (22)$$

Từ điều kiện chuẩn hoá ta suy ra

$$A_0 = \pi^{-\frac{1}{4}}.$$

Vậy

$$\varphi_0(\xi) = \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (23)$$

Nếu viết theo biến  $x$  thì

$$\varphi_0(x) = B_0 e^{-\frac{\xi^2}{2}} = B_0 e^{-\frac{(\beta x)^2}{2}} = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{(\beta x)^2}{2}}. \quad (24)$$

Từ biểu thức của  $\varphi_0$  ta suy ra được biểu thức của các trạng thái riêng còn lại:

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= \hat{a}^+ \varphi_0, \\ \varphi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{a}^+ \varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}^+)^2 \varphi_0, \\ &\dots \\ \varphi_n &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n \varphi_0. \end{aligned} \quad (25)$$

Nếu viết theo biến  $\xi$  thì:

$$\varphi_n(\xi) = A_n \left( \xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right)^n e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (26)$$

Ta đã biết rằng toán tử vi phân bậc  $n$ ,  $(\hat{a}^+)^n$ , tác động lên hàm mũ  $e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ , cho ta cùng hàm mũ đó, nhân với đa thức bậc  $n$  theo  $\xi$ :

$$\left( \xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right)^n e^{-\frac{\xi^2}{2}} = H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (27)$$

Vậy hàm riêng của dao động tử điều hoà là

$$\varphi_n(\xi) = A_n H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (28)$$

Trong đó hệ số chuẩn hoá

$$A_n = \left( 2^n n! \sqrt{\pi} \right)^{-\frac{1}{2}},$$

còn đa thức  $H_n(\xi)$  là nghiệm của phương trình Hermite

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + 2nH_n(\xi) = 0 \quad (29)$$

và được gọi là đa thức Hermite bậc  $n$ .

#### 4.2. Dao động tử điều hoà 2 chiều

Đối với dao động tử điều hoà 2 chiều, toán tử Hamilton của hệ

$$\hat{H}(x, y) = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{K}{2}x^2 + \frac{K}{2}y^2 \quad (30)$$

được tách thành 2 phần độc lập  $\hat{H}(x)$  và  $\hat{H}(y)$ , tương ứng với dao động tử điều hoà một chiều theo phương  $x$  và  $y$ .

Do đó, từ nghiệm của bài toán dao động tử điều hoà một chiều đã xét ở phần trên, ta suy ra nghiệm của bài toán dao động tử điều hoà 2 chiều như sau:

$$\text{Hàm riêng:} \quad \varphi_{n_1 n_2}(\xi, \eta) = A_{n_1 n_2} H_{n_1}(\xi) H_{n_2}(\eta) e^{-\frac{\xi^2 + \eta^2}{2}}, \quad (31)$$

$$\text{Trị riêng:} \quad E_{n_1 n_2} = \hbar\omega_0(n_1 + n_2 + 1), \quad (32)$$

trong đó:

$$\zeta^2 \equiv \frac{m\omega_0}{\hbar}x^2 \equiv \beta^2x^2, \quad \eta^2 \equiv \frac{m\omega_0}{\hbar}y^2 \equiv \beta^2y^2, \quad (33)$$

$H_n(\tau)$  là đa thức Hermite bậc  $n$  (biến  $\tau = \xi, \eta$ ).  $A_{n_1 n_2}$  là hệ số chuẩn hoá.

Ta có nhận xét: Các hàm riêng tương ứng với trị riêng năng lượng  $E_{n_1 n_2}$  có dạng tích  $\varphi_{n_1} \cdot \varphi_{n_2}$  sao cho  $n_1' + n_2' = n_1 + n_2$ . Như vậy trạng thái riêng tương ứng với trị riêng năng lượng  $E_{n_1 n_2}$  bị suy biến bội  $n_1 + n_2 + 1$ .



## Chương V: Bài toán trị ban đầu.

### Hàm của toán tử

#### 5.1. Lời giải bài toán trị ban đầu. Hàm của toán tử

Phương trình Schrodinger cho ta lời giải đối với bài toán trị ban đầu: Biết trị ban đầu của hàm trạng thái  $\psi(\vec{r},0)$ , hãy xác định  $\psi(\vec{r},t)$ .

Xét trường hợp năng lượng của hệ không phụ thuộc thời gian. Phương trình Schrodinger có dạng

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r},t) = \hat{H} \psi(\vec{r},t). \quad (1)$$

Nhân 2 vế với  $-\frac{i}{\hbar}$  rồi chuyển vế

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r},t) + \frac{i\hat{H}}{\hbar} \psi(\vec{r},t) = 0. \quad (2)$$

Nhân trái với

$$\hat{U}^{-1} = \exp\left(\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right) \quad (3)$$

Ta được

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \exp\left(\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right) \psi(\vec{r},t) \right] = 0. \quad (4)$$

Lấy tích phân theo  $t$  từ 0 đến  $t$ , suy ra

$$\exp\left(\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right) \psi(\vec{r},t) - \psi(\vec{r},0) = 0. \quad (5)$$

Nhân với  $\hat{U}$ , ta được

$$\psi(\vec{r}, t) = \exp\left(-\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right)\psi(\vec{r}, 0) = \hat{U}\psi(\vec{r}, 0). \quad (6)$$

Toán tử  $\hat{U}^{-1} = \exp\left(\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right)$  là nghịch đảo của toán tử  $\hat{U} = \exp\left(-\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right)$ .

$\hat{U}^{-1}$  là hàm của toán tử  $\hat{H}$ , cũng là toán tử. Nó được định nghĩa theo chuỗi Taylo

$$\hat{U}^{-1} = \exp\left(\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right) = 1 + \frac{it\hat{H}}{\hbar} + \frac{1}{2!}\left(\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right)^2 + \dots \quad (7)$$

$\hat{U}\hat{U}^{-1} = \hat{I}$  là toán tử đơn vị.

Giả sử trong nghiệm  $\psi(\vec{r}, t)$  nói trên ta chọn trạng thái ban đầu là một hàm riêng của  $\hat{H}$ . Gọi hàm đó là  $\varphi_n$ :

$$\psi_n(\vec{r}, 0) = \varphi_n(\vec{r})$$

$$\hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n.$$

Khi đó, theo một định lí quen thuộc, do  $\varphi_n$  là hàm riêng của  $\hat{H}$  ứng với trị riêng  $E_n$  nên  $\varphi_n$  cũng là hàm riêng của  $f(\hat{H})$  ứng với trị riêng  $f(E_n)$ . Do đó

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \exp\left(-\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right)\varphi_n(\vec{r}) = \exp\left(-\frac{itE_n}{\hbar}\right)\varphi_n(\vec{r}) = e^{-i\omega_n t}\varphi_n(\vec{r}), \quad (8)$$

trong đó  $\hbar\omega_n = E_n$ .

$$\psi_n(\vec{r}, 0) = \varphi_n(\vec{r}) \Rightarrow \langle A \rangle_{t=0} = \int \psi_n^*(\vec{r}, 0)\hat{A}\psi_n(\vec{r}, 0)d\vec{r} = \int \varphi_n^*(\vec{r})\hat{A}\varphi_n(\vec{r})d\vec{r};$$

$$\psi_n(\vec{r}, t) = e^{-i\omega_n t}\varphi_n(\vec{r}) \Rightarrow \langle A \rangle_{t>0} = \int \psi_n^*(\vec{r}, t)\hat{A}\psi_n(\vec{r}, t)d\vec{r} =$$

$$= e^{+i\omega_n t}e^{-i\omega_n t} \int \varphi_n^*(\vec{r})\hat{A}\varphi_n(\vec{r})d\vec{r} = \int \varphi_n^*(\vec{r})\hat{A}\varphi_n(\vec{r})d\vec{r} = \langle A \rangle_{t=0}. \quad (9)$$

Như vậy kì vọng của bất cứ biến số động lực nào cũng là hằng số nếu ở bất cứ thời điểm nào hệ cũng là trạng thái riêng của toán tử năng lượng. Vì vậy, các trạng thái riêng của toán tử năng lượng được gọi là các trạng thái dừng.

$$\psi_n(\vec{r}, t) = e^{-i\omega_n t} \varphi_n(\vec{r}) \text{ là trạng thái dừng.}$$

## 5.2. Sự tiến triển của hàm trạng thái theo thời gian

Trước hết ta hãy nhắc lại bài toán trị ban đầu: Biết trị ban đầu của hàm trạng thái  $\psi(\vec{r}, 0)$ , hãy xác định  $\psi(\vec{r}, t)$ .

Ta đã biết kết quả là

$$\psi(\vec{r}, t) = \exp\left(-\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right) \psi(\vec{r}, 0).$$

Thực hiện khai triển

$$\exp\left(-\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right) = 1 - \frac{it\hat{H}}{\hbar} - \frac{1}{2!} \frac{t^2 \hat{H}^2}{\hbar^2} + \dots$$

Cho hàm mũ này tác động lên một hàm riêng  $\varphi_n$  của  $\hat{H}$ , ta được

$$\exp\left(-\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right) \varphi_n = \exp\left(-\frac{itE_n}{\hbar}\right) \varphi_n.$$

Xét bài toán hạt chuyển động trong hố thế 1 chiều.

Ban đầu, hạt ở trong một trạng thái riêng của của toán tử năng lượng  $\hat{H}$  của hệ

$$\psi_n(x, 0) = \varphi_n(x).$$

Ở thời điểm  $t$  sau đó

$$\psi_n(x, t) = \exp\left(-\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right) \varphi_n(x) = e^{-i\omega_n t} \varphi_n(x),$$

trong đó  $\hbar\omega_n = E_n = n^2 E_1$ .

Trạng thái riêng phụ thuộc thời gian  $\psi_n(x,t)$  của  $\hat{H}$  là trạng thái dừng.

Trị trung bình của bất cứ biến số động lực nào cũng không đổi theo thời gian nếu tại mọi thời điểm hệ là trạng thái riêng của  $\hat{H}$ .

Tính chất quan trọng của trạng thái dừng là: giá trị trung bình của bất cứ biến số động lực nào (mà toán tử của nó không phụ thuộc tường minh vào thời gian) cũng là hằng số trong trạng thái dừng.

*Ví dụ:* Xét trạng thái riêng ứng với  $n=5$

$$\psi_5(x,t) = \exp\left(-\frac{i25E_1 t}{\hbar}\right) \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{5\pi x}{L}\right).$$

Trạng thái  $\psi_5$  dao động với tần số  $\frac{25E_1}{\hbar}$ . Cả phần thực và phần ảo của  $\psi_5(x,t)$  là sóng dừng. Trị trung bình của năng lượng trong trạng thái này là hằng số, bằng  $25E_1$ .

Bây giờ, giả sử  $\psi(x,0)$  không phải là một trạng thái riêng của  $\hat{H}$ .

Để xác định sự tiến triển theo thời gian của  $\psi(x,0)$ , ta áp dụng nguyên lí chồng chập và viết  $\psi(x,0)$  dưới dạng tổ hợp tuyến tính của các trạng thái riêng của  $\hat{H}$ :

$$\psi(x,0) = \sum_n b_n \varphi_n(x);$$

$$b_n = \langle \varphi_n(x) | \psi(x,0) \rangle.$$

Suy ra

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= \exp\left(-\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right) \sum_n b_n \varphi_n(x) = \sum_n b_n \exp\left(-\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right) \varphi_n(x) = \\ &= \sum_n b_n e^{-i\omega_n t} \varphi_n(x); \end{aligned}$$

trong đó  $\hbar\omega_n = E_n = n^2 E_1$ .

Như vậy, mỗi biên độ thành phần  $b_n \varphi_n$  dao động với tần số góc riêng tương ứng  $\omega_n$ .

*Một ví dụ cụ thể:* Trạng thái

$$\psi(x,0) = \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{\sin(2\pi x/L) + 2\sin(\pi x/L)}{\sqrt{5}}$$

là chồng chập của 2 trạng thái riêng  $\varphi_2$  và  $\varphi_1$ ;

$$b_1 = \frac{2}{\sqrt{5}}; \quad b_2 = \frac{1}{\sqrt{5}}; \quad b_n = 0 \quad (\forall n \neq 1,2).$$

Trạng thái của hệ tại  $t > 0$ :

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{e^{-i\omega_2 t} \sin(2\pi x/L) + 2e^{-i\omega_1 t} \sin(\pi x/L)}{\sqrt{5}}.$$

Các nghiệm phụ thuộc thời gian này liên quan với các quan sát thực nghiệm như thế nào?

Ta viết lại

$$\psi(x,t) = \sum_n \bar{b}_n(t) \varphi_n(x);$$

$\bar{b}_n(t)$  gồm cả thừa số phụ thuộc thời gian dạng mũ:

$$\bar{b}_n(t) = e^{-i\omega_n t} b_n.$$

Nếu đo năng lượng  $E$  tại  $t > 0$  sẽ thu được những giá trị nào, với xác suất bằng bao nhiêu?

Ta có

$$\langle E \rangle = \sum_n |\bar{b}_n(t)|^2 E_n;$$

$$P(E_n) = |\bar{b}_n(t)|^2 \Rightarrow P(E_1) = \frac{4}{5}; \quad P(E_2) = \frac{1}{5}; \quad P(E_n) = 0 \quad (\forall n \neq 1,2).$$

Như vậy, với trạng thái ban đầu đã cho, ở thời điểm bất kì  $t > 0$ , xác suất đo năng lượng được  $E_1$  là  $\frac{4}{5}$ ; xác suất đo năng lượng được  $E_2 = 4E_1$  là  $\frac{1}{5}$ .

Giá trị trung bình của năng lượng tại  $t > 0$  là

$$\langle E \rangle_{t>0} = \frac{\left( \langle e^{-i\omega_2 t} \varphi_2 | + \langle 2e^{-i\omega_1 t} \varphi_1 | \right) \left( \hat{H} | e^{-i\omega_2 t} \varphi_2 \rangle + \hat{H} | 2e^{-i\omega_1 t} \varphi_1 \rangle \right)}{5} =$$

$$\frac{E_2 + 4E_1}{5} = \langle E \rangle_{t=0} = \frac{8}{5} E_1.$$

Tức là giá trị trung bình của năng lượng không phụ thuộc thời gian.

Tổng quát, ta có thể chứng minh rằng:

Với một hệ cô lập thì

1) xác suất tìm thấy một giá trị năng lượng  $E_n$  không phụ thuộc thời gian.

2) giá trị trung bình của năng lượng  $\langle E \rangle$  không phụ thuộc thời gian.

Thật vậy

$$P(E_n) = |\bar{b}_n(t)|^2 = e^{+i\omega_n t} e^{-i\omega_n t} b_n^* b_n = |b_n|^2;$$

$$\langle E \rangle = \sum_n |\bar{b}_n(t)|^2 E_n = \sum_n |b_n|^2 E_n;$$

không phụ thuộc thời gian.

## Chương VI: Lí thuyết nhiễu loạn

### 6.1. Giới thiệu

Phương trình Schrodinger không phụ thuộc thời gian  $\hat{H}\varphi = E\varphi$  chỉ cho nghiệm chính xác trong một số ít trường hợp.

Trong một số trường hợp khác, ta có thể viết

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}',$$

trong đó hàm riêng và trị riêng của  $\hat{H}_0$  có thể tìm được chính xác và  $\hat{H}'$  bé so với  $\hat{H}_0$ . Lí thuyết cho phép tìm hàm riêng và trị riêng gần đúng của  $\hat{H}$  từ hàm riêng và trị riêng của  $\hat{H}_0$  gọi là lí thuyết nhiễu loạn. Khi đó,  $\hat{H}_0$  gọi là toán tử Hamilton không nhiễu loạn,  $\hat{H}'$  gọi là toán tử Hamilton nhiễu loạn.

Các bài toán nhiễu loạn được chia thành 3 nhóm:

- 1) nhiễu loạn không phụ thuộc thời gian, không suy biến,
- 2) nhiễu loạn không phụ thuộc thời gian, suy biến,
- 3) nhiễu loạn phụ thuộc thời gian.

Sau đây chúng ta sẽ lần lượt khảo sát các bài toán nói trên.

## 6.2. Nhiễu loạn không phụ thuộc thời gian, không suy biến

### a) Độ nhỏ của nhiễu loạn

Ta giả thiết:

+  $\hat{H}'$  bé so với  $\hat{H}_0$ ,

+ trạng thái riêng và năng lượng riêng của  $\hat{H}$  không khác nhiều so với của  $\hat{H}_0$ .

Gọi  $\{\varphi_n\}$ ,  $\{E_n\}$  và  $\{\varphi_n^{(0)}\}$ ,  $\{E_n^{(0)}\}$  lần lượt là hàm riêng và trị riêng của  $\hat{H}$  và  $\hat{H}_0$ , tức là

$$\hat{H}\varphi_n = (\hat{H}_0 + \hat{H}')\varphi_n = E_n\varphi_n,$$

$$\hat{H}_0\varphi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\varphi_n^{(0)}.$$

Ta có thể viết

$$\varphi_n = \varphi_n^{(0)} + \Delta\varphi_n,$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \Delta E_n,$$

trong đó

$$\Delta\varphi_n \text{ là bổ đính nhỏ vào } \varphi_n^{(0)},$$

$$\Delta E_n \text{ là bổ đính nhỏ vào } E_n^{(0)}.$$

Để lưu ý  $\hat{H}'$  bé, ta viết  $\hat{H}' =: \lambda \hat{H}'$ , trong đó  $\lambda$  là tham số vô cùng bé.

Khi đó phương trình trị riêng của  $\hat{H}$  trở thành

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}')\varphi_n = E_n\varphi_n. \quad (1)$$

### b) Khai triển nhiễu loạn

Trạng thái riêng và năng lượng riêng của  $\hat{H}_0$  đã biết.



Do  $\varphi_n \rightarrow \varphi_n^{(0)}$  khi  $\lambda \rightarrow 0$  nên ta tìm nghiệm của phương trình (1) dưới dạng chuỗi

$$\begin{aligned}\varphi_n &= \varphi_n^{(0)} + \lambda \varphi_n^{(1)} + \lambda^2 \varphi_n^{(2)} + \dots \\ E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots\end{aligned}\quad (2)$$

Thay (2) vào (1) và viết lại các số hạng theo số mũ  $\lambda$  :

$$\begin{aligned}& \left[ \hat{H}_0 \varphi_n^{(0)} - E_n^{(0)} \varphi_n^{(0)} \right] + \\ & + \lambda \left[ \hat{H}_0 \varphi_n^{(1)} - \hat{H}' \varphi_n^{(0)} - E_n^{(0)} \varphi_n^{(1)} - E_n^{(1)} \varphi_n^{(0)} \right] + \\ & + \lambda^2 \left[ \hat{H}_0 \varphi_n^{(2)} - \hat{H}' \varphi_n^{(1)} - E_n^{(0)} \varphi_n^{(2)} - E_n^{(1)} \varphi_n^{(1)} - E_n^{(2)} \varphi_n^{(0)} \right] + \\ & + \dots = 0.\end{aligned}\quad (3)$$

Phương trình (3) có dạng

$$F^{(0)} + \lambda F^{(1)} + \lambda^2 F^{(2)} + \lambda^3 F^{(3)} + \dots = 0.$$

Để phương trình này đúng với mọi  $\lambda$  bất kì bé thì

$$F^{(0)} = F^{(1)} = F^{(2)} = \dots = 0.$$

Từ (3) ta suy ra

$$\begin{aligned}\text{a) } & \hat{H}_0 \varphi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \varphi_n^{(0)}, \\ \text{b) } & (\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) \varphi_n^{(1)} = (E_n^{(1)} - \hat{H}') \varphi_n^{(0)}, \\ \text{c) } & (\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) \varphi_n^{(2)} = (E_n^{(1)} - \hat{H}') \varphi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \varphi_n^{(0)}, \\ \text{d) } & (\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) \varphi_n^{(3)} = (E_n^{(1)} - \hat{H}') \varphi_n^{(2)} + E_n^{(2)} \varphi_n^{(1)} + E_n^{(3)} \varphi_n^{(0)}.\end{aligned}\quad (4)$$

Ở gần đúng bậc thấp nhất, phương trình (4a) cho nghiệm  $\{\varphi_n^{(0)}\}$  và  $\{E_n^{(0)}\}$  là hàm riêng và trị riêng của  $\hat{H}_0$ .

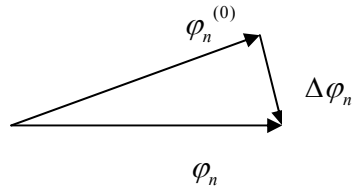
Các phương trình khác có tính chất: vế trái không đổi dưới tác dụng của phép biến đổi  $\varphi_n^{(1)} \rightarrow \varphi_n^{(1)} + a \varphi_n^{(0)}$ , trong đó  $a$  là hằng số bất

kì. Ví dụ: nếu giải (4b) được nghiệm  $\varphi_n^{(1)}$  và  $E_n^{(1)}$  thì  $\varphi_n^{(1)} + a\varphi_n^{(0)}$  và  $E_n^{(1)}$  cũng là nghiệm.

Để loại bỏ tính chất đó, ta phải thêm điều kiện ràng buộc: Mọi bổ đính vào  $\varphi_n^{(0)}$  trong (2) đều trực giao với  $\varphi_n^{(0)}$ :

$$\langle \varphi_n^{(s)} | \varphi_n^{(0)} \rangle = 0 \text{ (với } s=0 \text{ và } \forall n). \quad (5)$$

Trong không gian Hilbert, hệ thức này nói rằng  $\Delta\varphi_n$  trực giao với  $\varphi_n^{(0)}$ .



Điều này giúp ta xác định  $\varphi_n^{(s)}$ .

Trở lại (4b) :  $\hat{H}_0$  tác động lên  $\varphi_n^{(1)}$  nên nghiệm có thể thu được thông qua khai triển của  $\varphi_n^{(1)}$  theo chồng chất của các trạng thái riêng của  $\hat{H}_0$ :

$$|\varphi_n^{(1)}\rangle = \sum_i c_{ni} |\varphi_i^{(0)}\rangle. \quad (6)$$

Thay (6) vào (4b)

$$(\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) \sum_i c_{ni} |\varphi_i^{(0)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat{H}') \varphi_n^{(0)}.$$

Nhân trái với  $\langle \varphi_j^{(0)} |$  ta được

$$(E_j^{(0)} - E_n^{(0)}) c_{nj} + H'_{jn} = E_n^{(1)} \delta_{jn}. \quad (7)$$

$H'_{jn}$  là yếu tố ma trận của  $\hat{H}'$  trong biểu diễn  $\{\varphi_n^{(0)}\}$

$$H'_{jn} \equiv \langle \varphi_j^{(0)} | \hat{H}' | \varphi_n^{(0)} \rangle.$$

### c) Bỏ đỉnh hạng 1

Với  $j \neq n$ , phương trình (7) cho các hệ số  $\{c_{nj}\}$ , khi thay vào (6) cho ta bỏ đỉnh hạng 1 vào  $\varphi_n$ :

$$c_{ni} = \frac{H'_{in}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}; \quad (8)$$

$$\varphi_n^{(1)} = \sum_{i \neq n} \frac{H'_{in}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} \varphi_i^{(0)} + c_{nn} \varphi_n^{(0)}.$$

Ở đây, ta giả thiết rằng mọi bỏ đỉnh  $\{\varphi_n^{(s)}\}$  nằm trong không gian Hilbert được khai triển bởi các hàm sóng không nhiễu loạn  $\{\varphi_n^{(0)}\}$ .

Hệ số  $c_{nn}$  thu được từ (5):  $c_{nn} = 0$ .

Với  $j \neq n$ , (7) cho ta bỏ đỉnh hạng 1 vào năng lượng  $E_n$ :

$$E_n^{(1)} = H'_{nn} \quad (9)$$

(đó là các yếu tố chéo của  $\hat{H}'$ ).

Thay (8) và (9) vào (2) và đặt  $\lambda=1$  ta suy ra

$$\begin{aligned} \text{a) } \varphi_n &= \varphi_n^{(0)} + \sum_{i \neq n} \frac{H'_{in}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} \varphi_i^{(0)}, \\ \text{b) } E_n &= E_n^{(0)} + H'_{nn}. \end{aligned} \quad (10)$$

Từ (10a) ta suy ra: để khai triển (2) có nghĩa thì hệ số khai triển phải rất bé so với 1:

$$|H'_{in}| \ll |E_n^{(0)} - E_i^{(0)}|,$$

tức là các yếu tố ma trận của  $\hat{H}'$  phải bé so với độ chênh lệch giữa các mức năng lượng không nhiễu loạn tương ứng.

Tương tự, từ (10b) ta suy ra

$$|H'_{nn}| \ll E_n^{(0)},$$

tức là các yếu tố chéo của  $\hat{H}'$  phải bé so với mức năng lượng không nhiễu loạn tương ứng.

#### d) Bổ đính hạng 2

Giải (4c).

Do  $\hat{H}_0$  tác động lên  $\varphi_n^{(2)}$  nên ta có thể khai triển  $\varphi_n^{(2)}$  theo các trạng thái riêng của  $\hat{H}_0$ :

$$|\varphi_n^{(2)}\rangle = \sum_i d_{ni} |\varphi_i^{(0)}\rangle. \quad (11)$$

Thay (11) vào (4c)

$$\sum_i E_i^{(0)} d_{ni} |\varphi_i^{(0)}\rangle + \hat{H}' |\varphi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)} \sum_i d_{ni} |\varphi_i^{(0)}\rangle + E_n^{(1)} |\varphi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\varphi_n^{(0)}\rangle.$$

Nhân trái với  $\langle \varphi_j^{(0)} |$  ta được

$$(E_j^{(0)} - E_n^{(0)}) d_{nj} + \langle \varphi_j^{(0)} | \hat{H}' | \varphi_n^{(1)} \rangle = E_n^{(2)} \delta_{jn} + E_n^{(1)} \langle \varphi_j^{(0)} | \varphi_n^{(1)} \rangle, \quad (12)$$

$H'_{jn}$  là yếu tố ma trận của  $\hat{H}'$  trong biểu diễn  $\{\varphi_n^{(0)}\}$ .

Với  $j = n$  ta suy ra

$$E_n^{(2)} = \langle \varphi_n^{(0)} | \hat{H}' | \varphi_n^{(1)} \rangle = \sum_{i \neq n} \langle \varphi_n^{(0)} | \frac{\hat{H}' H'_{in}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} | \varphi_i^{(0)} \rangle = \sum_{i \neq n} \frac{H'_{ni} H'_{in}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}.$$

Do  $\hat{H}'$  écmít nên

$$E_n^{(2)} = \sum_{i \neq n} \frac{|H'_{ni}|^2}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} \quad (13)$$

(ta đã áp dụng kết quả  $c_m = 0$ ).

Thay (13) vào (2), kết hợp với (9) ta suy ra bổ đính hạng 2 cho năng lượng  $E_n$

$$E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn} + \sum_{i \neq n} \frac{|H'_{ni}|^2}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}. \quad (14)$$

Tiếp theo, ta tính bổ đính hạng 2 cho hàm sóng  $\varphi_n$ .

Ta phải xác định các hệ số  $d_{ni}$  trong (11). Các hệ số này được thu trực tiếp từ (12).

Với  $j \neq n$ , từ (12) ta suy ra

$$\begin{aligned} (E_n^{(0)} - E_j^{(0)})d_{nj} &= \left\langle \varphi_j^{(0)} \left| \hat{H}' \sum_{k \neq n} \frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \right| \varphi_k^{(0)} \right\rangle \\ &- H'_{nm} \left\langle \varphi_j^{(0)} \left| \sum_{k \neq n} \frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \right| \varphi_k^{(0)} \right\rangle. \end{aligned}$$

Trong tổng thứ 2, chỉ có số hạng  $k = j$  "sống sót".

Mọi số hạng trong tổng 1 tồn tại.

Do đó

$$d_{nj} = \frac{1}{E_n^{(0)} - E_j^{(0)}} \left( \sum_{k \neq n} \frac{H'_{jk} H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \right) - \frac{H'_{nm} H'_{jn}}{(E_n^{(0)} - E_j^{(0)})^2}.$$

Do (5) ta suy ra  $d_{nn} = 0$ .

Vậy hàm sóng  $\varphi_n$  tính tới bổ đính hạng 2 là

$$\begin{aligned} \varphi_n &= \varphi_n^{(0)} + \\ &+ \sum_{i \neq n} \left[ \frac{H'_{in}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} - \frac{H'_{im} H'_{in}}{(E_n^{(0)} - E_i^{(0)})^2} + \sum_{k \neq n} \frac{H'_{ik} H'_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_i^{(0)})(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \right] \varphi_i^{(0)}. \quad (15) \end{aligned}$$

### 6.3. Nhiễu loạn phụ thuộc thời gian

Lúc đầu, hệ không nhiễu loạn là một trạng thái riêng của  $\hat{H}_0$ . Sau đó, ta "bật" nhiễu loạn  $\hat{H}'(t)$ .

Ta hãy tính xác suất để sau thời gian  $t$  diễn ra sự chuyển sang trạng thái riêng khác của  $\hat{H}_0$ .

Toán tử Hamilton toàn phần

$$\hat{H}(\vec{r}, t) = \hat{H}_0(\vec{r}) + \lambda \hat{H}'(\vec{r}, t), \quad (16)$$

trong đó  $\lambda$  vô cùng bé.

Trạng thái riêng phụ thuộc thời gian của  $\hat{H}_0$  được viết như sau

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

$$\hat{H}_0 \varphi_n = E_n^{(0)} \varphi_n \equiv \hbar \omega_n \varphi_n. \quad (17)$$

Giả sử tại thời điểm  $t > 0$ , hệ ở trạng thái

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n(t) \psi_n(\vec{r}, t). \quad (18)$$

Theo nguyên lí chồng chất thì  $|c_n|^2$  là xác suất mà phép đo tìm thấy hệ ở trạng thái  $\psi_n$  tại thời điểm  $t$ . Ta hãy tính  $c_n$ .

$\psi(\vec{r}, t)$  là nghiệm của phương trình

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}') \psi. \quad (19)$$

Thay (18) vào (19) rồi nhân trái với  $\int d\vec{r} \psi_k^*(\vec{r}, t)$  ta được

$$i\hbar \frac{dc_k}{dt} = \lambda \sum_n \langle k | \hat{H}' | n \rangle c_n. \quad (20)$$

(20) là chuỗi vô hạn các phương trình đối với các hệ số  $\{c_k(t)\}$ .

Khi  $\lambda \rightarrow 0$ , các hệ số  $\{c_k(t)\}$  là hằng số. Do đó ta tìm các hệ số  $\{c_k(t)\}$  dưới dạng

$$c_k(t) = c_k^{(0)} + \lambda c_k^{(1)}(t) + \lambda^2 c_k^{(2)}(t) + \dots \quad (21)$$

Thay (21) vào (20) và cân bằng các số hạng cùng lũy thừa của  $\lambda$ :

$$\begin{aligned}
i\hbar \dot{c}_k^{(0)} &= 0, \\
i\hbar \dot{c}_k^{(1)} &= \sum_n H'_{kn} c_n^{(0)}, \\
i\hbar \dot{c}_k^{(2)} &= \sum_n H'_{kn} c_n^{(1)}, \\
&\dots \\
i\hbar \dot{c}_k^{(s+1)} &= \sum_n H'_{kn} c_n^{(s)}.
\end{aligned} \tag{22}$$

Trường hợp đặc biệt, ban đầu hệ là một trạng thái riêng xác định  $\psi_l(\vec{r}, t)$  của  $\hat{H}_0$ . Với (18), khi  $t \rightarrow -\infty$ , ta có

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{r}, t) &\sim \psi_l(\vec{r}, t) = \sum_n \delta_{nl} \psi_n(\vec{r}, t), \\
c_n^{(0)}(-\infty) &= \delta_{nl},
\end{aligned} \tag{23}$$

(“ban đầu” có nghĩa là  $t = -\infty$ ).

Thay vào phương trình thứ 2 của (22) (bỏ chỉ số trên <sup>(0)</sup> và <sup>(1)</sup>)

$$i\hbar \dot{c}_k(t) = \sum_n H'_{kn} c_n(-\infty) = H'_{kl}. \tag{24}$$

Với  $n \neq l$ ,  $c_n(-\infty) = 0$ , nghiệm bậc 1 của  $c_k(t)$  cho bởi

$$c_k(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t H'_{kl}(\vec{r}, t') dt'; \quad (k \neq l). \tag{25}$$

Nếu  $\hat{H}'(\vec{r}, t) = \hat{X}(\vec{r}) f(t)$  thì yếu tố ma trận của  $\hat{H}$  trở thành (áp dụng (17))

$$H'_{kl}(t) \equiv \langle \psi_k | \hat{H}'(\vec{r}, t) | \psi_l \rangle = \langle \varphi_k | \hat{X}(\vec{r}) | \varphi_l \rangle e^{i\omega_{kl}t} f(t) = X'_{kl} e^{i\omega_{kl}t} f(t) \tag{26}$$

trong đó

$$\hbar\omega_{kl} \equiv \hbar(\omega_k - \omega_l) = E_k - E_l,$$

(bỏ qua chỉ số trên <sup>(0)</sup> của  $E_k$  và  $E_l$ ).

Cuối cùng, ta có dạng cụ thể hơn của  $c_k(t)$ :

$$c_k(t) = \frac{X'_{kl}}{i\hbar} \int_{-\infty}^t e^{i\omega_{kl}t'} f(t') dt'. \quad (27)$$

Các hệ số này xác định ảnh hưởng của nhiễu loạn lên trạng thái đầu  $\psi_l$ .

Xác suất để hệ chuyển từ trạng thái đầu  $\psi_l$  tới một trạng thái riêng  $\psi_k$  khác của  $\hat{H}_0$  tại thời điểm  $t$  là

$$P_{l \rightarrow k} = |c_k|^2 = \left| \frac{X'_{kl}}{i\hbar} \int_{-\infty}^t e^{i\omega_{kl}t'} f(t') dt' \right|^2. \quad (28)$$



## Chương VII: Các nguyên tử một electron

### 7.1. Một số khái niệm cơ sở

#### a) Mômen xung lượng toàn phần $\vec{J}$

Ta biết rằng mômen xung lượng toàn phần của hệ (chẳng hạn nguyên tử hoặc electron) có cả mômen quỹ đạo  $\vec{L}$  và mômen spin  $\vec{S}$  được ký hiệu là  $\vec{J}$ .

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}. \quad (1)$$

Toán tử  $\hat{J}$  có các thành phần

$$\hat{J}_x = \hat{L}_x + \hat{S}_x; \quad \hat{J}_y = \hat{L}_y + \hat{S}_y; \quad \hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z. \quad (2)$$

Toán tử bình phương mômen xung lượng toàn phần là

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}\hat{S}. \quad (3)$$

Lưu ý rằng  $\hat{L}$  và  $\hat{S}$  giao hoán.

#### b) Liên kết $L-S$

Các electron riêng rẽ trong nguyên tử có cả mômen quỹ đạo và mômen spin. Trong các nguyên tử nhẹ, các vectơ mômen quỹ đạo của các electron riêng rẽ liên kết để tạo thành vectơ mômen quỹ đạo  $\vec{L}$  toàn phần và các vectơ mômen spin riêng rẽ liên kết để tạo thành vectơ mômen spin  $\vec{S}$  toàn phần. Sau đó 2 vectơ toàn phần này liên kết với nhau tạo thành vectơ mômen xung lượng toàn phần  $\vec{J}$ . Đây chính là sơ đồ liên kết Russel-Saunders hay liên kết  $L-S$ .

Các trạng thái riêng trong biểu diễn này là các trạng thái riêng đồng thời của 4 toán tử giao hoán

$$\{\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2\}. \quad (4)$$

Có 6 cặp toán tử trong tập này giao hoán với nhau:

$$\begin{aligned} \text{a) } & [\hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}\hat{S}, \hat{L}^2] = 0, \\ \text{b) } & [\hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}\hat{S}, \hat{S}^2] = 0, \\ \text{c) } & [\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0, \\ \text{d) } & [\hat{L}^2, \hat{J}_z] \equiv [\hat{L}^2, \hat{L}_z + \hat{S}_z] = 0, \\ \text{e) } & [\hat{S}^2, \hat{J}_z] \equiv [\hat{S}^2, \hat{L}_z + \hat{S}_z] = 0, \\ \text{f) } & [\hat{L}^2, \hat{S}^2] = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Các phương trình trị riêng liên hệ với các toán tử giao hoán (4)

là

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |jm, ls\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |jm, ls\rangle, \\ \hat{J}_z |jm, ls\rangle &= \hbar m_j |jm, ls\rangle, \\ \hat{L}^2 |jm, ls\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |jm, ls\rangle, \\ \hat{S}^2 |jm, ls\rangle &= \hbar^2 s(s+1) |jm, ls\rangle. \end{aligned} \quad (6)$$

Với mỗi giá trị xác định của  $j$  thì  $m_j$  nhận các giá trị nguyên từ  $-j$  đến  $+j$ .

Có một toán tử giao hoán với cả 4 toán tử (4), đó là  $\hat{L}\hat{S}$ :

$$\begin{aligned} \hat{L}\hat{S} |jm, ls\rangle &= \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) |jm, ls\rangle = \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] |jm, ls\rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

Trong biểu diễn  $L-S$ ,  $l$  và  $s$  xác định. Ta hãy tìm các giá trị khả dĩ của  $j$  tương ứng với các giá trị này của  $l$  và  $s$ . Do  $\hat{J}$  là

tổng của 2 vectơ  $\vec{L}$  và  $\vec{S}$  nên ta suy ra  $j$  nhận các giá trị nguyên, từ giá trị cực đại  $j_{\max} = l+s$  đến giá trị cực tiểu  $j_{\min} = |l-s|$ , nghĩa là

$$(l+s) \geq j \geq |l-s|,$$

hay

$$j = l+s, l+s-1, l+s-2, \dots, |l-s|+1, |l-s|.$$

Với  $s < l$  có tổng cộng  $(2s+1)$  giá trị của  $j$  tương ứng với các giá trị năng lượng khác nhau của nguyên tử.

Với các nguyên tử gồm một electron  $\left(s = \frac{1}{2}\right)$ , một trạng thái với  $l$  xác định tách thành một lưỡng tuyến tương ứng với 2 giá trị  $j = l + \frac{1}{2}$  và  $j = l - \frac{1}{2}$ . Các trạng thái này được kí hiệu là

$${}^{2s+1}\mathcal{L}_j$$

trong đó  $\mathcal{L}$  biểu thị chữ cái tương ứng với giá trị mômen xung lượng quỹ đạo  $l$  theo sơ đồ

|               |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |    |     |
|---------------|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|----|-----|
| $l$           | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | ... |
| $\mathcal{L}$ | S | P | D | F | G | H | I | K | L | M | N  | ... |

Các trạng thái của lưỡng tuyến P của nguyên tử gồm một electron được kí hiệu là

$${}^2P_{1/2}, {}^2P_{3/2}.$$

Các trạng thái của lưỡng tuyến F là

$${}^2F_{7/2}, {}^2F_{5/2}.$$

Đối với các nguyên tử gồm 2 electron, số lượng tử spin toàn phần hoặc bằng 0 hoặc bằng 1. Các giá trị này chính là các giá trị của  $s$  toàn phần tương ứng với phép cộng hai spin  $\frac{1}{2}$ . Hai giá trị này

của  $s$  tạo nên 2 loại phổ. Chẳng hạn, với He, giá trị  $s=0$  cho ta chuỗi đơn tuyến  $^1S, ^1P, ^1D\dots$ ; còn giá trị  $s=1$  cho ta chuỗi đơn tuyến  $^3S, ^3P, ^3D\dots$ . Các giá trị của  $j$  đối với các trạng thái  $^3D$  là  $j=1,2,3$ , tương ứng với các trạng thái  $^3D_1, ^3D_2, ^3D_3$ .

Một cách tổng quát, trạng thái bất kỳ với  $l>1$  sẽ trở thành tam tuyến

$$j = l+1, l, l-1.$$

Độ bội ứng với trường hợp  $s>l$  là  $2l+1$ . Nếu  $s = \frac{3}{2}$  và  $l=1$  ta có 3 giá trị của  $j$ :  $j = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$ . Kí hiệu cho trạng thái này vẫn là  $^4P_{5/2, 3/2, 1/2}$ , trong đó số 4 đặc trưng cho  $(2s+1)$ , mặc dầu thực tế độ bội là  $2l+1$ .

### c) Tương tác spin quỹ đạo

Tương tác giữa spin của electron hoá trị và trường Coulomb xuất hiện do chuyển động của electron trong trường Coulomb. Ta đã biết rằng, theo thuyết tương đối hẹp, khi người quan sát chuyển động với vận tốc  $\vec{v}$  cắt ngang các đường sức của điện trường tĩnh  $\vec{E}$  thì trong hệ quy chiếu gắn với người quan sát có từ trường

$$\vec{B} = -\gamma\vec{\beta} \times \vec{E}, \quad (8)$$

trong đó

$$\vec{\beta} \equiv \frac{\vec{v}}{c}, \quad \gamma^{-2} \equiv 1 - \beta^2. \quad (9)$$

Trong gần đúng bậc 1 theo  $\beta$  thì

$$\vec{\beta} = -\frac{\vec{v}}{c} \times \vec{E}. \quad (10)$$

Do đó, nếu một electron chuyển động với xung lượng  $\vec{p}$  cắt ngang điện trường  $\vec{E}$  thì electron sẽ chịu tác động của từ trường

$$\vec{p} = -\frac{\vec{p}}{mc} \times \vec{E}. \quad (11)$$

Năng lượng tương tác giữa  $\vec{\mu}$  và  $\vec{B}$  là  $V = -\frac{1}{2}\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ . Hệ số  $\frac{1}{2}$  là hệ số bổ chính Thomas, mô tả hiệu ứng tương đối tính bổ sung do sự gia tốc của electron.

## 7.2. Khảo sát bài toán nguyên tử một electron

### a) Xây dựng mô hình

Trong phần này ta khảo sát tương tác giữa spin của electron hoá trị trong các nguyên tử gồm một electron tương tác với trường Coulomb tạo bởi hạt nhân và các electron còn lại của nguyên tử. Trong các nguyên tử như vậy, ta xây dựng một mô hình, coi tất cả các electron, trừ một electron, bị đóng kín trong vỏ. Các electron “nằm trong nhân” này, cùng với hạt nhân, tạo nên một điện trường xuyên tâm, tác động lên electron hoá trị.

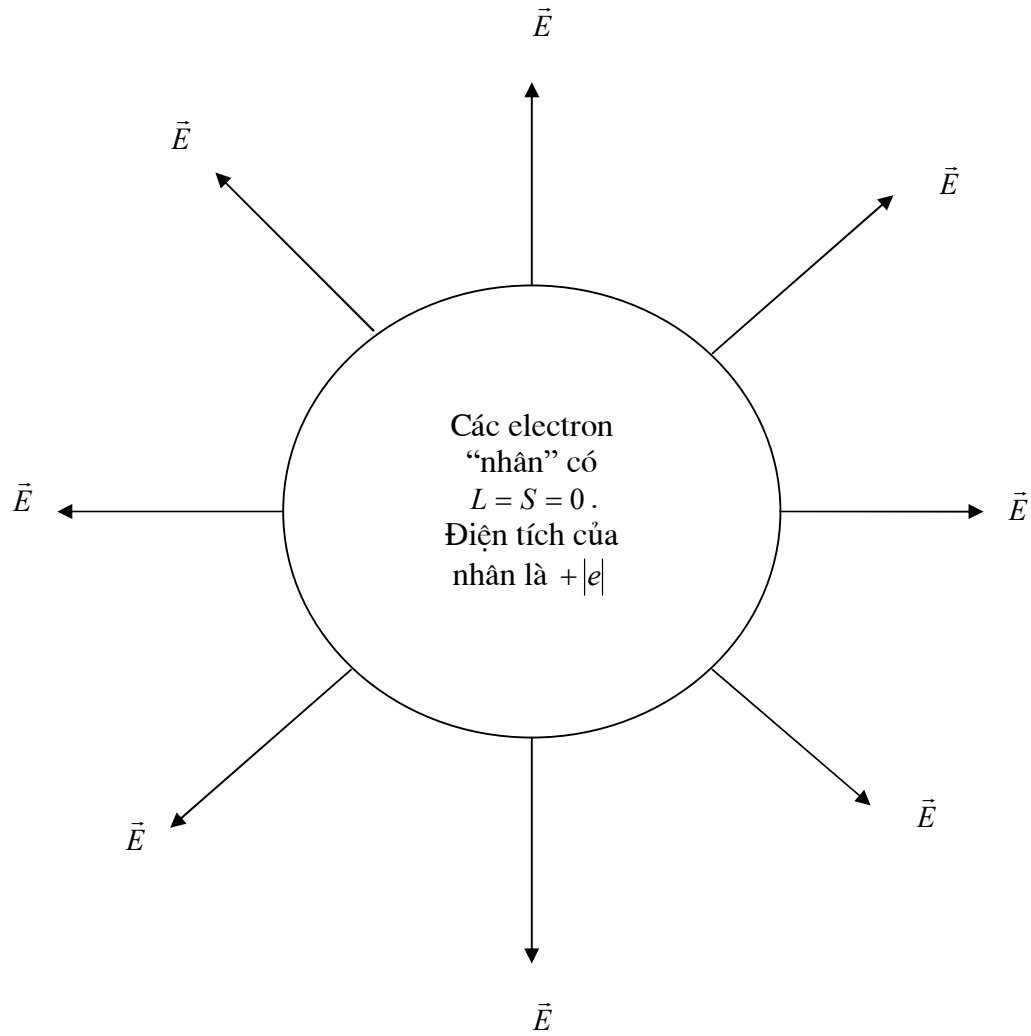
Ngoài ra, mômen xung lượng quỹ đạo và mômen spin của vỏ đóng bằng 0, bởi vậy mômen xung lượng của nguyên tử được xác định bởi electron hoá trị. Năng lượng tương tác giữa spin của electron và từ trường (11) là

$$H' = -\frac{1}{2}\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{1}{2}\vec{\mu} \cdot \left( \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{E} \right) = -\frac{1}{2} \frac{\vec{\mu}}{mc} \cdot (\vec{E} \times \vec{p}). \quad (12)$$

Ta khảo sát bài toán trong hệ toạ độ cầu. Trong hệ toạ độ này,  $\vec{E}$  chỉ có một thành phần khác không, đó là thành phần xuyên tâm, hai thành phần còn lại đều bằng 0:

$$E_r = -\frac{d}{dr}\Phi(r) \quad (13)$$

trong đó  $\Phi(r)$  là thế Coulomb tĩnh của electron hoá trị.



Thay biểu thức trên của  $\vec{E} = (E_r, 0, 0)$  vào (12) ta có

$$H' = \frac{1}{2} \frac{1}{mc} \left[ \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \Phi(r) \right] (\vec{r} \times \vec{p}) \cdot \vec{\mu}. \quad (14)$$

Ta đã biết mối liên hệ giữa mômen spin và mômen quỹ đạo từ là

$$\vec{\mu} = \left( \frac{e}{mc} \right) \vec{S} \quad (15)$$

và

$$\vec{r} \times \vec{p} = \vec{L}. \quad (16)$$

Từ 3 hệ thức trên ta suy ra

$$H' = \frac{e}{2m^2c^2} \left[ \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \Phi(r) \right] \hat{L} \cdot \hat{S} \equiv f(r) \hat{L} \cdot \hat{S}. \quad (17)$$

### b) Hàm sóng gần đúng

Bỏ qua tương tác  $L$ - $S$ , toán tử Hamilton của nguyên tử một electron có dạng

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r), \quad (18)$$

trong đó  $V = e\Phi$ ,  $\hat{L}$  là mômen quỹ đạo của electron hoá trị,  $p_r$  là thành phần xuyên tâm của xung lượng của electron hoá trị.

Các trạng thái riêng của  $\hat{H}_0$  có dạng nghiệm của bài toán nguyên tử hiđrô. Chúng được suy ra từ các trạng thái riêng của  $\hat{L}^2$  và các nghiệm của phương trình viết cho phân phụ thuộc  $r$

$$\left[ \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r). \quad (19)$$

Nếu kể cả tương tác spin – quỹ đạo (17), ta có toán tử Hamilton toàn phần

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r) + f(r) \hat{L} \cdot \hat{S}. \quad (20)$$

Viết lại tích  $\hat{L} \cdot \hat{S}$  theo  $\hat{J}^2, \hat{L}^2, \hat{S}^2$  (theo phương trình (3)), ta có

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{f(r)}{2} [\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2]. \quad (21)$$

Trong phần trước ta đã chứng tỏ rằng  $\{\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2\}$  tạo thành một tập các toán tử giao hoán. Do các toán tử này cũng giao hoán với  $\hat{H}_0$  nên các trạng thái riêng gần đúng của  $\hat{H}$  có thể được viết dưới dạng

$$|\varphi\rangle = |nl\rangle |jm_jls\rangle, \quad (22)$$

trong đó  $|nl\rangle$  biểu diễn thành phần xuyên tâm của các trạng thái riêng của  $\hat{H}_0$ :

$$\hat{H}_0|nl\rangle = E_n|nl\rangle. \quad (23)$$

Với nguyên tử hiđrô,  $|nl\rangle$  là nghiệm của phương trình xuyên tâm

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} + |E| \right] R = 0. \quad (24)$$

Các nghiệm đó chính là các đa thức Laguerre.

Thay (22) vào phương trình Schrodinger  $\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$ , trong đó  $\hat{H}$  được xác định theo (21), ta có

$$\left\{ E_n + \frac{\hbar^2}{2} f(r) \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \right\} |\varphi\rangle = E|\varphi\rangle. \quad (25)$$

Các nghiệm dưới dạng tích (22) không phải là trạng thái riêng của  $\hat{H}$  (nghĩa là  $\hat{H}|\varphi\rangle \neq$  hằng số  $\cdot E|\varphi\rangle$ ). Nhưng do bỏ đỉnh spin – quỹ đạo vào  $E_n$  bé so với  $E_n$  nên các nghiệm (22) là nghiệm gần đúng của  $\hat{H}$ . Ta có thể tìm các nghiệm gần đúng của  $\hat{H}$  bằng cách tính giá trị kỳ vọng của  $\hat{H}$  trong các trạng thái này:

$$E_{nj} = \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle = E_n + \frac{\hbar^2}{2} \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \langle f(r) \rangle_{nl}. \quad (26)$$

Với mỗi giá trị của  $l, j$  có thể nhận 2 giá trị  $l \pm \frac{1}{2}$  nên mỗi giá trị riêng của năng lượng ứng với một giá trị xác định của  $l$  tách thành một lưỡng tuyến khi kể tới tương tác spin – quỹ đạo.

Hai giá trị tương ứng của năng lượng là:



$$E^{(+)}_{nlj} \equiv E_{j=l+\frac{1}{2}} = E_n + \frac{\hbar^2}{2} l \langle f \rangle_{nl},$$

$$E^{(-)}_{nlj} \equiv E_{j=l-\frac{1}{2}} = E_n - \frac{\hbar^2}{2} (l+1) \langle f \rangle_{nl}. \quad (27)$$

Ta sử dụng biểu thức hàm sóng của nguyên tử hiđrô và giả sử thế năng  $V$  có dạng thế Coulomb  $V = -\frac{Ze^2}{r}$ , trong đó  $Z$  là số nguyên tử hiệu dụng.

Thay biểu thức thế năng nói trên vào biểu thức của  $f(r)$  ta được

$$f(r) = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} = \frac{Ze^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3}, \quad (28)$$

$$\langle f \rangle_{nl} = \frac{Ze^2}{2m^2c^2} \int_0^\infty \frac{|R_{nl}(r)|^2}{r^3} r^2 dr,$$

$$\frac{\hbar^2}{2n} \langle f \rangle_{nl} = \frac{(me^4 Z^2 / 2\hbar^2 n^2)^2}{mc^2 \left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)l}. \quad (29)$$

### c) Cấu trúc tinh tế của hiđrô

Từ biểu thức trị riêng năng lượng của nguyên tử hiđrô

$$|E_n| = \frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2 n^2} \quad (30)$$

và biểu thức (29) ta suy ra

$$\frac{\hbar^2 \langle f \rangle_{nl}}{|E_n|} = \frac{2n}{l \left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)} \frac{|E_n|}{mc^2} = \frac{(Z\alpha)^2}{n} \frac{1}{l \left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)}, \quad (31)$$

trong đó  $\alpha$  là hằng số cấu trúc tinh tế

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,037}, \quad \alpha^2 = 5,33 \cdot 10^{-5}.$$

Cuối cùng, thay (31) vào (27) ta được hai giá trị tương ứng của năng lượng là:

$$\begin{aligned} E^{(+)}_{nj} &= -|E_n| \left[ 1 - \frac{1}{(2l+1)(l+1)} \frac{(Z\alpha)^2}{n} \right], \\ E^{(-)}_{nj} &= -|E_n| \left[ 1 + \frac{1}{l(2l+1)} \frac{(Z\alpha)^2}{n} \right]. \end{aligned} \tag{32}$$

## Chương VIII: Cơ học ma trận

### 8.1. Cơ sở và biểu diễn

#### a) Cơ học ma trận

Trong  $A$  - biểu diễn, các trạng thái được mô tả theo một cơ sở tạo bởi các hàm riêng của  $\hat{A}$ .

Trong mọi biểu diễn ta đều có thể biểu diễn các toán tử và hàm sóng dưới dạng ma trận. Khi đó, các phương trình toán tử trở thành các phương trình ma trận. Ví dụ, phương trình toán tử  $\psi' = \hat{F}\psi$  trở thành phương trình ma trận trong đó các hàm  $\psi$  và  $\psi'$  được viết như các vectơ cột và toán tử  $\hat{F}$  được viết như một ma trận vuông.

#### b) Cơ sở

Các hàm sóng liên quan tới một bài toán Cơ học lượng tử nhất định phải thoả mãn một số điều kiện.

Với mỗi bài toán và mỗi tập các điều kiện, ta có một không gian hàm xác định.

Xét một bài toán cụ thể. Gọi  $\mathcal{H}$  là không gian hàm liên quan. Giả sử tập các hàm

$$B = \{\varphi_1, \varphi_2, \dots\}$$

là một cơ sở của  $\mathcal{H}$ . Ví dụ :

- Hạt trong hố thế 1 chiều sâu vô hạn:

$$B = \sqrt{\frac{2}{L}} \left\{ \sin \frac{\pi x}{L}, \sin \frac{2\pi x}{L}, \sin \frac{3\pi x}{L}, \dots \right\};$$

- Electron chuyển động trong nguyên tử hiđrô:

$$B = \{R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \varphi)\};$$

- Hạt chuyển động tự do trong hệ tọa độ cầu:

$$B = \{J_l(kr)Y_l^m(\theta, \varphi)\}.$$

Do B là một cơ sở của  $\mathcal{H}$  nên mọi hàm  $\psi$  trong  $\mathcal{H}$  có thể khai triển theo các hàm cơ sở  $\varphi_n$

$$\psi = \sum_n \varphi_n a_n,$$

hay, một cách tương đương,

$$|\psi\rangle = \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n | \psi \rangle. \quad (1)$$

Các hệ số khai triển  $a_n$  là hình chiếu của  $\psi$  lên các véctơ cơ sở.

Do các hệ số khai triển  $\{a_n\}$  tương đương với  $\psi$  nên ta có thể viết phương trình liên quan với  $\psi$  như là phương trình liên quan với  $\{a_n\}$ .

Xét phương trình

$$\psi = \hat{F}\psi' \text{ hay } |\psi\rangle = \hat{F}|\psi'\rangle. \quad (2)$$

Khai triển vế phải của (2) theo (1) và nhân trái với  $\langle \varphi_q |$

$$\langle \varphi_q | \psi \rangle = \sum_n \langle \varphi_q | \hat{F} | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \psi' \rangle, \quad (3)$$

hay, một cách tương đương,

$$a_q = \sum_n F_{qn} a'_n, \quad (4)$$

trong đó

$$F_{qn} \equiv \langle \varphi_q | \hat{F} | \varphi_n \rangle \quad (5)$$

được gọi là biểu diễn ma trận của toán tử  $\hat{F}$  trong cơ sở B hay yếu tố ma trận nối  $\varphi_q$  với  $\varphi_n$ .

Phương trình (4) liên quan chỉ các hệ số khai triển  $\{a_q\}$ ,  $\{a'_n\}$  và yếu tố ma trận  $\{F_{qn}\}$  tương đương với phương trình (2) liên quan các hàm sóng  $\psi$ ,  $\psi'$  và toán tử  $\hat{F}$ . Phương trình (4) được gọi là phương trình ma trận. Có thể viết phương trình đó dưới dạng

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Trong phương trình trên, hàm sóng  $\psi$  được biểu diễn bởi vectơ cột bên trái, hàm sóng  $\psi'$  được biểu diễn bởi vectơ cột bên phải

$$\psi \rightarrow \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \psi' \rightarrow \begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (7)$$

còn toán tử  $\hat{F}$  được biểu diễn bởi ma trận  $F_{qn}$

$$\hat{F} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Sự vô hạn chiều của các phương trình ma trận này là hệ quả của sự vô hạn chiều của không gian Hilbert.

### c) Sự chéo hoá của toán tử

Giả sử B là một cơ sở trực giao tạo bởi các hàm riêng trực giao của toán tử éc-mít  $\hat{G}$

$$\hat{G}\varphi_n = g_n\varphi_n. \quad (9)$$

Khi đó, các yếu tố ma trận của  $\hat{G}$  là

$$G_{qn} = \langle \varphi_q | \hat{G} | \varphi_n \rangle = g_n \langle \varphi_q | \varphi_n \rangle = g_n \delta_{qn}, \quad (10)$$

hay, một cách tường minh,

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} g_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & g_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & g_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Như vậy, ma trận của một toán tử trong một cơ sở tạo bởi các hàm riêng của toán tử ấy là ma trận chéo.

Véc tơ cột biểu diễn các hàm riêng  $\varphi_n$  là các hệ số  $\{a_q^{(n)}\}$  trong khai triển

$$|\varphi_n\rangle = \sum_q a_q^{(n)} |\varphi_q\rangle. \quad (11)$$

Nhân trái (11) với  $\langle\varphi_p|$  ta được

$$\delta_{pn} = \sum_q a_q^{(n)} \delta_{pq} = a_p^{(n)};$$

$$a_p^{(n)} = \delta_{pn}. \quad (12)$$

Như vậy biểu diễn ma trận của hàm riêng  $\varphi_n$  là một véc tơ cột với một thành phần khác 0 duy nhất ở khe thứ  $n$  :

$$\begin{aligned} \varphi_1 &\rightarrow \begin{pmatrix} a_1^{(1)} \\ a_2^{(1)} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}; & \varphi_2 &\rightarrow \begin{pmatrix} a_1^{(2)} \\ a_2^{(2)} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}; \\ \varphi_3 &\rightarrow \begin{pmatrix} a_1^{(3)} \\ a_2^{(3)} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}; & \varphi_4 &\rightarrow \begin{pmatrix} a_1^{(4)} \\ a_2^{(4)} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (13)$$

Phương trình trị riêng (9) được viết

$$\sum_q \langle \varphi_p | \hat{G} | \varphi_q \rangle \langle \varphi_q | \varphi_n \rangle = g_n \langle \varphi_p | \varphi_n \rangle,$$

hay

$$\sum_q G_{pq} a_q^{(n)} = g_n a_p^{(n)}. \quad (14)$$

Chẳng hạn, với  $a^{(3)}$

$$\begin{pmatrix} g_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & g_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & g_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = g_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Độ dài (bình phương) của véctơ  $\psi$  là

$$|\psi|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_q \langle \psi | \varphi_q \rangle \langle \varphi_q | \psi \rangle = \sum_q |a_q|^2. \quad (16)$$

Độ dài của các véctơ cơ sở trực giao  $\{\varphi_n\}$  là

$$|\varphi_n|^2 = \sum_q |a_q^{(n)}|^2 = 1.$$

Ví dụ, trong biểu diễn ma trận,

$$|\varphi_4|^2 = \langle \varphi_4 | \varphi_4 \rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = 1. \quad (18)$$

Giả sử toán tử  $\hat{G}$  chéo trong cơ sở  $\{\varphi_n\}$ :

$$G_{qn} = g_n \delta_{qn}, \quad (19)$$

hay, một cách tương đương,

$$\langle \varphi_p | \hat{G} | \varphi_n \rangle = g_n \langle \varphi_q | \varphi_n \rangle. \quad (20)$$

Nhân trái (20) với  $\sum_q |\varphi_q\rangle$ :

$$\sum_q |\varphi_q\rangle \langle \varphi_p | \hat{G} | \varphi_n \rangle = g_n \sum_q |\varphi_q\rangle \langle \varphi_q | \varphi_n \rangle, \quad (21)$$

hay

$$\hat{I}(\hat{G}|\varphi_n\rangle - g_n|\varphi_n\rangle) = 0, \quad (22)$$

nghĩa là

$$\hat{G}|\varphi_n\rangle = g_n|\varphi_n\rangle. \quad (23)$$

Như vậy, nếu toán tử  $\hat{G}$  là chéo trong cơ sở B thì B tạo bởi các véc tơ riêng của  $\hat{G}$ .

Bài toán tìm trị riêng của một toán tử tương đương với bài toán tìm một cơ sở chéo toán tử đó.



## Chương IX: Biểu diễn năng lượng

Ta đã biết rằng trong biểu diễn năng lượng, toán tử Hamilton có dạng chéo. Biểu diễn này bao gồm một cơ sở được tạo bởi các hàm riêng của toán tử  $\hat{H}$ .

### 9.1. Hố thế 1 chiều sâu vô hạn

Đối với bài toán một hạt chuyển động trong hố thế 1 chiều sâu vô hạn, cơ sở mà trong đó toán tử  $\hat{H}$  có dạng chéo là:

$$B = \sqrt{\frac{2}{L}} \left\{ \sin \frac{\pi x}{L}, \sin \frac{2\pi x}{L}, \sin \frac{3\pi x}{L}, \dots \right\}. \quad (1)$$

Dạng ma trận của toán tử  $\hat{H}$  trong biểu diễn này là

$$\hat{H} = E_1 \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 4 & & & 0 \\ & & 9 & & \\ & & & \dots & \\ 0 & & & & n^2 \\ & & & & & \dots \end{pmatrix}. \quad (2)$$

### 9.2. Dao động tử điều hoà 1 chiều

Với dao động tử điều hoà một chiều, cơ sở mà trong đó toán tử  $\hat{H}$  có dạng chéo là:

$$B = e^{-\frac{\xi^2}{2}} \{A_1 H_1(\xi), A_2 H_2(\xi), A_3 H_3(\xi), \dots\} = \{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \dots\}. \quad (3)$$

Ta dễ dàng tìm được dạng của các toán tử trong biểu diễn này như sau:

**a) Toán tử năng lượng  $\hat{H}$**

Dạng ma trận của toán tử  $\hat{H}$  trong biểu diễn này là

$$\hat{H} = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & & & & \\ & \frac{3}{2} & & & \\ & & \frac{5}{2} & & \\ & & & \frac{2n+1}{2} & \\ & 0 & & & \dots \end{pmatrix}. \quad (4)$$

**b) Toán tử tọa độ  $\hat{x}$  và toán tử xung lượng  $\hat{p}$**

Tính biểu diễn ma trận của toán tử tọa độ  $\hat{x}$  và toán tử xung lượng  $\hat{p}$  của dao động tử điều hoà một chiều trong biểu diễn năng lượng, với  $k$  và  $n$  là các số nguyên không âm, ta thu được:

$$\langle n|\hat{x}|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\beta}} \langle n|\hat{a} + \hat{a}^+|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\beta}} \left[ k^{\frac{1}{2}} \delta_{n,k-1} + (k+1)^{\frac{1}{2}} \delta_{n,k+1} \right], \quad (5)$$

$$\langle n|\hat{p}|k\rangle = \frac{m\omega_0}{\sqrt{2i\beta}} \langle n|\hat{a} - \hat{a}^+|k\rangle = \frac{m\omega_0}{\sqrt{2i\beta}} \left[ k^{\frac{1}{2}} \delta_{n,k-1} - (k+1)^{\frac{1}{2}} \delta_{n,k+1} \right]. \quad (6)$$

Từ đó, dạng ma trận của các toán tử tọa độ và xung lượng lần lượt là:

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2\beta}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 \\ & & & & \dots \end{pmatrix}; \quad (7)$$

$$\hat{p} = \frac{m\omega_0}{\sqrt{2i\beta}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 \\ \dots & & & & \end{pmatrix}. \quad (8)$$

### c) Các toán tử sinh, huỷ

Tương tự, tính biểu diễn ma trận của các toán tử sinh, huỷ trong biểu diễn năng lượng, lần lượt ta thu được:

$$a_{nk} = \langle n | \hat{a} | k \rangle = k^{\frac{1}{2}} \langle n | k-1 \rangle = k^{\frac{1}{2}} \delta_{n,k-1}, \quad (9)$$

$$a^+_{nk} = \langle n | \hat{a}^+ | k \rangle = (k+1)^{\frac{1}{2}} \langle n | k+1 \rangle = (k+1)^{\frac{1}{2}} \delta_{n,k+1}. \quad (10)$$

Dạng ma trận của các toán tử sinh và huỷ lần lượt là:

$$\hat{a}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 \\ \dots & & & & \end{pmatrix}; \quad (11)$$

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & & & & \end{pmatrix}. \quad (12)$$

**d) Toán tử số**

Cùng với toán tử Hamilton  $\hat{H} = \hbar\omega_0\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$ , toán tử số  $\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}$

cũng có dạng chéo trong biểu diễn năng lượng:

$$\begin{aligned}
 (\hat{N}) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 & \dots \\ & & & & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ & & & & & \dots \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 0 & & & & & 0 \\ & 1 & & & & \\ & & 2 & & & \\ & & & 3 & & \\ & & & & \dots & \\ 0 & & & & & n \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{13}$$

## Chương 10: Hình thức luận Dirac

### 10.1. Vectơ trạng thái

Trạng thái của vi hạt và toán tử là hai khái niệm cơ sở trong Vật lý lượng tử. Dirac đã đề xuất một hình thức luận chính xác và thuận tiện cho việc thực hiện các tính toán trong Vật lý lượng tử và viết các biểu thức Vật lý lượng tử. Theo kí hiệu Dirac, một vật thể tuân theo Vật lý lượng tử (thuần khiết) có thể được mô tả hoàn toàn bằng vectơ trạng thái của nó. Các vectơ trạng thái gồm hai loại: bra và ket. Các vectơ này chứa đựng các thông tin đồng nhất và là các vectơ liên hợp trong không gian Hilbert  $\mathcal{H}$ . Ket vectơ được viết là  $|\psi\rangle$ , trong đó chỉ số  $\psi$  xác định trạng thái. Vectơ liên hợp của ket được gọi là bra và được viết là  $\langle\psi|$ .

Một trạng thái có thể được khai triển theo tổ hợp tuyến tính của các trạng thái khác:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle. \quad (1)$$

trong đó  $c_n$  là số phức. Ta nói rằng trạng thái  $|\psi\rangle$  là chồng chất của các trạng thái  $|\varphi_n\rangle$ . Tích vô hướng của 2 vectơ trạng thái được viết như sau:

$$(|\psi\rangle, |\varphi\rangle) = \langle\psi|\varphi\rangle. \quad (2)$$

Vectơ liên hợp  $\langle\psi|$  là liên hợp écmít của ket vectơ tương ứng  $|\psi\rangle$ . Liên hợp écmít được kí hiệu là “+” và là một toán tử tuyến tính. Liên hợp của một số vô hướng  $c$ , toán tử tuyến tính  $\hat{A}$  và ket  $|\psi\rangle$

tương ứng là  $c^*$ ,  $\hat{A}^+$ ,  $\langle\psi|$ , trong đó “\*” kí hiệu phép lấy liên hợp phức. Chú ý rằng hai lần lấy liên hợp liên tục thì khử nhau.

Khi một tích vô hướng của các toán tử hay trạng thái được lấy liên hợp thì cả 2 thừa số được lấy liên hợp và thứ tự tương hỗ của chúng bị đảo ngược:

$$\langle\varphi|\psi\rangle^+ = \langle\psi|\varphi\rangle. \quad (3)$$

Trong trường hợp đặc biệt, vì tích vô hướng là một số phức, ta có thể đơn giản hoá biểu thức:

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^*. \quad (4)$$

Khi lấy liên hợp một tích có nhiều hơn hai thừa số, ta chỉ việc áp dụng liên tiếp quy tắc nói trên:

$$(\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle)^+ = \langle\psi|(\langle\varphi|\hat{A})^+ = \langle\psi|\hat{A}^+|\varphi\rangle. \quad (5)$$

Khác với các vectơ trong không gian  $\mathcal{R}^n$ , thừa số nhân của vectơ trạng thái không có ý nghĩa. Do đó  $|\psi\rangle$  và  $c|\psi\rangle$ , trong đó  $c$  là số phức khác 0, biểu diễn cùng một trạng thái. Theo quy ước (và để đơn giản hoá việc diễn tả xác suất của vectơ trạng thái), ta dùng các vectơ trạng thái đã chuẩn hoá, nghĩa là

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1. \quad (6)$$

Bởi vậy, mỗi trạng thái tương ứng với một vectơ trạng thái duy nhất (không kể một thừa số pha tầm thường).

Xác suất tìm thấy hạt (được mô tả bởi vectơ trạng thái  $|\psi\rangle$ ) ở trạng thái  $|\phi_n\rangle$  được tính theo công thức

$$0 \leq |\langle\psi|\phi_n\rangle|^2 \leq 1. \quad (7)$$

Hai trạng thái được gọi là trực giao nếu

$$\langle \psi | \phi \rangle = 0 \quad (8)$$

và hai trạng thái được gọi là đồng nhất nếu

$$|\langle \psi | \phi \rangle| = 1. \quad (9)$$

Giả sử tất cả các trạng thái trong tập  $\{|\phi_n\rangle\}$  trực giao. Với những điều kiện nhất định, một trạng thái bất kỳ có thể được biểu diễn theo tổ hợp của các trạng thái cơ sở này. Khi đó tập  $\{|\phi_n\rangle\}$  là một cơ sở trực giao đủ. Từ (1) và (7) ta thấy rằng xác suất tìm thấy hạt ở trạng thái  $|\phi_n\rangle$  là  $|c_n|^2$ , nghĩa là bằng bình phương môđun của hệ số khai triển của trạng thái của hạt.

## 10.2. Các trạng thái số

Vào đầu thế kỉ 20 các nhà vật lí phát hiện ra rằng phổ phát xạ nhiệt điện từ có thể được giải thích nếu ta giả sử rằng trường điện từ bị lượng tử hoá theo các đơn vị năng lượng  $h\nu$ , trong đó  $h$  là hằng số Planck và  $\nu$  là tần số. Nhận xét này sau đó được bổ sung bởi sự quan sát hiệu ứng quang điện.

Sau đó, đơn vị lượng tử của năng lượng điện từ được gọi là photon. Vì năng lượng là đại lượng quan sát được nên nó liên quan với một toán tử écmít và một tập hợp đủ các trạng thái riêng. Do năng lượng của các trạng thái như thế được viết là  $\left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu$ , trong đó  $n = 0, 1, 2, \dots$  là số lượng tử năng lượng điện từ trong mode, nên các trạng thái riêng của năng lượng điện từ thường được viết là  $\{|n\rangle\}$  và được gọi là các trạng thái số hoặc trạng thái Fock.

Trạng thái  $|0\rangle$  là trạng thái điện từ cơ sở và thường được xem là trạng thái chân không.

Do các trị riêng không suy biến nên các trạng thái số trực giao. Ngoài ra, vì các trạng thái là chuẩn hoá nên ta có:

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}. \quad (10)$$

Cơ sở gồm các trạng thái số là một cơ sở đủ và thuận tiện để khai triển các trạng thái khác nhau của trường điện từ.

### 10.3. Toán tử tuyến tính

Động lực học của tất cả các đại lượng vật lí của các hạt hay hệ hạt tuân theo Vật lý lượng tử được mô tả bởi tác động của các toán tử tuyến tính. Toán tử thường được kí hiệu bằng một chữ cái có dấu “^”. Nói chung, khi một toán tử tác động lên một trạng thái sẽ cho ta một trạng thái khác:

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle. \quad (11)$$

Thứ tự giữa một toán tử và một trạng thái, cũng như thứ tự giữa các toán tử khác nhau là quan trọng vì đại số toán tử không giao hoán. Toán tử tác động lên kết từ bên phải và tác động lên bra từ bên trái. Ta chỉ cần định nghĩa tác động của một toán tử (và liên hợp của nó) lên kết từ vì tác động của toán tử liên hợp lên bra được định nghĩa bởi biểu thức

$$\langle\psi|\hat{A}^+ \equiv (\hat{A}|\psi\rangle)^+. \quad (12)$$

Tích ngoài của 2 trạng thái  $|\psi\rangle$  và  $|\phi\rangle$  được định nghĩa là

$$|\psi\rangle\langle\phi|. \quad (13)$$

Tích ngoài của 2 trạng thái  $|\psi\rangle$  và  $|\phi\rangle$  là một toán tử, khác với tích trong là một số phức.

Toán tử đồng nhất  $\hat{I}$  được định nghĩa là



$$\hat{I}|\psi\rangle = |\psi\rangle \quad (14)$$

với mọi  $|\psi\rangle$  thuộc  $\mathcal{H}$ .

Ta có thể viết toán tử đồng nhất ở dạng cụ thể hơn như sau: Nếu tập hợp các trạng thái  $\{|\phi_n\rangle\}$  biểu diễn một cơ sở trực giao đầy đủ thì toán tử đồng nhất có thể viết dưới dạng

$$\hat{I} \equiv \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|. \quad (15)$$

Do tác động của toán tử coi như được biết nếu biết tác động của toán tử lên mỗi trạng thái cơ sở nên mọi trạng thái có thể được diễn tả như là tổng các tích ngoài. Nghĩa là nếu

$$\hat{A}|\phi_n\rangle = \sum_m a_{mn}|\phi_m\rangle \quad (16)$$

thì

$$\hat{A} = \sum_{m,n} a_{mn} |\phi_m\rangle\langle\phi_n|. \quad (17)$$

Toán tử tuyến tính thoả mãn

$$\hat{A}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\hat{A}|\psi_1\rangle + c_2\hat{A}|\psi_2\rangle. \quad (18)$$

Ngoài ra

$$(\hat{A} + \hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle + \hat{B}|\psi\rangle. \quad (19)$$

Toán tử nghịch đảo của toán tử  $\hat{A}$ , được kí hiệu là  $\hat{A}^{-1}$  và được định nghĩa là

$$\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{I}. \quad (20)$$

Toán tử  $\hat{U}$  được gọi là unita nếu toán tử liên hợp của nó bằng toán tử nghịch đảo của nó, nghĩa là

$$\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1} \text{ hay } \hat{U}\hat{U}^+ = \hat{U}^+\hat{U} = \hat{I}. \quad (21)$$

Giao hoán tử của các toán tử  $\hat{A}$  và  $\hat{B}$  được định nghĩa là

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (22)$$

Nếu giao hoán tử bằng 0 thì các toán tử giao hoán. Từ định nghĩa giao hoán tử ta suy ra rằng mọi toán tử giao hoán với chính nó và giao hoán với toán tử đồng nhất. Từ định nghĩa giao hoán tử ta suy ra

$$[\hat{B}, \hat{A}] = -[\hat{A}, \hat{B}]. \quad (23)$$

Nếu hai toán tử  $\hat{A}$  và  $\hat{B}$  không giao hoán thì nói chung

$$\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle \neq \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle. \quad (24)$$

Tuy nhiên ngay cả khi  $\hat{A}$  và  $\hat{B}$  không giao hoán, ta vẫn có thể tìm thấy các trạng thái xác định mà khi đó giao hoán tử bằng 0. Đại số không giao hoán làm cho vật lý lượng tử phong phú hơn về mặt hiện tượng luận so với vật lý cổ điển, nhưng tính toán phức tạp hơn. Ngoài ra, các toán tử không giao hoán được dùng để biểu diễn các đại lượng vật lý dẫn tới các khái niệm bổ sung và bất định trong vật lý lượng tử.

Trạng thái riêng  $|E_n\rangle$  và trị riêng  $\lambda_n$  của toán tử  $\hat{A}$  thoả mãn

$$\hat{A}|E_n\rangle = \lambda_n|E_n\rangle \quad (25)$$

trong đó  $\lambda_n$  nói chung là phức.

Mọi đại lượng vật lý quan sát được đều tương ứng với một toán tử écmít. Định nghĩa của toán tử écmít là

$$\hat{O}^+ = \hat{O}. \quad (26)$$

Điều này dẫn tới kết quả rằng các trị riêng của toán tử écmít là thực. Ngoài ra, các trạng thái riêng ứng với các trị riêng khác nhau là trực giao. Nếu tất cả các trị riêng đều không trùng nhau thì tập hợp tất cả các trạng thái riêng đã chuẩn hoá  $\{|E_n\rangle\}$  xác định một cơ sở trực giao đủ. Ta đã biết rằng các trạng thái số, là các trạng thái riêng

của toán tử năng lượng (écmít)  $h\nu\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right)$  tạo nên một cơ sở trực giao đủ bao gồm các véctơ trạng thái.

Khi đo một đại lượng vật lí tương ứng với toán tử écmít  $\hat{O}$  ta sẽ thu được một trong số các trị riêng của toán tử như là đầu ra của máy đo. Xác suất thu được một giá trị cụ thể  $\lambda_n$  khi đo trạng thái  $|\psi\rangle$  là

$$P_n = |\langle E_n | \psi \rangle|^2. \quad (27)$$

Do đó, kết quả đo của một trạng thái cụ thể nói chung là không xác định. Tuy nhiên, nếu phép đo thu được kết quả là  $\lambda_n$  thì trạng thái của hệ “rơi” vào trạng thái riêng  $|E_n\rangle$ . Phép đo trạng thái ngay sau đó chắc chắn thu được kết quả  $\lambda_n$ .

Do kết quả phép đo trong vật lý lượng tử nói chung là không xác định nên vật lý lượng tử phải được mô tả một cách thống kê. Giá trị kì vọng của một toán tử, khi trạng thái là  $|\psi\rangle$ , là

$$\langle \hat{A} \rangle \equiv \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_n P_n \lambda_n = \sum_n |\langle E_n | \psi \rangle|^2 \lambda_n = \sum_n |c_n|^2 \lambda_n \quad (28)$$

Trong đó ta đã áp dụng (26) và  $c_n \equiv \langle E_n | \psi \rangle$  là hệ số khai triển của véctơ trạng thái trong cơ sở trạng thái  $\{|E_n\rangle\}$ .

Khi tính một biểu thức có dạng  $\langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle$  ta có thể cho toán tử  $\hat{A}$  tác động về bên phải lên  $|\phi\rangle$  rồi sau đó lấy tích vô hướng của  $\langle \psi |$  với kết quả thu được. Ta cũng có thể cho toán tử  $\hat{A}$  tác động về bên trái lên  $\langle \psi |$  rồi lấy tích vô hướng của kết quả này với  $|\phi\rangle$ . Kết quả thu được, nói chung là một số phức, sẽ như nhau trong hai trường hợp.

Toán tử mật độ  $\hat{\rho}$  là một toán tử quan trọng trong vật lý lượng tử. Đối với trạng thái thuần khiết, toán tử mật độ đơn giản chỉ là tích

ngoài của véctơ trạng thái, nghĩa là  $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ . Toán tử mật độ có dạng đối xứng, thuận tiện có việc áp dụng trong đại số toán tử. Giá trị kỳ vọng của một toán tử là

$$\langle\hat{A}\rangle = Tr\{|\psi\rangle\langle\psi|\hat{A}\}. \quad (29)$$

$Tr$  kí hiệu việc lấy vết và được tính bằng cách khai triển trạng thái  $|\psi\rangle$  theo một cơ sở trực giao đủ bất kỳ và lấy tổng theo các phân tử chéo:

$$Tr\{|\psi\rangle\langle\psi|\hat{A}\} = \sum_n \langle E_n | \psi \rangle \langle \psi | \hat{A} | E_n \rangle = \sum_n |c_n|^2 \lambda. \quad (30)$$

Có thể chứng minh được rằng

$$Tr\{\hat{\rho}\} = 1 \quad (31)$$

và

$$Tr\{\hat{A}\hat{B}\hat{C}\} = Tr\{\hat{B}\hat{C}\hat{A}\}. \quad (32)$$

#### 10.4. Toán tử sinh và huỷ

Dùng cơ sở trạng thái số  $\{|n\rangle\}$  ta có thể định nghĩa toán tử huỷ  $\hat{a}$  như sau:

$$\hat{a}|0\rangle = 0, \quad (33)$$

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (34)$$

Tương tự, toán tử sinh  $\hat{a}^+$  được định nghĩa:

$$\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad \forall n. \quad (35)$$

Ta cũng có thể định nghĩa toán tử sinh theo tích ngoài của các trạng thái số:

$$\hat{a}^+ \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1} |n+1\rangle\langle n|. \quad (36)$$

Các toán tử sinh và huỷ là khác nhau và không phải là toán tử écmít. Các toán tử này không tương ứng với bất cứ đại lượng vật lí nào trong quang học lượng tử. Tuy nhiên, có thể chứng minh được rằng các toán tử được tạo bởi tích của chúng,  $\hat{a}^+\hat{a}$  và  $\hat{a}\hat{a}^+$ , đều là écmít. Áp dụng các định nghĩa nói trên của các toán tử sinh và huỷ, ta dễ dàng chứng minh được rằng  $\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle$ . Từ đó, toán tử năng lượng của một mode phải là  $\hat{E} = h\nu\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$ . Toán tử  $\hat{n} = \hat{a}^+\hat{a}$  được gọi là toán tử số. Ta có thể dùng toán tử sinh và huỷ để diễn tả (hoặc sinh) một trạng thái từ chân không:

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle. \quad (37)$$

Do  $\{|n\rangle\}$  là một tập cơ sở đầy đủ nên mọi trạng thái  $|\psi\rangle$  bất kì có thể được sinh ra từ chân không:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle. \quad (38)$$

Ta thấy rằng

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] |n\rangle = \hat{a}\hat{a}^+ |n\rangle - \hat{a}^+\hat{a} |n\rangle = (n+1)|n\rangle - n|n\rangle = |n\rangle \quad (39)$$

với mọi  $n$ , nghĩa là

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{I} = 1. \quad (40)$$

Do đó, các toán tử écmít  $\hat{a}\hat{a}^+$  và  $\hat{a}^+\hat{a}$  liên hệ với nhau theo hệ thức  $\hat{a}\hat{a}^+ = \hat{a}^+\hat{a} + 1$ . Ý nghĩa của các toán tử  $\hat{a}\hat{a}^+$  và  $\hat{a}^+\hat{a}$  trong Quang học lượng tử là: Toán tử  $\hat{a}^+\hat{a}$  tương ứng với một phép đo số photon (hoặc năng lượng) bởi một máy đo hấp thụ trong khi đó toán tử  $\hat{a}\hat{a}^+$  tương ứng với cùng phép đo bởi một máy đo phát xạ. Máy đo phát xạ

nhạy ngay cả với trạng thái chân không (bởi phát xạ tự phát) trong khi đó máy đo hấp thụ không có đặc điểm đó.

### 10.5. Các toán tử cầu phương

Bằng cách tổ hợp tuyến tính các toán tử sinh và huỷ ta có 2 toán tử cầu phương

$$\hat{a}_1 \equiv \frac{1}{2}(\hat{a} + \hat{a}^+), \quad (41)$$

$$\hat{a}_2 \equiv \frac{1}{2i}(\hat{a} - \hat{a}^+). \quad (42)$$

Các toán tử cầu phương  $\hat{a}_1$  và  $\hat{a}_2$  là écmít và tương ứng với phép đo các thành phần đồng pha và ngược pha của trường điện. Để làm rõ điều này, ta hãy nhìn vào kí hiệu (phức) cổ điển của trường điện. Một trường điện (bằng hợp) với tần số góc  $\omega$  được kí hiệu là  $E^{-i\omega t}$ . Tuy nhiên, điện trường thực được cho bởi  $\text{Re}\{E^{-i\omega t}\} = \text{Re}\{E\}\cos(\omega t) + \text{Im}\{E\}\sin(\omega t)$ . Do đó, điện trường được tách một cách duy nhất theo các thành phần cầu phương thay đổi chậm  $\text{Re}\{E\} = (E + E^*)/2$  và  $\text{Im}\{E\} = (E - E^*)/(2i)$ . Các toán tử tương ứng là  $\hat{a}_1$  và  $\hat{a}_2$  và các toán tử này tương ứng với một phép đo homodyne hoàn hảo.

Vì điện trường là một đại lượng quan sát được và có giá trị liên tục nên các trị riêng của các trạng thái riêng tương ứng có phổ liên tục.

Do  $\hat{a}_1$  và  $\hat{a}_2$  là tổ hợp tuyến tính của các toán tử  $\hat{a}$  và  $\hat{a}^+$  nên mọi toán tử được tạo bởi các tổ hợp của  $\hat{a}$  và  $\hat{a}^+$  có thể được biểu diễn theo  $\hat{a}_1$  và  $\hat{a}_2$ . Ta có thể chứng minh được rằng toán tử năng lượng  $\hat{E}$  có thể được viết dưới dạng  $\hat{E} = h\nu(\hat{a}_1^2 + \hat{a}_2^2)$ . Các toán tử cầu phương  $\hat{a}_1$  và  $\hat{a}_2$  không giao hoán. Từ hệ thức  $[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{I} = 1$  ta tính được giao hoán tử của các toán tử cầu phương  $\hat{a}_1$  và  $\hat{a}_2$ :

$$[\hat{a}_1, \hat{a}_2] = \frac{i}{2}. \quad (43)$$

### 10.6. Trạng thái kết hợp

Mặc dù toán tử  $\hat{a}$  không phải là écmít song nó có một tập đủ các trạng thái riêng kết hợp. Trạng thái kết hợp được kí hiệu là  $|\alpha\rangle$ , trong đó  $\alpha$  là một số phức. Phương trình định nghĩa của trạng thái kết hợp là

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (44)$$

trong đó  $\alpha$  là số phức.

Biểu thức khai triển theo trạng thái số của trạng thái kết hợp là

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (45)$$

Các trạng thái kết hợp ứng với  $\alpha=1,2,\dots$  phải được đánh số sao cho có thể phân biệt với các trạng thái số  $|1\rangle, |2\rangle, \dots$ . Tuy nhiên, từ biểu thức khai triển của  $|\alpha\rangle$ , ta thấy rằng  $\alpha=0$  biểu diễn trạng thái cơ bản của trường điện từ, tức là trạng thái chân không.

Xác suất tìm thấy  $n$  photon trong trạng thái kết hợp  $|\alpha\rangle$  là

$$P_n = \langle n|\alpha\rangle \langle \alpha|n\rangle = \left| e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \right|^2 = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}. \quad (46)$$

Như vậy số photon đếm được tuân theo thống kê Poisson. Từ đó ta chứng minh được giá trị kì vọng và độ lệch của số photon là

$$\langle \hat{n} \rangle = \langle (\Delta \hat{n})^2 \rangle = |\alpha|^2, \quad (47)$$

trong đó toán tử  $\Delta \hat{n}$  được định nghĩa là  $\Delta \hat{n} \equiv \hat{n} - \langle \hat{n} \rangle$ .

Ánh sáng từ một nguồn laser tốt thông thường gần như ở trạng thái kết hợp với những khoảng thời gian đo bé hơn thời gian kết hợp của laser.

Từ các hệ thức giao hoán đã biết, kết hợp với kết quả: nếu  $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$  thì  $\langle\alpha|\hat{a}^+ = \langle\alpha|\alpha^*$ , ta có thể suy ra giá trị kì vọng của các toán tử  $\hat{a}_1$  và  $\hat{a}_2$  như sau:

$$\langle\hat{a}_1\rangle = \text{Re}\{\alpha\}; \quad \langle\hat{a}_2\rangle = \text{Im}\{\alpha\} \quad (48)$$

$$\text{và} \quad \langle\Delta\hat{a}_1^2\rangle = \langle\Delta\hat{a}_2^2\rangle = \frac{1}{4}; \quad (49)$$

đối với trạng thái kết hợp  $|\alpha\rangle$ .

### 10.7. Mode và trạng thái. Trạng thái đa mode

Việc phân biệt mode và trạng thái là quan trọng. Mode mô tả các mode dao động, quay của một số hệ, trong khi đó vectơ trạng thái mô tả sự kích thích của các mode này. Với trường điện từ, các mode được cho bởi nghiệm của các phương trình Maxwell (và các điều kiện liên quan), trong khi các trạng thái được cho bởi nghiệm của phương trình Schrodinger (và các điều kiện ban đầu). Mỗi mode có một không gian Hilbert tương ứng và toán tử tương ứng duy nhất. Cho đến nay ta mới làm việc với các trạng thái đơn mode. Để mô tả các trạng thái đa mode, chẳng hạn một mode điện từ ở trạng thái chân không  $|0\rangle$ , và một nguyên tử hai mức ở trạng thái kích thích  $|e\rangle$ , ta viết:

$$|0\rangle \otimes |e\rangle = |e\rangle \otimes |0\rangle = |0, e\rangle \quad (50)$$

trong đó  $\otimes$  là kí hiệu tích tensor và  $|0, e\rangle$  là kí hiệu đơn giản của tích tensor của các trạng thái. Khi viết bra liên hợp với trạng thái này,



thứ tự kí hiệu của các mode thường không thay đổi. Do đó  $|0,e\rangle^+ = \langle 0,e|$ . Giả sử rằng mode điện từ có một số toán tử liên hợp  $\hat{E}$  và nguyên tử có toán tử  $\hat{A}$ . Vì  $\hat{E}$  và  $\hat{A}$  tác động lên các không gian Hilbert khác nhau nên chúng giao hoán. Ngoài ra

$$\hat{E}\hat{A}|0\rangle \otimes |e\rangle = (\hat{E}|0\rangle) \otimes (\hat{A}|e\rangle). \quad (51)$$

Nếu các mode là tương tự, chẳng hạn hai mode điện từ tương tự, chỉ khác nhau về mặt không gian, thì chúng thường có cùng tập các toán tử tương ứng. Trong trường hợp này nói chung cần phải kí hiệu chỉ số các toán tử để chỉ rõ toán tử nào tác động lên mode nào.

### 10.8. Các trạng thái vướng víu

Tổ hợp tuyến tính là một khái niệm cơ bản trong vật lý lượng tử. Ở phần trước ta đã đề cập đến các trạng thái chồng chập. Tuy nhiên, sự kết hợp của các trạng thái đa mode và các trạng thái chồng chập dẫn tới hệ quả rằng Cơ học lượng tử là một lí thuyết không định xứ.

- Giả sử chúng ta có 2 mode điện từ nằm trong trạng thái chồng chập của một trạng thái không photon (trạng thái chân không) và một trạng thái một photon. Ta có thể biểu diễn trạng thái đó dưới dạng

$$\left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}\right) \otimes \left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}\right) = \frac{1}{2}(|0,0\rangle + |1,0\rangle + |0,1\rangle + |1,1\rangle). \quad (52)$$

Ta thấy rằng trạng thái chung là tích tenxơ của 2 trạng thái đơn mode. Do đó, nếu ta đo số photon của mode thứ nhất thì xác suất đo được 0 photon là  $\frac{1}{2}$ , và trong trường hợp này trạng thái sau khi đo trở thành

$$|0\rangle \otimes (|0\rangle + |1\rangle) / \sqrt{2}. \quad (53)$$

Trong các trường hợp còn lại ta sẽ đo được số photon của mode thứ nhất bằng 1 và trạng thái sẽ rơi về trạng thái  $|1\rangle \otimes (|0\rangle + |1\rangle) / \sqrt{2}$ . Ta thấy rằng trạng thái của mode thứ hai không bị ảnh hưởng bởi đầu ra của phép đo của mode thứ nhất.

- Có một khả năng khác để tạo nên một trạng thái chồng chập mà ở đó có cả 2 mode đều là trạng thái chồng chập của các trạng thái 0 và 1 photon, đó là trạng thái

$$(|1,0\rangle + |0,1\rangle) / \sqrt{2}. \quad (54)$$

Trạng thái này không thể biến đổi được thành một trạng thái tích của 2 mode. Trạng thái như thế được gọi là trạng thái vướng víu. Nếu ta đo số photon của mode thứ nhất thì trong một nửa số trường hợp ta sẽ đo được 0 photon. Trong trường hợp này trạng thái chung sẽ rơi vào trạng thái  $|0,1\rangle$ . Nếu, ngược lại, ta đo mode thứ nhất chứa 1 photon thì trạng thái chung sẽ rơi vào trạng thái  $|1,0\rangle$ . Như vậy, trạng thái sau khi đo của mode thứ hai phụ thuộc kết quả đo của mode thứ nhất. Sự biến đổi trạng thái là tức thời. Vì vậy, ngay cả khi 2 mode bị tách xa nhau bởi các khoảng cách lớn, trạng thái của mode thứ hai sẽ phản ứng tức thời với sự “sụp đổ” của trạng thái của mode thứ nhất. Do đó vật lí lượng tử được xem là một lí thuyết không định xứ. Ngoài ra, do các trạng thái sau khi đo  $|0,1\rangle$  và  $|1,0\rangle$  là trực giao nên trạng thái chung (54) được gọi là trạng thái có mức vướng víu lớn nhất.

Vướng víu tạo nên cốt lõi của ngành khoa học mới là thông tin lượng tử. Người ta cho rằng vướng víu có thể được áp dụng để giải quyết một số nhiệm vụ như chuyển vận lượng tử, tính toán lượng tử... là những nhiệm vụ không thể thực hiện được nếu dùng các đối

tượng cổ điển. Ngược lại, trong máy tính lượng tử, không thể tránh khỏi việc tạo ra các trạng thái vướng víu vì tất cả các thuật toán tính toán lượng tử đều áp dụng nguyên lý chồng chập (chẳng hạn các cổng CNOT) để tăng hiệu suất tính toán so với các máy tính cổ điển. Bởi vậy, việc tạo ra, nhân và phân loại các trạng thái vướng víu là vấn đề trung tâm của quang học lượng tử trong hàng chục năm qua.

### 10.9. Các trạng thái thuần khiết và trộn lẫn

Nói chung, luôn có sự tương tác giữa các mode, dù ta có muốn hay không muốn. Ta thường phải đối mặt với sự thực là không thể điều khiển hoặc đo một số lớn các mode vì như ta đã thấy ở phần trên, vật lý lượng tử là lý thuyết không định xứ, nghĩa là trạng thái của một số mode phụ thuộc trạng thái của một hoặc nhiều mode khác.

Trong trường hợp này có một cách để giải quyết vấn đề đó là viết toán tử mật độ của toàn hệ và loại các trạng thái không mong muốn. Điều này giúp ta có được một cách mô tả đúng về đầu ra của một chuỗi phép đo hoặc tác động lên hệ, hiểu theo nghĩa trung bình tập hợp.

- Giả sử rằng ta quan tâm đến mode thứ hai trong (52). Trong trường hợp này toán tử mật độ của hệ trở thành

$$\text{Tr}_1\{\hat{\rho}\} = \sum_n \langle n_1 | \hat{\rho} | n_1 \rangle = (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 1|) / 2 \quad (55)$$

trong đó chỉ số 1 nói rằng ta chỉ lấy vết một phần (theo mode thứ nhất). Ta thấy rằng toán tử mật độ này có thể được viết dưới dạng tích ngoài của một ket và bra liên hợp của nó:

$$\hat{\rho} = (|0\rangle + |1\rangle)(\langle 0| + \langle 1|) / 2.$$

Do đó ta nói trạng thái là thuần khiết. Đây là hệ quả của việc 2 mode kết hợp không vướng víu. Toán tử mật độ của mọi trạng thái thuần khiết đều thoả mãn  $Tr\{\hat{\rho}^2\}=1$ . Ta dễ dàng chứng minh được rằng (55) thoả mãn hệ thức này.

Nếu lấy vết mode thứ nhất của trạng thái (54) ta thu được kết quả:

$$Tr_1\{\hat{\rho}\} = \sum_n \langle n_1 | \frac{1}{2} (|1,0\rangle\langle 1,0| + |1,0\rangle\langle 0,1| + |0,1\rangle\langle 1,0| + |0,1\rangle\langle 0,1|) | n_1 \rangle = \frac{1}{2} (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|). \quad (56)$$

Trạng thái này không thể viết được thành tích ngoài của một ket và bra liên hợp của nó và được gọi là trạng thái kết hợp.

Ta có thể giải thích điều này như sau: Về mặt nguyên tắc, ta có thể biết trạng thái của mode thứ hai trên cơ sở phép đo của mode thứ nhất. Nếu ta bỏ qua thông tin này thì trạng thái được mô tả bởi một sự trộn lẫn thống kê của trạng thái  $|0\rangle$  và  $|1\rangle$ . Dễ thấy rằng đối với trạng thái này  $Tr\{\hat{\rho}\}=1$  (điều này đúng cho mọi trạng thái, cả thuần khiết và trộn lẫn) nhưng  $Tr\{\hat{\rho}^2\}=\frac{1}{2}<1$ . Bất đẳng thức này là dấu hiệu nhận biết của một trạng thái trộn lẫn.

### 10.10. Sự tiến triển theo thời gian

Ta đã thấy rằng một trạng thái có thể thay đổi như là hệ quả của phép đo. Tuy nhiên, ngay cả khi trạng thái không chịu tác động từ bên ngoài thì nó cũng tiến triển về mặt động lực học. Toán tử biểu diễn sự tiến triển là unita, nghĩa là ta có thể xem sự tiến triển như là một phép quay của vectơ trạng thái trong không gian Hilbert. Từ định nghĩa của toán tử unita, ta có thể chứng minh được rằng norm của vectơ trạng thái được bảo toàn dưới tác dụng của phép biến đổi

unita, nghĩa là nếu trạng thái  $|\psi\rangle$  đã được chuẩn hoá tiến triển một cách unita tới trạng thái  $|\phi\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$  thì

$$\langle\phi|\phi\rangle = \langle\psi|\hat{U}^+\hat{U}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{I}|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1. \quad (57)$$

Ngoài ra, phép quay unita của một tập các trạng thái trực giao luôn bảo toàn tính trực giao của tập. Nếu  $|\psi_m\rangle$  và  $|\psi_n\rangle$  là hai véctơ trạng thái bất kỳ trong tập thoả mãn  $\langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0$  thì các trạng thái mới  $|\phi_m\rangle = \hat{U}|\psi_m\rangle$  và  $|\phi_n\rangle = \hat{U}|\psi_n\rangle$  thoả mãn

$$\langle\phi_m|\phi_n\rangle = \langle\psi_m|\hat{U}^+\hat{U}|\psi_n\rangle = \langle\psi_m|\hat{I}|\psi_n\rangle = \langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0. \quad (58)$$

Có 2 cách xem xét chính khi khảo sát sự tiến triển theo thời gian của một hệ lượng tử. Theo cách thứ nhất, ta giả sử rằng mọi toán tử không phụ thuộc thời gian và gắn sự tiến triển về mặt động lực học theo thời gian vào trạng thái. Đó là cách biểu diễn Schrodinger. Theo cách thứ hai, ta xem trạng thái không phụ thuộc thời gian và gắn sự tiến triển theo thời gian vào toán tử. Đó là biểu diễn Heisenberg.

### a) Biểu diễn Schrodinger

Phương trình Schrodinger viết theo kí hiệu Dirac có dạng

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \quad (59)$$

Ở đây ta giả thiết rằng toán tử  $\hat{H}$  không phụ thuộc tường minh vào thời gian. Tích phân phương trình trên ta thu được

$$|\psi(t)\rangle = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)|\psi(0)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle. \quad (60)$$

Trong phương trình trên, hàm của toán tử được định nghĩa theo khai triển Taylor của nó:

$$\exp(-i\hat{H}t/\hbar) = 1 + \frac{-i\hat{H}t}{\hbar} + \frac{(-i\hat{H}t)^2}{2!\hbar^2} + \dots \quad (61)$$

Do  $\hat{H}$  là toán tử éc-mít (do đó có trị riêng là thực) nên có thể chứng minh được rằng toán tử  $\exp(-i\hat{H}t/\hbar)$  là unita. Như vậy, sự tiến triển theo thời gian của một trạng thái trong biểu diễn Schrodinger bị chi phối bởi toán tử unita  $\exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ . Nếu trạng thái ban đầu là trạng thái trộn lẫn, người ta dùng toán tử mật độ để mô tả trạng thái. Khi đó phương trình chuyển động tương ứng đối với ma trận mật độ là

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}\hat{\rho}(0)\hat{U}^\dagger \quad (62)$$

và thỏa mãn

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)]. \quad (63)$$

### b) Biểu diễn Heisenberg

Trong biểu diễn này ta cho các toán tử phụ thuộc thời gian còn các trạng thái không phụ thuộc thời gian. Điều này làm cho tất cả các giá trị kì vọng (là các giá trị đo được) phụ thuộc vào thời gian mặc dù các trạng thái không phụ thuộc thời gian.

Xuất phát từ sự tiến triển theo thời gian của  $\hat{\rho}$  trong biểu diễn Schrodinger  $i\hbar \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)]$ , ta suy ra giá trị kì vọng của một toán tử  $\hat{A}$  bất kì, trong một trạng thái với toán tử mật độ  $\hat{\rho}$  được tính theo công thức

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = Tr\{\hat{\rho}(t)\hat{A}\} = Tr\{\hat{U}(t)\hat{\rho}(0)\hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\} = Tr\{\hat{\rho}(0)\hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t)\} = Tr\{\hat{\rho}_H \hat{A}_H(t)\}, \quad (64)$$

trong đó toán tử  $\hat{A}$  không phụ thuộc thời gian và toán tử mật độ trong biểu diễn Heisenberg được định nghĩa

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t), \quad (65)$$

$$\hat{\rho}_H = \hat{U}^\dagger(t)\hat{\rho}(t)\hat{U}(t) = \hat{\rho}(0). \quad (66)$$

Do đó, trong biểu diễn Heisenberg toán tử mật độ không phụ thuộc thời gian. Toán tử Hamilton cũng không phụ thuộc thời gian vì

$$\hat{H}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{H} \hat{U}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) \hat{H} = \hat{H}. \quad (67)$$

Phương trình Schrodinger trong biểu diễn Heisenberg có thể viết dưới dạng:

$$i\hbar \frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = [\hat{A}_H(t), \hat{H}]. \quad (68)$$

Hai biểu diễn Schrodinger và Heisenberg là tương đương nhau. Trong một bài toán cụ thể, ta có thể tùy ý chọn biểu diễn nào thích hợp nhất.

### 10.11. Dịch chuyển pha

Sự dịch chuyển pha chẳng qua chỉ là một sự dịch chuyển thời gian. Bởi vậy, toán tử Hamilton đã dịch chuyển pha cũng chính là toán tử Hamilton tự do của mode. Nếu mode là một dao động tử điều hoà của trường điện từ thì toán tử Hamilton đã dịch chuyển pha là

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left( \hat{n} + \frac{1}{2} \right), \quad (69)$$

trong đó  $\omega = 2\pi\nu$ ;  $\nu$  là tần số quang học. Thông thường, năng lượng ở điểm 0 là  $\frac{1}{2}$  thường bị bỏ qua trong phương trình do nó luôn cho một sự dịch chuyển pha cố định cho mọi trạng thái và bởi vậy có thể loại bỏ. Toán tử dịch chuyển pha unita và phụ thuộc thời gian được cho bởi

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} = e^{-i\omega\hat{n}t}. \quad (70)$$

Bởi vậy trạng thái số tiến triển dưới dạng

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-i\omega\hat{n}t} |n\rangle = e^{-i\omega n t} |n\rangle. \quad (71)$$

Nhưng, như ta đã nói, các trạng thái chỉ khác nhau một sự dịch chuyển pha toàn cục là tương đương. Bởi vậy, các trạng thái số bất biến dưới tác dụng của phép dịch chuyển pha. Tuy nhiên, một trạng thái tổng quát

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle \quad (72)$$

bị ảnh hưởng bởi một phép dịch chuyển pha và sự tiến triển theo thời gian của nó là:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-i\omega n t} |n\rangle. \quad (73)$$

Nếu trạng thái  $|\psi(t)\rangle$  là một trạng thái kết hợp thì (73) có thể được đơn giản hoá. Trong trường hợp này  $e^{-i\omega n t} |\alpha\rangle = |e^{-i\omega t} \alpha\rangle$ .



**Chương XI: Cơ học lượng tử:  
Sự bất định có nguyên tắc,  
những sự bất định có ý nghĩa quan trọng  
và nguyên lý bất định\***

*Và bạn có thể tự hỏi*

*Tôi đúng? ... Tôi sai*

Talking Heads

Cơ học lượng tử, vốn khác thường như chính nó, đã làm thay đổi một cách cơ bản cách thức các nhà khoa học nhìn thế giới. Phần lớn của khoa học hiện đại đã phát triển từ cơ học lượng tử: cơ học thống kê, vật lí hạt, hoá học, vũ trụ học, sinh học phân tử, sinh học tiến hoá, địa chất học (thông qua việc xác định niên đại theo phóng xạ) đều được phát minh hoặc làm thay đổi như là kết quả của sự phát triển của cơ học lượng tử. Nhiều tiện ích của thế giới hiện đại, chẳng hạn máy vi tính, đầu đọc DVD, các camera kỹ thuật số không thể trở thành hiện thực nếu không có transistor và các linh kiện kỹ thuật mà sự phát triển của chúng phụ thuộc vào các hiện tượng lượng tử.

Tôi không rõ liệu tôi đã thực sự cảm thấy môn cơ học lượng tử khó hiểu như thế nào khi tôi đầu tiên học nó ở trường đại học. Nhưng mãi tới khi tôi dạy cơ học lượng tử nhiều năm sau đó và nghiên cứu cẩn thận thông qua logic của cơ học lượng tử thì tôi mới

---

\* Dịch từ cuốn sách: *Các chiều biến dạng - Làm sáng tỏ những bí mật về các chiều ẩn của vũ trụ* của Lisa Randall.

thực sự thấy nó rất tuyệt vời. Mặc dầu bây giờ chúng ta dạy cơ học lượng tử như một phần của chương trình vật lí, nhưng, ngược lại, nó thực sự gây sốc.

Câu chuyện của cơ học lượng tử minh chứng một cách đẹp đẽ về sự tiến hoá của khoa học. Cơ học lượng tử ban đầu đã được thực hiện với tinh thần xây dựng mô hình – nó tập trung vào các quan sát không thể giải thích được ngay cả trước đó người ta đã từng xây dựng một lý thuyết cơ bản. Cả các tiến bộ về lý thuyết và thực nghiệm đều diễn ra nhanh và dữ dội. Các nhà vật lí đã phát triển các lý thuyết lượng tử để giải thích các kết quả thực nghiệm mà vật lí cổ điển không thể giải thích được. Và lý thuyết lượng tử, đến lượt nó, lại đề xuất các thí nghiệm tiếp theo nhằm kiểm chứng các giả thiết.

Cần có thời gian để các nhà khoa học lựa chọn ý nghĩa đầy đủ của các quan sát thực nghiệm này. Việc “nhập khẩu” cơ học lượng tử là quá quyết liệt đối với hầu hết các nhà khoa học nên họ khó có thể chấp nhận nó ngay lập tức. Các nhà khoa học đã từng thể hiện sự không tin tưởng của họ trước khi họ có thể chấp nhận các kiến thức của cơ học lượng tử, vốn quá khác so với các khái niệm cổ điển quen thuộc. Ngay cả một số nhà tiên phong của lý thuyết, chẳng hạn Max Planck, Erwin Schrodinger và Albert Einstein chưa bao giờ thực sự chuyển sang cách suy nghĩ theo cơ học lượng tử. Einstein từng phát biểu sự phản đối của mình trong một câu nói nổi tiếng: “Chúa không chơi trò xúc xắc với vũ trụ”. Hầu hết các nhà khoa học dần dần chấp nhận sự thực (như chúng ta hiện đang hiểu nó), nhưng không phải ngay lập tức.

Bản chất sâu sắc của các tiến bộ về khoa học vào đầu thế kỷ 20 đã tác động vào văn hoá hiện đại. Những nền tảng cơ bản của nghệ thuật, văn học và hiểu biết của chúng ta về tâm lý đã thay đổi mạnh mẽ trong thời gian đó. Mặc dầu một số người gán những thuộc

tính này với sự chấn động và tàn phá của Chiến tranh thế giới lần thứ nhất nhưng các nghệ sĩ, chẳng hạn như Wassily Kandinsky đã sử dụng sự thực rằng nguyên tử bị bắn phá để chứng minh ý tưởng rằng mọi thứ có thể thay đổi, và do đó, trong nghệ thuật, mọi thứ đều cho phép. Kandinsky mô tả phản ứng của ông đối với nguyên tử hạt nhân: “Sự sụp đổ của mô hình nguyên tử, trong tâm hồn tôi cũng tương đương như sự sụp đổ của toàn thế giới. Đột nhiên những bức tường dày nhất sụp đổ. Tôi không ngạc nhiên nếu một hòn đá biến mất trước mắt tôi trong không khí, chảy thành nước, và trở nên không quan sát được”\*.

Phản ứng của Kandinsky hơi cực đoan. Quyết liệt như những kiến thức cơ bản của cơ học lượng tử, nó cũng dễ bị vượt quá khi áp dụng vào bối cảnh không phải khoa học. Tôi thấy ví dụ khó chịu nhất là nguyên lý bất định bị lạm dụng. Nó thường bị áp dụng một cách không thích hợp để bào chữa một cách hình thức cho những sự không chính xác. Trong chương này chúng ta sẽ thấy rằng nguyên lý bất định thực ra là một phát biểu rất chính xác về các đại lượng đo được. Ngoài ra nó là một phát biểu với nhiều ứng dụng đáng ngạc nhiên.

Bây giờ chúng ta sẽ giới thiệu cơ học lượng tử và những nguyên lý cơ bản làm nó rất khác với vật lý cổ điển xuất hiện trước đó. Các khái niệm mới và kỳ lạ chúng ta sẽ gặp bao gồm sự lượng tử hoá, hàm sóng, lưỡng tính sóng hạt và nguyên lý bất định. Chương này trình bày sơ lược những ý tưởng cơ bản đó và giới thiệu sơ lược về lịch sử của những ý tưởng đó.

### ***Sự sốc và sự sợ hãi***

---

\* Theo Gerald Holton và Stephen J. Brush, *Vật lý học, Sự phiêu lưu của con người, từ Copernicus tới Einstein và xa hơn nữa* (Piscataway, NJ: Rutgers University Press, 2001).

Nhà vật lí hạt Sidney Coleman từng nói rằng nếu một ngàn nhà triết học bỏ ra một ngàn năm để tìm kiếm những điều kỳ lạ nhất có thể thì họ cũng không bao giờ tìm thấy thứ gì kỳ lạ như cơ học lượng tử. Cơ học lượng tử khó hiểu vì các hệ quả của nó quá khác thường và ngạc nhiên. Những nguyên lý cơ bản của nó đối lập với những ý tưởng làm nền tảng cho tất cả vật lí học đã biết trước đó – và ngược với kinh nghiệm của chúng ta.

Một lý do làm cho cơ học lượng tử quá khó hiểu là chúng ta không được trang bị về mặt tâm lý để tiếp nhận bản chất lượng tử của vật chất và ánh sáng. Các hiệu ứng lượng tử thường trở nên đáng kể ở các khoảng cách khoảng một angstrom, là kích cỡ của nguyên tử. Khi không có những dụng cụ đặc biệt, chúng ta chỉ có thể nhìn thấy những kích cỡ lớn hơn nhiều. Ngay cả các điểm ảnh của màn hình máy tính hoặc tivi có độ phân dải cao cũng thường quá nhỏ để chúng ta quan sát.

Ngoài ra chúng ta chỉ thấy những tập hợp nhiều nguyên tử, nhiều đến mức vật lí cổ điển lấn át các hiệu ứng lượng tử. Chúng ta cũng chỉ thường tiếp nhận nhiều lượng tử ánh sáng. Mặc dầu một máy thu quang trong mắt là đủ nhạy để tiếp nhận các đơn vị nhỏ nhất có thể của ánh sáng – các lượng tử riêng biệt – song mắt thường xử lý quá nhiều lượng tử đến mức bất cứ hiệu ứng lượng tử khả dĩ nào cũng bị lấn át bởi tính chất cổ điển dễ quan sát hơn.

Nếu cơ học lượng tử là khó giải thích thì có một lý do rất hợp lý. Cơ học lượng tử tổng quát hơn cơ học cổ điển và bao các tiên đoán cổ điển như các trường hợp riêng, nhưng điều ngược lại không đúng. Trong nhiều tình huống – chẳng hạn khi liên quan tới các vật thể lớn – các tiên đoán của cơ học lượng tử phù hợp với các tiên đoán từ cơ học Newton cổ điển. Nhưng không có khoảng kích cỡ mà ở đó cơ học cổ điển sẽ sinh ra các tiên đoán lượng tử. Bởi vậy, khi

chúng ta nỗ lực để hiểu cơ học lượng tử bằng cách sử dụng các thuật ngữ và khái niệm cổ điển thông thường, chúng ta bị rơi vào vòng luẩn quẩn. Việc cố gắng dùng khái niệm cổ điển để mô tả các hiệu ứng lượng tử cũng giống như việc cố gắng dịch tiếng Pháp sang một từ vựng tiếng Anh bị giới hạn chỉ khoảng một trăm từ. Bạn thường gặp phải các khái niệm hoặc các từ chỉ có thể được dịch một cách gần đúng, hoặc hoàn toàn không thể diễn tả được với một từ vựng tiếng Anh bị giới hạn như vậy.

Nhà vật lí Niels Bohr người Đan mạch, một trong những người tiên phong của cơ học lượng tử, đã nhận thức về sự không đầy đủ của ngôn ngữ loài người trong việc mô tả sự vận hành bên trong của nguyên tử. Suy nghĩ về đề tài này, ông đã liên hệ các mô hình của ông “chợt đến với ông một cách trực giác... như các bức tranh”<sup>\*</sup> như thế nào. Đúng như nhà vật lí Werner Heisenberg đã từng giải thích: “chúng ta chỉ đơn giản phải nhớ rằng ngôn ngữ của chúng ta không sử dụng được, rằng chúng ta đang ở trong một địa hạt của vật lí học mà ở đó lời nói của chúng ta không có nghĩa nhiều lắm”<sup>\*</sup>.

Bởi vậy tôi sẽ không cố gắng mô tả các hiệu ứng lượng tử theo các mô hình cổ điển. Thay vào đó, tôi sẽ mô tả các giả thiết và hiện tượng cơ bản làm cho cơ học lượng tử rất khác với các lý thuyết cổ điển trước đó. Chúng ta sẽ phản chiếu một cách riêng lẻ trên một vài quan sát chính và những cái nhìn về bản chất đóng góp vào cơ học lượng tử và sự phát triển của nó. Mặc dầu việc thảo luận này đi theo một lược đồ hơi có tính lịch sử nhưng mục đích thực của tôi là lần lượt giới thiệu nhiều ý tưởng và khái niệm mới thuộc về bản chất của cơ học lượng tử.

---

<sup>\*</sup> Gerald Holton, *Sự tiến bộ của khoa học và những nhiệm vụ nặng nề của nó*, (Cambridge, MA: Harvard University Press, 1998).

<sup>\*</sup> Theo Gerald Holton và Stephen J. Brush, *Vật lí học, Sự phiêu lưu của con người, từ Copernicus tới Einstein và xa hơn nữa* (Piscataway, NJ: Rutgers University Press, 2001).

### ***Sự bắt đầu của cơ học lượng tử***

Vật lí lượng tử phát triển theo các giai đoạn. Nó bắt đầu như một chuỗi các giả thiết ngẫu nhiên phù hợp với thực nghiệm, mặc dù không ai hiểu tại sao chúng phù hợp. Những dự đoán đầy năng lực sáng tạo này, không có sự kiểm chứng vật lí cơ sở, nhưng đã có ý nghĩa trong việc đưa ra những câu trả lời đúng, tạo thành cái mà ngày nay chúng ta gọi là *lý thuyết lượng tử cũ*. Lý thuyết này đã được định nghĩa bằng cách giả thiết rằng các đại lượng như năng lượng và xung lượng không thể có các giá trị tùy ý. Thay vào đó, chúng chỉ nhận một tập các giá trị *bị lượng tử hoá*, rời rạc.

Cơ học lượng tử, phát triển từ tiền lệ khiêm tốn của lý thuyết lượng tử cũ, thanh minh cho các giả thuyết lượng tử hoá bí ẩn mà chúng ta sẽ sớm bắt gặp. Ngoài ra, cơ học lượng tử cung cấp một cách thức xác định để tiên đoán sự tiến triển theo thời gian của các hệ cơ học lượng tử, làm tăng một cách đáng kể sức mạnh của lý thuyết. Nhưng ở giai đoạn ban đầu, cơ học lượng tử chỉ phát triển thành từng đợt vì không ai ở thời điểm đó thực sự hiểu điều gì đang diễn ra. Đầu tiên các giả thiết lượng tử hoá là tất cả những gì nó có.

Lý thuyết lượng tử cũ bắt đầu vào năm 1900 khi nhà vật lí Max Planck người Đức cho rằng ánh sáng chỉ được truyền đi theo các đơn vị bị lượng tử hoá, giống như gạch chỉ có thể được bán theo các viên rời rạc. Theo giả thuyết của Planck, lượng năng lượng chứa trong ánh sáng ở một tần số cụ thể nào cũng chỉ có thể là bội số của đơn vị năng lượng cơ bản đối với tần số đặc biệt đó. Đơn vị cơ bản đó bằng một đơn vị, mà ngày nay được gọi là hằng số Planck,  $h$ , nhân với tần số,  $f$ . Năng lượng của ánh sáng ở tần số xác định  $f$  có thể là  $hf$ ,  $2hf$ ,  $3hf$ ... nhưng theo giả thiết Planck, bạn không bao giờ tìm thấy năng lượng nằm giữa các giá trị đó. Không giống như các

viên gạch mà sự lượng tử hoá của chúng là tùy ý và không cơ bản – gạch có thể được chia nhỏ – có một đơn vị năng lượng nhỏ nhất của ánh sáng ở một tần số xác định, không chia nhỏ được nữa. Không có các giá trị năng lượng trung gian.

Đề xuất có tính tiên tri nổi bật này đã được đưa ra để giải quyết một nghịch lý về mặt lý thuyết được gọi là *tai biến cực tím*\* của vật đen. Vật đen là một vật thể, giống như một mẩu than đá, hấp thụ tất cả bức xạ đi vào và sau đó phát xạ trở lại<sup>†</sup>. Lượng ánh sáng và các năng lượng khác mà nó phát xạ phụ thuộc vào nhiệt độ của nó; nhiệt độ đặc trưng hoàn toàn các tính chất vật lí của một vật đen.

Tuy nhiên, các tiên đoán cổ điển về ánh sáng phát xạ từ một vật đen là một điều khó hiểu: các tính toán cổ điển tiên đoán rằng một lượng năng lượng lớn hơn nhiều sẽ được phát ra dưới dạng bức xạ có tần số cao so với lượng năng lượng mà các nhà vật lí đã quan sát và ghi lại được. Các phép đo cho thấy rằng các tần số khác nhau không đóng góp một cách bình đẳng vào bức xạ của vật đen; các tần số rất cao đóng góp ít hơn các tần số thấp. Chỉ các tần số thấp mới phát xạ năng lượng đáng kể. Đó là lý do tại sao các vật thể đang phát xạ lại “nóng - đỏ” và không “nóng - xanh”. Nhưng vật lí học cổ điển tiên đoán một lượng lớn năng lượng ở tần số cao. Thực vậy, năng lượng phát xạ toàn phần được tiên đoán bởi lập luận cổ điển là vô hạn. Vật lí học cổ điển đối mặt với *tai biến tử ngoại*.

Một cách thức không chính thống nhằm thoát khỏi tình trạng khó xử này là giả thiết rằng chỉ các tần số nằm dưới một giới hạn trên cụ thể nào đó mới có thể đóng góp vào bức xạ của một vật đen. Planck không để ý đến khả năng này: ánh sáng bị lượng tử hoá.

---

\* “Cực tím” có nghĩa là “tần số cao”.

† Vật đen thực ra là một sự lí tưởng hoá; các vật thể thực như than đá không phải là các vật đen lí tưởng.

Planck lập luận rằng nếu bức xạ ở mỗi tần số bao gồm một số nguyên lần một lượng tử cơ bản của bức xạ thì không một bức xạ ở tần số cao nào có thể được phát ra vì đơn vị cơ bản của năng lượng sẽ quá lớn. Do năng lượng chứa trong một đơn vị lượng tử của ánh sáng tỷ lệ với tần số, nên thậm chí chỉ một đơn vị của bức xạ tần số cao cũng chứa một lượng năng lượng lớn. Khi tần số đủ cao, năng lượng tối thiểu mà lượng tử chứa sẽ quá lớn để bức xạ. Vật đen chỉ có thể bức xạ lượng tử ở tần số thấp hơn. Do đó giả thuyết của Planck ngăn cấm sự bức xạ ở tần số cao quá mức.

Một sự tương tự có thể giúp làm sáng tỏ lập luận logic của Planck. Có lẽ bạn đã từng ăn tối với những người mà họ phản đối khi gọi món tráng miệng. Họ sợ ăn quá nhiều thức ăn béo, bởi vậy họ hiếm khi gọi món tráng miệng cho riêng họ. Nếu người bồi bàn hứa rằng món tráng miệng nhỏ, họ có thể gọi. Nhưng họ run sợ trước các miếng bánh ngọt, kem, hoặc bánh pudding được chia theo phần, lớn thông thường.

Có hai dạng người như vậy. Ike thuộc nhóm người thứ nhất. Anh có nguyên tắc rõ ràng và thực sự không ăn tráng miệng. Khi món tráng miệng quá lớn, Ike nhin không ăn nó. Tôi có vẻ thuộc vào nhóm người thứ hai hơn. Athena cũng vậy. Cô ta nghĩ rằng món tráng miệng là quá lớn và bởi vậy không gọi món cho riêng cô, nhưng, không giống Ike, cô ta không hề ân hận về việc lấy một vài miếng từ đĩa của một ai đó. Bởi vậy, ngay cả khi Athena từ chối gọi khẩu phần riêng cho mình, cuối cùng cô vẫn ăn khá nhiều. Nếu Athena ăn tối với nhiều người và bởi vậy có thể ăn nhiều miếng bánh, cô ta sẽ gặp phải “tai hoạ calorie”.

Theo lý thuyết cổ điển, vật đen cũng giống như Athena. Nó phát xạ những lượng nhỏ ánh sáng ở bất cứ tần số nào, và bởi vậy các nhà lý thuyết sử dụng lập luận cổ điển sẽ tiên đoán một “tai biến



cực tím”. Để thoát khỏi tình trạng khó xử này, Planck cho rằng một vật đen cũng giống như một người thực sự điều độ. Giống như Ike, người không bao giờ ăn một miếng tráng miệng, vật đen cư xử đúng theo quy tắc lượng tử hoá của Planck và phát xạ ánh sáng ở một tần số xác định chỉ theo các đơn vị năng lượng bị lượng tử hoá, bằng hằng số  $h$  nhân với tần số  $f$ . Nếu tần số lớn, lượng tử năng lượng sẽ lớn đối với ánh sáng phát xạ ở tần số đó. Bởi vậy, một vật đen sẽ phát xạ hầu hết bức xạ của nó ở các tần số thấp, và các tần số cao sẽ tự động bị cắt. Trong lý thuyết lượng tử, một vật đen không phát một lượng đáng kể bức xạ ở tần số cao và bởi vậy phát xạ ít bức xạ hơn so với được tiên đoán theo lý thuyết cổ điển.

Khi một vật thể phát bức xạ, chúng ta gọi hình ảnh bức xạ của nó – nghĩa là năng lượng mà vật thể phát xạ ở mỗi tần số tại một nhiệt độ cụ thể nào đó – là *phổ* của nó. Phổ của các vật thể xác định, chẳng hạn các ngôi sao, có thể coi gần đúng như phổ của một vật đen. Phổ của vật đen đã được đo ở nhiều nhiệt độ khác nhau và tất cả chúng đều phù hợp với giả thiết Planck. Kết quả thực nghiệm cho thấy sự phát xạ chủ yếu ở tần số thấp. Ở tần số cao, sự phát xạ bị cắt.

Một trong những thành tựu vĩ đại của vũ trụ học thực nghiệm từ những năm 1980 là việc đo với độ chính xác tăng lên của phổ vật đen mà bức xạ trong vũ trụ của chúng ta tạo ra. Lúc đầu, vũ trụ là một quả cầu lửa đậm đặc, nóng, chứa bức xạ ở nhiệt độ cao, nhưng từ đó vũ trụ giãn nở và bức xạ nguội đi một cách đáng kể. Điều này là do vũ trụ giãn nở, bước sóng của bức xạ cũng vậy. Và bước sóng dài hơn tương ứng với tần số thấp hơn. Tần số thấp hơn tương ứng với năng lượng thấp hơn. Năng lượng thấp hơn tương ứng với nhiệt độ thấp hơn. Vũ trụ hiện nay chứa bức xạ giống như nó đã được tạo

bởi một vật đen với nhiệt độ chỉ 2,7 độ K – lạnh hơn một cách đáng kể so với khi nó bắt đầu.

Các vệ tinh gần đây đã đo được phổ của bức xạ hồng ngoại vũ trụ vi ba này. Phổ này giống như phổ của một vật đen có nhiệt độ 2,7 độ K. Các phép đo cho chúng ta biết rằng các thăng giáng nhỏ hơn một phần mười ngàn. Thực vậy, bức xạ dư này là phổ vật đen chính xác nhất từng đo được cho đến nay. Khi được hỏi vào năm 1931 bằng cách nào mà Planck lại đặt ra giả thiết kỳ quặc rằng ánh sáng bị lượng tử hoá, Planck trả lời: “Đó là một hành động của sự tuyệt vọng. Tôi đã từng chiến đấu với lý thuyết vật đen trong vòng 6 năm. Tôi đã biết vấn đề là cơ bản và tôi đã biết câu trả lời. Tôi phải tìm một lời giải thích về mặt lý thuyết bằng mọi giá...”\*. Đối với Planck, sự lượng tử hoá của ánh sáng là một công cụ cho phổ vật đen chính xác. Theo quan điểm của ông, sự lượng tử hoá không cần thiết là một tính chất của chính ánh sáng mà thay vào đó, có thể là hệ quả của một số tính chất nào đó của các nguyên tử đang bức xạ ánh sáng. Mặc dầu con đường của Planck là bước đi đầu tiên trong việc hiểu về sự lượng tử hoá ánh sáng nhưng chính Planck không hiểu đầy đủ về nó.

5 năm sau, vào năm 1905, Einstein có một đóng góp lớn vào lý thuyết lượng tử khi ông cho rằng lượng tử ánh sáng là các đối tượng thực, chứ không phải toán học thuần túy. Vào năm đó, Einstein là một con người rất bận rộn: phát triển thuyết tương đối hẹp, chứng minh rằng nguyên tử và phân tử tồn tại bằng cách nghiên cứu các tính chất thống kê của vật chất, đưa ra bằng chứng về tính đúng đắn của lý thuyết lượng tử, đồng thời ông đang làm việc tại văn phòng đăng ký phát minh của Thụy sĩ ở Bern.

---

\* “... bằng mọi giá, nghĩa là loại trừ tính không thể vi phạm 2 nguyên lý của nhiệt động lực học”. Theo David Cassidy, *Einstein và thế giới của chúng ta*, xuất bản lần thứ 2 (Atlantic Highlands, NJ: Humanities Press, 2004).

Thí nghiệm cụ thể mà Einstein đã giải thích, áp dụng giả thuyết về lượng tử ánh sáng, bởi vậy làm tăng sự tín nhiệm của nó, được gọi là *hiệu ứng quang điện*. Các nhà thực nghiệm chiếu bức xạ ở một tần số xác định vào vật chất và bức xạ đi vào đó đẩy electron ra khỏi vật chất. Các thí nghiệm cho thấy rằng vật chất bị bắn phá với nhiều ánh sáng hơn, tức là mang nhiều năng lượng hơn, không làm thay đổi động năng cực đại của các electron phát xạ. Điều này mâu thuẫn với những gì mà trực giác có thể mách bảo: năng lượng tới lớn hơn chắc chắn sẽ tạo ra các electron với động năng lớn hơn. Giới hạn về năng lượng động học của electron, bởi vậy, là một nghịch lý. Tại sao electron không hấp thụ nhiều năng lượng hơn?

Theo giải thích của Einstein, bức xạ bao gồm các lượng tử ánh sáng riêng biệt, và chỉ một lượng tử cung cấp năng lượng của nó cho một electron cụ thể. Ánh sáng được phân chia cho một electron riêng biệt giống như một phát súng đơn lẻ, không phải như một cuộc chiến tranh chớp nhoáng. Do chỉ có một lượng tử ánh sáng làm bật electron nên nhiều lượng tử tới hơn cũng không làm thay đổi năng lượng của electron bị phát xạ. Việc tăng số lượng tử tới làm cho ánh sáng làm bật nhiều electron hơn, nhưng không làm ảnh hưởng tới năng lượng cực đại của bất cứ electron cụ thể nào.

Một khi Einstein đã giải thích kết quả của hiệu ứng quang điện theo các gói năng lượng xác định này – các đơn vị ánh sáng được lượng tử hoá - nó cho thấy rằng các electron được phát xạ luôn có cùng động năng cực đại. Động năng lớn nhất mà một electron có thể có bằng năng lượng cố định mà nó nhận được từ lượng tử ánh sáng trừ đi năng lượng cần thiết để làm bật nó ra khỏi nguyên tử.

Sử dụng lập luận này, Einstein có thể suy ra năng lượng của lượng tử ánh sáng. Ông đã tìm thấy rằng năng lượng của chúng phụ thuộc vào tần số của ánh sáng tới đúng như giả thiết Planck đã tiên

đoán. Đối với Einstein, đây là bằng chứng rõ ràng rằng lượng tử ánh sáng là thực. Sự giải thích của ông đưa ra một bức tranh rất chính xác về lượng tử ánh sáng: một lượng tử riêng rẽ va vào một electron riêng rẽ, do đó bị bật ra. Chính kết quả này, chứ không phải thuyết tương đối, đã mang lại cho Einstein giải Nobel vật lí năm 1921.

Tuy nhiên, điều rất kỳ quặc là mặc dầu Einstein thừa nhận sự tồn tại của các đơn vị bị lượng tử hoá của ánh sáng, ông đã bất đắc dĩ phải chấp nhận rằng các lượng tử này thực sự là các hạt không khối lượng, mang năng lượng và xung lượng, nhưng không có khối lượng. Bằng chứng thuyết phục đầu tiên về bản chất hạt của lượng tử ánh sáng đến từ phép đo *tán xạ Compton* năm 1923, trong đó một lượng tử ánh sáng va vào một electron và phát xạ. Nói chung, bạn có thể xác định năng lượng và xung lượng của một hạt bằng cách đo góc lệch của nó sau va chạm. Nếu các photon là các hạt không khối lượng, chúng sẽ thể hiện theo một cách thức được xác định rõ khi chúng va vào các hạt khác, chẳng hạn các electron. Các phép đo cho thấy rằng các lượng tử ánh sáng thể hiện chính xác rằng các lượng tử là các hạt không khối lượng tương tác với electron. Kết luận chắc chắn không lay chuyển được là: lượng tử ánh sáng quả thực là các hạt và ngày nay chúng ta gọi các hạt này là các *photon*.

Điều khó hiểu là Einstein rất phản đối lý thuyết lượng tử mà ông có công phát triển. Nhưng phản ứng của ông cũng không nổi bật hơn phản ứng của Planck đối với ý tưởng lượng tử hoá của Einstein mà Planck không tin. Planck và một số người khác đã ca ngợi nhiều thành tựu của Einstein nhưng cũng nói rõ sự thông cảm của họ\*. Planck đã từng nói, hơi có vẻ chê bai, rằng: “Việc ông đã chệch mục tiêu trong các tiên đoán của ông, ví dụ trong giả thiết của ông về lượng tử ánh sáng, không thể thực sự chống lại ông quá nhiều, vì nó

---

\* Abraham Pais, *Sự tình tế là chúa tể: Khoa học và cuộc đời của Albert Einstein* (Philadelphia: American Philological Association, 1982).

không thể đưa ra các ý tưởng thực sự mới ngay cả trong các khoa học chính xác nhất mà đôi khi không phạm phải một rủi ro”<sup>†</sup>. Không phạm sai lầm. Các lượng tử ánh sáng được phỏng đoán của Einstein đã đúng mục tiêu. Nhận xét của Planck chỉ phản chiếu bản chất cách mạng của những cái nhìn bản chất của Einstein và sự miễn cưỡng ban đầu của các nhà khoa học để chấp nhận nó.

### *Sự lượng tử hoá và nguyên tử*

Câu chuyện lượng tử hoá và lý thuyết lượng tử cũ không dừng lại với ánh sáng. Nó chỉ ra rằng *tất cả* vật chất bao gồm các lượng tử cơ bản. Niels Bohr đã phát triển giả thuyết lượng tử. Trong trường hợp của mình, ông áp dụng nó cho một hạt đã được biết rất rõ, electron.

Mối quan tâm của Bohr đối với cơ học lượng tử được phát triển một phần do những nỗ lực tại thời đó để làm rõ các tính chất bí ẩn của nguyên tử. Suốt thế kỷ 19, khái niệm nguyên tử đang mập mờ ở mức không thể tin được: nhiều nhà khoa học không tin rằng nguyên tử tồn tại, họ cho rằng nó chẳng qua là một công cụ hữu ích nhưng không có cơ sở trong hiện thực. Ngay cả một số nhà khoa học tin rằng các nguyên tử tồn tại cũng nhầm chúng với các phân tử, mà ngày nay chúng ta biết rằng được tạo bởi các nguyên tử.

Tính chất và cấu tạo thực của nguyên tử đã không được chấp nhận mãi cho tới đầu thế kỷ 20. Một phần là do từ “atom” trong tiếng Hi Lạp có nghĩa là không phân chia được, và bức tranh ban đầu của nguyên tử quả thực là một vật thể không nhìn thấy được, không thay đổi. Nhưng khi các nhà vật lý ở thế kỷ 19 biết thêm về các tính chất của nguyên tử, họ bắt đầu nhận ra rằng ý tưởng đó không đúng.

---

<sup>†</sup> Gerald Holton, *Nguồn gốc của tư tưởng khoa học*, (Cambridge, MA: Harvard University Press, 1988).

Cho đến cuối thế kỷ 19, hoạt động phóng xạ và *các vạch phổ*, những tần số xác định mà tại đó ánh sáng phát xạ và hấp thụ, đã là một số trong số các tính chất được đo đạc chính xác của nguyên tử. Cả hai hiện tượng này cho thấy rằng nguyên tử có thể thay đổi. Nổi bật là vào năm 1897, J.J. Thomson đã xác định các electron và đề xuất rằng electron là một thành phần của nguyên tử, có nghĩa rằng các nguyên tử phải phân chia được.

Vào đầu thế kỷ 20 Thomson đã tổng hợp các quan sát về nguyên tử của thời đó vào mô hình “bánh pudding” của mình, mang tên món bánh tráng miệng của người Anh, bao gồm các mẩu hoa quả cô lập, nằm rời rạc trong một cục bánh mỳ tròn. Ông cho rằng có một thành phần tích điện dương nằm trải khắp nguyên tử (phần bánh mỳ) với các electron mang điện âm (các mẩu hoa quả) nằm lẫn trong đó.

Nhà bác học Ernest Rutherford người New Zealand đã chứng minh rằng mô hình đó là sai vào năm 1910 khi Hans Geiger và một sinh viên nghiên cứu tên là Ernest Marsden thực hiện một thí nghiệm do Rutherford đề xuất. Họ phát hiện ra một hạt nhân nguyên tử rắn chắc, nhỏ hơn nhiều so với chính nguyên tử. Radon-222, một chất khí được tạo thành trong sự rã phóng xạ của các muối radium, phát xạ các hạt alpha, mà ngày nay chúng ta biết là hạt nhân hêli. Các nhà vật lý đã phát hiện ra sự tồn tại của hạt nhân nguyên tử bằng cách bắn các hạt alpha vào nguyên tử và ghi lại góc tán xạ của các hạt alpha. Sự tán xạ gây ấn tượng sâu sắc mà họ ghi được chỉ xuất hiện nếu có một hạt nhân nguyên tử rắn, chắc. Một điện tích dương trải khắp toàn nguyên tử không thể làm tán xạ các hạt rộng như vậy. Theo lời của Rutherford, “đó là sự kiện khó tin nhất từng xảy ra trong cuộc đời tôi. Nó dường như không thể tin được, giống như bạn

việc bắn một quả đạn pháo 15 inch vào một tờ giấy, nó bật ngược lại và va vào bạn”\*.

Các kết quả của Rutherford đã bác bỏ mô hình bánh pudding về nguyên tử. Phát hiện của ông có nghĩa rằng điện tích dương không rải khắp nguyên tử, mà thay vào đó tập trung tại một nhân nhỏ hơn nhiều, nằm ở bên trong. Có một thành phần cứng nằm ở trung tâm là hạt nhân. Một nguyên tử theo mô hình này bao gồm các electron quay quanh một hạt nhân nhỏ nằm ở trung tâm.

Vào mùa hè 2002 tôi tham dự một hội nghị khoa học hàng năm về lý thuyết dây, năm đó được tổ chức tại phòng thí nghiệm Cavendish ở Cambridge. Nhiều nhà tiên phong quan trọng của cơ học lượng tử bao gồm hai lãnh đạo của phòng thí nghiệm này là Rutherford và Thomson đã thực hiện nhiều nghiên cứu quan trọng của họ tại đây. Hành lang được trang trí nhằm nhắc lại những năm sôi động ban đầu đó, và trong khi thơ thẩn dọc theo hành lang tôi biết được một số sự thực buồn cười.

Chẳng hạn James Chadwick, người phát hiện ra neutron, đã nghiên cứu vật lý chỉ vì ông đã quá xấu hổ khi biết rằng mình đã đứng đợi nhầm hàng khi làm thủ tục nhập học vào trường đại học. Và J.J. Thomson đã quá trẻ khi trở thành lãnh đạo của phòng thí nghiệm (khi đó ông 28 tuổi) đến nỗi có một lời chào mừng dành cho ông như sau: “Hãy thứ lỗi cho tôi nếu tôi đã sai lầm trong việc không viết lời chúc ông hạnh phúc và thành công với tư cách là một giáo sư. Tin về sự thắng cử của ông là một sự ngạc nhiên quá lớn để cho phép tôi làm điều đó”. (Các nhà vật lý không phải luôn luôn là những người lịch thiệp nhất).

---

\* Theo Abraham Pais, *Sự ràng buộc bên trong: Về vật chất và các lực trong thế giới vật lý*, (Oxford: Oxford University Press, 1986).

Mặc dầu bức tranh cổ kết về nguyên tử đã được phát triển vào đầu thế kỷ 20 tại Cavendish và những nơi khác nhưng tính chất của các thành phần của nó đã tàn phá lòng tin cơ bản nhất của các nhà vật lí. Các thí nghiệm của Rutherford đã đề xuất một nguyên tử bao gồm các electron chuyển động theo các quỹ đạo xung quanh hạt nhân nguyên tử ở trung tâm. Bức tranh này, vốn rất đơn giản, có một hạn chế: nó bị sai. Lý thuyết điện từ cổ điển tiên đoán rằng khi các electron quay trên quỹ đạo chúng sẽ phát xạ năng lượng thông qua sự phát xạ photon (hoặc nói theo cách cổ điển là phát xạ sóng điện từ). Các photon, bởi vậy, sẽ lấy bớt năng lượng và để lại một electron có ít năng lượng hơn. Electron sẽ quay trên các quỹ đạo có bán kính giảm dần, chuyển động theo đường xoắn ốc về phía tâm nguyên tử. Thực tế, lý thuyết điện từ cổ điển tiên đoán rằng các nguyên tử không thể bền và sẽ sụp đổ trong không đầy một na nô giây. Các quỹ đạo electron bền của nguyên tử là một bí ẩn hoàn toàn. Tại sao các electron không mất năng lượng và chuyển động xoắn vào hạt nhân nguyên tử?

Một sự bứt phá dứt điểm khỏi lập luận cổ điển là cần thiết để giải thích các quỹ đạo của electron của nguyên tử. Theo lôgic đó, những khiếm khuyết của vật lí học cổ điển chỉ có thể được khắc phục bởi sự phát triển của cơ học lượng tử. Niels Bohr đã thực hiện một đề xuất có tính cách mạng khi mở rộng khái niệm lượng tử hoá của Planck cho các electron. Điều này cũng đã là một thành tố cơ bản của lý thuyết lượng tử cũ.

### ***Sự lượng tử hoá của electron***

Bohr quyết định rằng các electron không thể chuyển động theo một quỹ đạo bất kỳ: một quỹ đạo của electron phải có bán kính phù hợp với công thức do ông đề xuất. Ông tìm thấy các quỹ đạo này



bằng cách đưa ra một sự dự đoán khéo léo và may mắn. Lý thuyết lượng tử của ông sau đó đã được giải thích dựa vào sự kiện là các electron có tính chất như các sóng, có nghĩa là chúng dao động lên và xuống khi chúng quay xung quanh hạt nhân.

Nói chung, một sóng với bước sóng xác định dao động lên và xuống qua một khoảng cách xác định; khoảng cách đó là bước sóng. Một sóng truyền theo một đường tròn cũng có một bước sóng liên quan. Trong trường hợp này các bước sóng tạo thành khu vực của cung tròn mà theo đó sóng sẽ di chuyển lên và xuống trong khi nó chuyển động xung quanh hạt nhân. Một electron quay theo một bán kính xác định không thể có bước sóng bất kỳ. Nó chỉ có thể có một bước sóng cho phép sóng dao động lên và xuống một số xác định lần. Điều này ám chỉ một quy tắc để xác định các bước sóng được phép: các sóng phải dao động một số nguyên lần khi truyền xung quanh vòng tròn xác định quỹ đạo của electron.

Mặc dầu đề xuất của Bohr là cơ bản và khó hiểu, song sự dự đoán của ông là một bí quyết: nếu đúng nó sẽ đảm bảo cho các quỹ đạo bền của electron. Chỉ các quỹ đạo đặc biệt của electron mới được phép. Các quỹ đạo trung gian bị cấm. Khi không có tác nhân bên ngoài làm electron nhảy từ một quỹ đạo này sang một quỹ đạo khác thì sẽ không có cách nào để electron chuyển về phía hạt nhân.

Bạn có thể nghĩ về nguyên tử của Bohr với các quỹ đạo electron cố định của nó như một toà nhà cao tầng mà trong đó bạn bị giới hạn bởi các tầng có số chẵn: 2,4,6... Do bạn không bao giờ đặt chân lên các tầng ở giữa, chẳng hạn tầng 3 và tầng 5, nên bạn bị mắc kẹt vĩnh viễn ở các tầng có số chẵn. Không có cách nào để xuống tầng trệt và đi khỏi toà nhà.

Các sóng của Bohr là một giả thiết đầy tính sáng tạo. Ông không biết ý nghĩa của chúng; ông đưa ra giả thiết của mình chỉ

nhằm bảo đảm cho các quỹ đạo bền của electron. Ngược lại bản chất lượng tử của đề xuất của ông cho phép nó được kiểm chứng. Đặc biệt giả thiết của Bohr tiên đoán chính xác các vạch phổ nguyên tử. Các vạch phổ cho tần số của ánh sáng mà một nguyên tử *không bị ion hoá* - một nguyên tử trung hoà với tất cả các electron của nó mang điện tích tổng cộng bằng không – phát xạ hoặc hấp thụ\*. Các nhà vật lí đã nhận ra rằng phổ cho ta một hình ảnh có dạng giống như mã vạch gồm một dải chứ không phải một phân bố liên tục (nghĩa là với tất cả các tần số của đóng góp của ánh sáng). Nhưng không ai hiểu tại sao. Cũng không ai biết lý do của các giá trị chính xác của các tần số mà họ trông thấy.

Với giả thiết lượng tử của mình, Bohr có thể giải thích tại sao các photon đã phát xạ hoặc hấp thụ chỉ ở các tần số đo được. Mặc dầu các quỹ đạo của electron là bền vững đối với một nguyên tử cô lập song chúng có thể thay đổi khi một photon với tần số phù hợp – và do đó, theo Planck, năng lượng phù hợp – cung cấp hoặc lấy bớt năng lượng.

Sử dụng lập luận cổ điển, Bohr đã tính toán năng lượng của các electron tuân theo giả thiết lượng tử của mình. Từ những năng lượng đó ông tiên đoán năng lượng, và do đó tần số, của các photon mà nguyên tử hiđrô, chứa một electron, phát xạ hoặc hấp thụ. Các tiên đoán của Bohr là chính xác và các tiên đoán chính xác này làm cho giả thiết lượng tử của ông có độ tin cậy cao. Và điều đó đã thuyết phục Einstein, cùng với những người khác, tin rằng Bohr phải đúng.

Các chùm ánh sáng bị lượng tử hoá, có thể phát xạ hoặc hấp thụ và bởi vậy có thể thay đổi các quỹ đạo của electron, có thể được so sánh với các độ dài của sợi dây thừng đặt cạnh các cửa sổ của toà

---

\* Ở đây chúng ta tập trung vào phổ gián đoạn. Khi một electron tự do bị hấp thụ bởi một ion, một phổ liên tục – chứ không phải gián đoạn – của ánh sáng được phát ra.

nhà nhiều tầng trong ví dụ vừa nêu. Nếu mỗi mẫu dây chính xác là độ dài cần thiết để đi từ tầng của bạn tới bất cứ một tầng đánh số chẵn nào khác, và chỉ các cửa sổ tới các tầng chẵn là mở, thì sợi dây sẽ cung cấp một cách thức để thay đổi các tầng – nhưng chỉ giữa các tầng đánh số chẵn. Cũng theo cách như vậy, các vạch phổ chỉ có thể nhận một số giá trị xác định, những giá trị bằng độ chênh lệch năng lượng giữa các electron chiếm giữ các quỹ đạo được phép.

Mặc dầu Bohr không đưa ra lời giải thích cho điều kiện lượng tử hoá của mình, song ông chắc chắn đúng. Nhiều vạch phổ đã được đo và giả thiết của ông có thể được dùng để tái tạo lại chúng. Nếu sự phù hợp như vậy là một sự ngẫu nhiên thì đó là một điều kỳ lạ. Cuối cùng cơ học lượng tử đã chứng minh giả thiết của ông.

### *Sự ám ảnh về cam kết của các hạt*

Cũng quan trọng như các đề xuất về sự lượng tử hoá, mối liên hệ cơ học lượng tử giữa các hạt và các sóng chỉ bắt đầu định hình với những tiến bộ được thực hiện bởi nhà vật lí và là nhà quý tộc Louis de Broglie người Pháp, nhà vật lí Erwin Schrodinger người Áo, và nhà vật lí Max Born sinh ra ở Đức.

Bước nhảy quan trọng đầu tiên từ lý thuyết lượng tử cũ sang lý thuyết thực sự của cơ học lượng tử là đề xuất xuất sắc của de Broglie về việc điều chỉnh giả thiết lượng tử hoá của Planck. Trong khi Planck liên hệ các lượng tử với các sóng của bức xạ, thì de Broglie – giống như Bohr – giả thiết rằng các hạt cũng thể hiện như các sóng. Giả thiết của de Broglie có nghĩa rằng các hạt thể hiện tính chất sóng và các sóng này được xác định bởi một xung lượng của hạt. (Đối với các tốc độ bé, xung lượng bằng khối lượng nhân với tốc độ. Đối với mọi tốc độ, xung lượng cho biết một vật phản ứng như thế nào đối với một lực tác dụng. Mặc dầu ở các tốc độ tương

đối tính thì xung lượng là một hàm phức tạp hơn của khối lượng và tốc độ song sự suy rộng của xung lượng được áp dụng ở các tốc độ cao cũng cho biết một vật có tốc độ tương đối tính phản ứng như thế nào đối với một lực).

De Broglie giả thiết rằng một hạt với xung lượng  $p$  liên hệ với một sóng mà bước sóng của nó tỉ lệ nghịch với xung lượng – nghĩa là xung lượng càng bé thì bước sóng càng lớn. Bước sóng cũng tỉ lệ với hằng số Planck  $h^*$ . Ý tưởng ẩn sau giả thiết của de Broglie là một sóng dao động nhanh (nghĩa là có bước sóng bé) mang xung lượng lớn hơn so với sóng dao động chậm (bước sóng lớn). Các bước sóng bé hơn có nghĩa là các dao động nhanh hơn, theo de Broglie, liên hệ với xung lượng lớn hơn.

Nếu bạn thấy rằng sự tồn tại sóng – hạt này là khó hiểu thì đó là do bản chất của nó là như vậy. Khi lần đầu tiên de Broglie đề xuất các sóng của mình, không ai hiểu chúng là gì. Max Born đề xuất một cách giải thích đáng ngạc nhiên: sóng là một hàm của vị trí mà bình phương của nó cho biết xác suất tìm thấy hạt tại bất cứ vị trí nào trong không gian<sup>+</sup>. Ông đặt tên nó là *hàm sóng*. Ý tưởng cơ bản của Max Born là các hạt không thể được định vị chính xác mà chỉ có thể được mô tả theo các xác suất. Đây là một sự chuyển hướng lớn khỏi các giả thiết cổ điển. Nó có nghĩa rằng bạn không thể biết vị trí chính xác của hạt. Bạn chỉ có thể xác định *xác suất* tìm thấy nó tại một nơi nào đó.

Nhưng mặc dầu một sóng cơ học lượng tử chỉ mô tả các xác suất song cơ học lượng tử tiên đoán chính xác sự tiến triển của sóng này theo thời gian. Cho biết các giá trị tại một thời điểm bất kỳ, bạn

---

\* Bước sóng bằng hằng số Planck  $h$  chia cho xung lượng.

<sup>+</sup> Mặc đây chúng ta cần 3 tọa độ để xác định một điểm trong không gian, đôi khi chúng ta đơn giản hoá và giả sử rằng hàm sóng phụ thuộc chỉ vào một tọa độ. Điều này làm cho việc vẽ các hình ảnh của hàm sóng trên giấy được dễ dàng hơn.

có thể xác định các giá trị tại bất cứ thời điểm nào sau đó. Schrodinger đã phát triển phương trình sóng biểu diễn sự tiến triển của sóng liên quan với một hạt cơ học lượng tử.

Nhưng xác suất tìm thấy hạt này có nghĩa là gì? Đó là một ý tưởng khó hiểu – xét cho cùng, không có cái gọi là một phần của hạt. Việc một hạt có thể được mô tả bởi một sóng là một trong những khía cạnh đáng ngạc nhiên nhất của cơ học lượng tử, đặc biệt vì khi đó người ta biết rằng các hạt thường thể hiện như các quả bóng bi-a, chứ không phải như các sóng. Cách giải thích hạt và cách giải thích sóng có vẻ không tương thích.

Giải pháp đối với nghịch lý hiển nhiên này xoay quanh sự thật rằng bạn không bao giờ phát hiện được bản chất sóng của một hạt chỉ với một hạt. Khi bạn phát hiện được một electron riêng rẽ, bạn nhìn thấy nó tại một vị trí xác định. Để chỉ ra toàn bộ sóng, bạn cần một tập hợp các electron giống hệt nhau, hoặc một thí nghiệm được lặp lại nhiều lần. Mặc dầu mỗi electron liên hệ với một sóng, nhưng với một electron riêng rẽ, bạn chỉ đo được một con số. Nhưng nếu bạn có thể chuẩn bị một tập hợp lớn các electron giống hệt nhau, bạn sẽ thấy rằng phần của các electron nằm tại một vị trí tỷ lệ với xác suất liên hệ với một electron theo cơ học lượng tử.

Hàm sóng của một electron riêng rẽ cho bạn biết tính chất của nhiều electron tương tự nhau với cùng hàm sóng này. Mỗi electron riêng rẽ sẽ được tìm thấy chỉ tại một vị trí cụ thể. Nhưng nếu có nhiều electron giống hệt nhau, chúng sẽ thể hiện một sự phân bố về vị trí dưới dạng sóng. Các hàm sóng cho bạn biết xác suất của electron gắn với các vị trí này.

Điều này tương tự với độ cao của dân cư. Mỗi người có độ cao riêng nhưng sự phân bố cho chúng ta biết xu hướng rằng một người sẽ có một độ cao cụ thể. Tương tự, ngay cả nếu một electron cư xử

như một hạt, nhiều electron cùng nhau sẽ có một sự phân bố về vị trí được mô tả bởi một sóng. Sự khác biệt là một electron riêng rẽ, ngược lại, lại liên hệ với sóng này.

Hàm xác suất của electron cho biết xác suất tương đối tìm thấy electron tại một vị trí cụ thể. Xác suất đó có một giá trị xác định đối với mỗi điểm trong không gian. Nếu có thể làm nhiều bản chụp của cùng một electron này, ta có thể thực hiện một chuỗi các phép đo vị trí của electron. Ta sẽ tìm thấy rằng số lần ta đo được electron nằm tại một vị trí cụ thể tỷ lệ với hàm xác suất. Một giá trị lớn hơn có nghĩa rằng electron dường như sẽ tìm thấy ở đó nhiều hơn, một giá trị nhỏ hơn có nghĩa là ít được tìm thấy hơn. Sóng phản ánh hiệu ứng tập hợp của nhiều electron.

Mặc dầu bạn vẽ sóng với nhiều electron nhưng điều làm cho cơ học lượng tử đặc biệt là mỗi electron riêng rẽ cũng được mô tả bởi một sóng. Điều này có nghĩa là bạn không bao giờ tiên đoán được mọi thứ liên quan đến electron đó một cách chính xác. Nếu bạn đo vị trí của nó bạn sẽ tìm thấy nó ở một vị trí xác định. Nhưng cho đến khi bạn thực hiện phép đo đó, bạn chỉ có thể dự đoán rằng electron có một xác suất xác định sẽ nằm tại đó. Bạn không thể nói một cách chắc chắn nó sẽ nằm ở đâu.

Lưỡng tính sóng hạt này biểu hiện trong thí nghiệm hai khe nổi tiếng. Cho tới năm 1961, khi nhà vật lý Claus Jönsson người Đức thực sự tiến hành nó trong phòng thí nghiệm, thí nghiệm hai khe của electron chỉ là một thí nghiệm tưởng tượng mà các nhà vật lý dùng để làm sáng tỏ ý nghĩa và hệ quả của hàm sóng của electron. Thí nghiệm bao gồm một máy phát electron gửi các electron qua một tấm chắn có hai khe song song. Các electron đi qua các khe và va vào màn hình ở sau màn chắn, ở đó chúng được ghi lại. Các electron có thể đi qua bất cứ khe nào trong hai khe trước khi chúng va vào màn

hình. Hình ảnh sóng ghi được trên màn hình là kết quả của sự giao thoa của hai quỹ đạo. Thí nghiệm này là một sự bất chước của một thí nghiệm tương tự cho thấy bản chất sóng của ánh sáng ở đầu thế kỷ 19. Khi đó Thomas Young, nhà vật lí, bác sỹ, đồng thời là nhà Ai Cập học\* người Anh, gửi một ánh sáng đơn sắc qua hai khe và quan sát thấy hình ảnh sóng mà ánh sáng tạo ra trên một màn hình phía sau các khe. Thí nghiệm cho thấy rằng ánh sáng thể hiện như một sóng. Hình ảnh tương tự thu được trong thí nghiệm với electron cho thấy bản chất sóng của nó.

Và đúng như vậy, nếu bạn tiến hành thí nghiệm hai khe đối với electron, bạn sẽ thấy những gì mà Young đã thấy đối với ánh sáng: một hình ảnh sóng trên màn hình phía sau hai khe. Trong trường hợp ánh sáng, chúng ta hiểu rằng sóng được gây bởi giao thoa. Một phần ánh sáng đi qua một khe và một phần đi qua khe khác và hình ảnh sóng ghi được phản ánh sự giao thoa giữa hai phần. Nhưng hình ảnh sóng đối với electron có nghĩa như thế nào?

Hình ảnh dạng sóng trên màn hình nói với chúng ta một sự thật khác thường rằng chúng ta nên nghĩ về mỗi electron như đi qua cả hai khe. Bạn không thể biết điều gì về một electron riêng biệt. Mỗi electron có thể đi qua bất cứ khe nào trong hai khe. Mặc dầu mỗi vị trí của electron được ghi lại khi nó chạm màn hình, nhưng không ai biết electron riêng rẽ đã đi qua khe nào trong số hai khe.

Cơ học lượng tử nói với chúng ta rằng một hạt có thể nhận bất cứ quỹ đạo nào từ điểm bắt đầu của nó tới điểm cuối và hàm sóng của hạt phản ánh điều này. Đó là một trong nhiều đặc điểm nổi bật của cơ học lượng tử. Không giống vật lí cổ điển, cơ học lượng tử không gắn mỗi hạt với một quỹ đạo xác định.

---

\* Ông thậm chí còn giúp giải mã Rosetta Stone.

Nhưng bằng cách nào thí nghiệm hai khe có thể chỉ rõ rằng mỗi electron đóng vai trò như một sóng khi chúng ta đã thực sự biết rằng các electron là các hạt? Ngoài ra không có cái gọi là một nửa electron. Mỗi electron riêng rẽ được ghi tại một vị trí xác định. Điều gì đã thực sự xảy ra?

Câu trả lời chính là điều mà tôi đã nói trước đây. Bạn có thể nhìn thấy hình ảnh sóng chỉ khi bạn ghi nhiều electron. Mỗi electron riêng rẽ là một hạt. Nó va vào màn hình tại một vị trí riêng rẽ. Tuy nhiên hiệu ứng chồng chất của nhiều electron đang bắn vào màn hình là một hình ảnh sóng cổ điển, phản ánh sự thật rằng hai quỹ đạo của electron giao thoa.

Kết quả thí nghiệm cho thấy: các hình ảnh giao thoa ghi được sau khi 50, 500, 5000 và 50000 electron bắn qua thực sự giống hình ảnh biểu diễn phân bố của số electron. Điều đó cho thấy rằng hàm sóng của electron thực sự đóng vai trò của một sóng.

Hàm sóng cho biết xác suất mà electron va vào màn hình tại một vị trí xác định. Electron có thể đi bất cứ đâu, nhưng bạn có thể kỳ vọng tìm thấy nó chỉ tại một vị trí cụ thể với một xác suất xác định được cho bởi giá trị của hàm sóng tại điểm đó. Nhiều electron cùng nhau tạo thành sóng mà bạn có thể thu được từ giả thiết rằng electron đi qua cả hai khe.

Vào những năm 1970, Akira Tonamura ở Nhật bản và Piergiorgio Merli, Giulio Pozzi và Gianfranco Missiroli ở Ý thực sự nhìn thấy điều này một cách chính xác trong các thí nghiệm thực. Họ bắn các electron đi qua, mỗi lần một electron, và nhìn thấy hình ảnh sóng phát triển khi có mỗi lúc một nhiều electron va vào màn hình.

Bạn có thể tự hỏi tại sao cần phải đợi đến thế kỷ 20 để chúng ta mới nhận thấy một điều ấn tượng như lưỡng tính sóng hạt. Chẳng



hạn tại sao người ta đã không nhận ra sớm hơn rằng ánh sáng trông giống như một sóng nhưng thực sự được tạo bởi các hạt gián đoạn gọi là photon?

Câu trả lời là không ai trong số chúng ta (với ngoại lệ có thể của các siêu anh hùng) nhìn thấy các photon riêng rẽ\*, bởi vậy các hiệu ứng cơ học lượng tử không thể được phát hiện một cách dễ dàng. Ánh sáng thông thường hiện ra không giống như là nó được tạo bởi các lượng tử. Chúng ta nhìn thấy các chùm photon tạo thành ánh sáng khả kiến. Một số lượng lớn các photon cùng nhau đóng vai trò như một sóng cổ điển.

Bạn cần một nguồn photon rất yếu hoặc một hệ được chuẩn bị rất cẩn thận để quan sát bản chất lượng tử của ánh sáng. Khi có quá nhiều photon, bạn không thể phân biệt hiệu ứng của một photon đơn lẻ nào. Việc bổ sung thêm một photon vào ánh sáng cổ điển, vốn chứa nhiều photon, không tạo nên một sự khác biệt đủ lớn. Nếu bóng đèn của bạn, cứ xử một cách cổ điển, phát xạ thêm một photon, thì bạn không bao giờ nhận biết được. Bạn có thể quan sát hiện tượng lượng tử một cách chi tiết chỉ trong các hệ được chuẩn bị cẩn thận.

Nếu bạn không tin rằng photon bổ sung này thường không có ý nghĩa, bạn hãy nghĩ xem bạn cảm thấy thế nào khi bạn đi tới địa điểm bầu cử. Có phải thực sự chỉ tốn thời gian và rắc rối để đi bầu khi bạn biết rằng việc bầu của bạn không thể tạo nên một sự khác biệt đối với kết quả vì hàng triệu người khác đang bầu? Với ngoại lệ nổi bật của Florida, một bang bất định, một phiếu bầu thường không có ý nghĩa giữa đám đông. Mặc dầu việc bầu cử được quyết định bởi hiệu ứng chồng chất của các phiếu bầu riêng rẽ song một phiếu bầu riêng rẽ hiếm khi thay đổi kết quả. (Và để so sánh ở một mức sâu

---

\* Con người thực sự có khả năng phát hiện các photon riêng rẽ, nhưng chỉ trong các thí nghiệm được chuẩn bị cẩn thận. Thông thường, bạn thấy các ánh sáng chuẩn tạo bởi nhiều photon hơn.

hơn, bạn cũng có thể quan sát thấy rằng chỉ trong các hệ lượng tử - và ở Florida, thể hiện như một bang lượng tử - các thí nghiệm được lặp lại mới tạo ra các kết quả khác nhau).

### ***Nguyên lý bất định Heisenberg***

Bản chất sóng của vật chất có nhiều ý nghĩa khác thường. Bây giờ chúng ta sẽ chuyển từ sự bất định trong bầu cử sang nguyên lý bất định Heisenberg, một điều yêu thích của các nhà vật lí.

Nhà vật lí Werner Heisenberg người Đức là một trong những người tiên phong chính của cơ học lượng tử. Trong tiểu sử tự thuật của mình, ông kể các ý tưởng cách mạng của ông về nguyên tử và cơ học lượng tử đã bắt đầu nảy nở như thế nào khi ông đang đóng quân tại Trường đào tạo về thần học ở Munich, nơi ông đóng quân vào năm 1919 để chống lại quân Bavarian. Sau khi tiếng súng giảm bớt, ông ngồi trên tầng thượng của trường và đọc về các cuộc đối thoại của Plato, đặc biệt là *Timaeus*. Bản văn của Plato thuyết phục Heisenberg rằng “để giải thích thế giới vật chất, chúng ta cần biết đôi điều về những phần nhỏ nhất của nó”<sup>\*</sup>.

Heisenberg chán ghét những sự biến động bên ngoài bao quanh ông thời trẻ; ông ưa thích trở về với “những nguyên tắc của cuộc sống Prussian, giảm bớt tham vọng cá nhân vì quyền lợi chung, giản dị trong cuộc sống riêng tư, trung thực và liêm khiết, dũng cảm và đúng hẹn”<sup>+</sup>. Ngược lại, với nguyên lý bất định, Heisenberg đã làm thay đổi một cách tất yếu cách nhìn nhận thế giới của mọi người. Có lẽ thời đại đầy biến động mà Heisenberg sống đã cho ông cách tiếp cận mang tính thay đổi hoàn toàn đối với khoa học, nếu không phải

---

<sup>\*</sup> Werner Heisenberg, *Vật lý học và hơn thế nữa: Những cuộc đấu trí và đàm luận*, dịch bởi Arnold Pomerans (New York: Harper & Row, 1971).

<sup>+</sup> Sdd. Do chủ nghĩa dân tộc Đức, ông cũng tham gia đề án bom nguyên tử của Đức.

đối với chính trị\*. Bất luận thế nào, tôi cũng thấy hơi trở trêu rằng tác giả của nguyên lý bất định là con người của những khuynh hướng đối lập nhau như vậy.

Nguyên lý bất định nói rằng một số cặp đại lượng nhất định có thể không bao giờ được đo chính xác đồng thời. Đây là một sự khác biệt lớn so với vật lí học cổ điển. Vật lí học cổ điển giả thiết rằng, tối thiểu về mặt nguyên tắc, bạn có thể đo tất cả các đại lượng đặc trưng của một hệ vật lí – chẳng hạn toạ độ và xung lượng - chính xác đến mức nào mà bạn muốn.

Các cặp đại lượng nhất định đó là các cặp đại lượng mà việc bạn muốn đo đại lượng nào trước là có ý nghĩa. Ví dụ nếu bạn đã đo toạ độ và sau đó đo xung lượng (là đại lượng cho biết cả tốc độ và hướng) thì bạn sẽ không thu được cùng kết quả như trước hết bạn đo xung lượng và sau đó đo toạ độ. Điều này không xảy ra trong vật lí cổ điển, và chắc chắn là không thể là điều quen thuộc đối với chúng ta. Thứ tự của các phép đo có ý nghĩa chỉ trong cơ học lượng tử và nguyên lý bất định nói rằng đối với hai đại lượng mà ở đó thứ tự của phép đo có ý nghĩa thì tích của các độ bất định của hai đại lượng sẽ luôn luôn lớn hơn một hằng số cơ bản, gọi là hằng số Planck,  $h$ , bằng  $6,582 \cdot 10^{-25} \text{ GeV} \cdot \text{s}^+$ . Nếu bạn muốn biết toạ độ rất chính xác thì bạn không thể biết xung lượng với cùng độ chính xác, và ngược lại. Dù cho dụng cụ đo của bạn có chính xác đến đâu và dù bạn đo bao nhiêu lần thì bạn cũng không thể đo được đồng thời cả hai đại lượng với một độ chính xác rất cao.

Sự xuất hiện của hằng số Planck trong nguyên lý bất định đưa ra một cảm nhận tốt về mặt trực giác. Hằng số Planck là đại lượng xuất hiện chỉ với cơ học lượng tử. Nhớ lại rằng theo cơ học lượng tử,

---

\* Gerald Holton, *Sự tiến bộ của khoa học và những nhiệm vụ nặng nề của nó*, (Cambridge, MA: Harvard University Press, 1998).

+ GeV là một đơn vị năng lượng mà tôi sắp giải thích.

lượng tử năng lượng của một hạt có tần số xác định bằng hằng số Planck nhân với tần số đó. Nếu vật lí cổ điển thống trị thế giới thì hằng số Planck sẽ bằng 0 và không có lượng tử cơ bản.

Nhưng trong cách mô tả đúng theo cơ học lượng tử về thế giới, hằng số Planck là một đại lượng cố định, khác không. Và con số đó nói với chúng ta về độ bất định. Về nguyên tắc, bất cứ đại lượng riêng rẽ nào cũng có thể được biết một cách chính xác. Đôi khi các nhà vật lí nhắc tới *sự sụp đổ của hàm sóng* để xác định rằng một đại lượng nào đó đã được đo chính xác và bởi vậy có một giá trị xác định. Từ “sụp đổ” liên quan tới dạng của hàm sóng, không tiếp tục trải ra mà nhận một giá trị khác 0 tại một vị trí xác định vì xác suất đo được bất cứ giá trị khác cũng bằng 0. Trong trường hợp này - khi một đại lượng được đo chính xác, nguyên lý bất định nói với bạn rằng sau phép đo bạn không thể biết được gì về đại lượng khác kết cặp với đại lượng được đo trong nguyên lý bất định. Bạn sẽ có độ bất định không xác định về giá trị của đại lượng khác đó. Tất nhiên, mỗi khi bạn đo đại lượng thứ hai trước thì đại lượng thứ nhất sẽ là đại lượng mà bạn không biết. Dù theo cách nào thì bạn biết một đại lượng càng chính xác thì phép đo đại lượng kia càng kém chính xác.

Tôi sẽ không đi vào việc dẫn ra chi tiết nguyên lý bất định trong cuốn sách này, nhưng ngược lại tôi sẽ cố gắng đưa ra dư vị về nguồn gốc của nó. Vì điều này không cần thiết đối với những gì tiếp sau nên bạn hãy tự do bỏ qua và chuyển tới phần khác. Nhưng có thể bạn muốn biết đôi điều về lập luận làm cơ sở của sự bất định.

Trong phần dẫn ra nguồn gốc của nguyên lý bất định này, tôi sẽ tập trung vào hệ thức bất định giữa thời gian và năng lượng. Hệ thức này có hơi dễ giải thích và dễ hiểu hơn. Hệ thức bất định giữa thời gian và năng lượng liên hệ độ bất định về năng lượng (và bởi vậy, theo giả thiết Planck, tần số) với khoảng thời gian đặc trưng

cho tốc độ thay đổi của hệ. Nghĩa là tích của độ bất định về năng lượng và thời gian đặc trưng để hệ thay đổi luôn lớn hơn hằng số Planck,  $h$ .

Một sự thực hiện về mặt vật lí của hệ thức bất định giữa thời gian và năng lượng xảy ra, chẳng hạn, khi bạn bật công tắc đèn và nghe thấy nhiễu từ một máy thu thanh ở gần. Việc bật công tắc đèn tạo ra một dải lớn các tần số radio. Sở dĩ như vậy là do lượng điện tích đi qua dây dẫn thay đổi rất nhanh, bởi vậy khoảng năng lượng (và do đó tần số) phải lớn. Radio của bạn thu nó dưới dạng nhiễu.

Để hiểu về nguồn gốc của nguyên lý bất định, bây giờ chúng ta hãy xem xét một ví dụ rất khác – vòi nước có lỗ rò\*. Chúng ta sẽ chỉ ra rằng bạn cần một phép đo trong thời gian dài để xác định chính xác tốc độ nhỏ giọt của vòi nước, mà chúng ta sẽ thấy rất giống với phát biểu của nguyên lý bất định. Một vòi nước và nước đi qua nó, liên quan tới nhiều nguyên tử, là một hệ quá phức tạp để thể hiện các hiệu ứng quan sát được của cơ học lượng tử. Các hiệu ứng đó bị che lấp bởi các quá trình cổ điển. Ngược lại, đúng là bạn cần các phép đo lâu hơn để xác định tần số chính xác hơn – và đó là cốt lõi của nguyên lý bất định. Một hệ cơ học lượng tử sẽ chọn sự phụ thuộc lẫn nhau này làm một bước tiếp theo vì đối với một hệ cơ học lượng tử được chuẩn bị cẩn thận, năng lượng và tần số liên hệ với nhau. Vì vậy, đối với một cơ học lượng tử, hệ thức giữa độ bất định về tần số và khoảng thời gian đo (giống như ví dụ mà chúng ta sắp thấy) được chuyển thành hệ thức bất định đúng giữa năng lượng và thời gian.

Giả sử rằng nước nhỏ giọt với tốc độ một giọt mỗi giây. Liệu bạn có thể đo tốc độ chính xác như thế nào nếu đồng hồ bấm của bạn

---

\* Trong ví dụ này chúng ta giả thiết rằng vòi nước nhỏ giọt không đều. Điều này không phải luôn đúng đối với các vòi nước thực.

có độ chính xác một giây – nghĩa là nó có thể ngừng nhiều nhất là một giây? Nếu bạn đợi một giây, bạn sẽ thấy chỉ một giọt, bạn có thể kết luận rằng vòi nước nhả một giọt mỗi giây.

Tuy nhiên, do đồng hồ bấm của bạn có thể dừng tối đa một giây nên việc quan sát của bạn không nói với bạn một cách chính xác vòi nước nhỏ giọt trong bao lâu. Nếu đồng hồ của bạn nhảy một lần, thời gian có thể hơi dài hơn một giây, hoặc nó cũng có thể gần hai giây. Bạn có thể nói vòi nước nhả trong khoảng thời gian nào, giữa một và hai giây? Nếu không có đồng hồ bấm tốt hơn hoặc không có phép đo lâu hơn, sẽ không có câu trả lời thích hợp. Với chiếc đồng hồ mà bạn có, bạn chỉ có thể kết luận rằng các giọt nước rơi tại một giá trị nào đó trong khoảng giữa một giọt mỗi giây và một giọt trong hai giây. Nếu bạn nói rằng vòi nhả một giọt mỗi giây, bạn có thể phạm sai số 100% trong phép đo của bạn.

Nhưng giả sử rằng thay vào đó, bạn đã đợi 10 giây trong khi tiến hành phép đo của bạn. Khi đó 10 giọt nước đã rơi xuống trong khoảng thời gian để đồng hồ của bạn nhảy 10 lần. Với đồng hồ bấm tồi, có độ chính xác chỉ một giây, tất cả những gì mà bạn có thể thực sự rút ra là thời gian cần để 10 giọt nước rơi là một giá trị nào đó trong khoảng từ 10 đến 11 giây. Phép đo của bạn, lại một lần nữa, nói rằng các giọt nước rơi xấp xỉ một giọt mỗi giây, bây giờ có sai số chỉ 10%. Đó là do bằng cách đợi 10 giây bạn có thể đo tần số tới  $1/10$  của một giây. Chú ý rằng tích của thời gian để bạn đo (10 giây) và độ bất định về tần số (10%, hoặc 0,1) là xấp xỉ 1. Cũng cần chú ý rằng tích của độ bất định về tần số và thời gian để đo trong ví dụ thứ nhất, có sai số lớn hơn trong phép đo tần số (100%) nhưng thực hiện trong một khoảng thời gian ngắn hơn (1 giây), cũng vào khoảng 1.

Bạn có thể tiếp tục theo hướng này. Nếu bạn thực hiện phép đo trong 100 giây thì bạn có thể đo tần số với một độ chính xác của sự

nhỉ của nước một lần trong 100 giây. Nếu bạn đo sự nhĩ của nước trong 1000 giây thì bạn có thể đo tần số với độ chính xác 1 lần trên 1 nghìn giây. Trong tất cả các trường hợp đó, tích của khoảng thời gian mà bạn tiến hành phép đo và độ chính xác của phép đo tần số của bạn đều vào khoảng  $1^*$ . Thời gian lâu hơn đòi hỏi để đo tần số chính xác hơn là cốt lõi của hệ thức bất định giữa thời gian và năng lượng. Bạn có thể đo tần số chính xác hơn, nhưng để làm điều đó bạn phải đo lâu hơn. Tích của thời gian và độ bất định về tần số luôn luôn vào khoảng  $1^+$ .

Để kết thúc việc dẫn ra nguyên lý bất định đơn giản của chúng ta, nếu bạn có một hệ cơ học lượng tử đủ đơn giản – một photon đơn lẻ chẳng hạn – năng lượng của nó sẽ bằng hằng số Planck,  $h$  nhân với tần số. Với một vật thể như vậy, tích của khoảng thời gian mà bạn đo năng lượng và sai số của năng lượng luôn lớn hơn  $h$ . Bạn có thể đo năng lượng của nó chính xác đến mức nào mà bạn muốn, nhưng phép đo của bạn sẽ phải tiến hành trong một khoảng thời gian dài hơn, một cách tương ứng. Đây là hệ thức bất định tương tự mà chúng ta vừa dẫn ra. Sự thay đổi chỉ là hệ thức lượng tử hoá liên hệ năng lượng và tần số.

### ***Hai giá trị năng lượng quan trọng và những gì nguyên lý bất định nói với chúng ta về chúng***

Đã sắp kết thúc phần giới thiệu của chúng ta về những cơ sở của cơ học lượng tử. Phần này và phần tiếp theo tóm tắt hai yếu tố còn lại của cơ học lượng tử mà chúng ta sẽ dùng sau này.

---

\* Tôi không dẫn ra con số chính xác ở đây.

+ Lập luận nói trên chưa thực sự đầy đủ để giải thích một cách đầy đủ nguyên lý bất định vì bạn không bao giờ chắc chắn được rằng bạn đang tần số đúng nếu bạn đo chỉ trong một khoảng thời gian hữu hạn. Liệu vài nước có chảy nhỏ giọt mãi mãi hay nó chỉ chảy nhỏ giọt trong khi bạn thực hiện phép đo? Mặc dầu hơi khó mô tả hơn, song bạn không bao giờ **làm được tốt hơn** chính nguyên lý bất định, ngay cả nếu bạn có đồng hồ bấm chính xác hơn.

Phần này, không liên quan tới bất cứ nguyên tắc vật lí mới nào, trình bày một ứng dụng quan trọng của nguyên lý bất định và thuyết tương đối hẹp. Nó khảo sát mối liên hệ giữa hai giá trị năng lượng quan trọng và các thang độ dài nhỏ nhất của các quá trình vật lí mà đối với chúng các hạt với giá trị năng lượng đó có thể nhảy – những mối liên hệ mà các nhà vật lí hạt thường dùng. Phần tiếp theo sẽ giới thiệu spin, boson và fermion – những khái niệm sẽ xuất hiện trong chương tiếp theo về Mô hình chuẩn của vật lí hạt và sau đó khi chúng ta khảo sát siêu đối xứng.

Nguyên lý bất định về toạ độ - xung lượng nói rằng tích của các bất định về toạ độ và xung lượng phải vượt quá hằng số Planck. Nó nói với chúng ta rằng bất cứ thứ gì - dù đó là một chùm ánh sáng, một hạt hoặc bất cứ vật thể hoặc hệ nào khác mà chúng ta có thể nghĩ tới, nhảy với các quá trình vật lí diễn ra ở các khoảng cách ngắn – phải liên quan với một khoảng xung lượng lớn (vì xung lượng phải rất bất định). Đặc biệt, bất cứ vật thể nào nhảy với các quá trình vật lí này phải liên quan với xung lượng rất cao. Theo thuyết tương đối hẹp, khi xung lượng lớn thì năng lượng cũng lớn. Việc kết hợp hai điều này nói với chúng ta rằng cách duy nhất để khảo sát các khoảng cách ngắn là dùng năng lượng cao.

Một cách khác để giải thích điều này là nói rằng chúng ta cần các năng lượng lớn để khảo sát các khoảng cách bé vì chỉ các hạt mà hàm sóng của chúng thay đổi trên các khoảng cách bé mới bị ảnh hưởng bởi các quá trình vật lí diễn ra ở các khoảng cách bé. Giống như Vermeer đã không thể thực hiện được bức tranh của mình với một cái chổi rộng 2 inch, và bạn không thể nhìn thấy các chi tiết nhỏ với thị giác mờ, các hạt không thể nhảy đối với các quá trình vật lí ở khoảng cách ngắn trừ khi hàm sóng của chúng thay đổi chỉ trên các khoảng cách ngắn. Nhưng theo de Broglie, các hạt mà hàm sóng của



chúng liên quan tới các bước sóng ngắn có xung lượng lớn. De Broglie nói rằng bước sóng của một sóng – hạt tỷ lệ nghịch với xung lượng của nó. Bởi vậy de Broglie cũng cho phép chúng ta kết luận rằng bạn cần xung lượng lớn, và bởi vậy năng lượng lớn, để nhạy với vật lí của các khoảng cách ngắn.

Điều này có các hệ quả quan trọng đối với vật lí hạt. Chỉ các hạt có năng lượng cao mới cảm nhận các hiệu ứng của các quá trình vật lí ở khoảng cách ngắn. Chúng ta sẽ thấy trong hai trường hợp cụ thể điều tôi nói có nghĩa như thế nào.

Các nhà vật lí hạt thường đo năng lượng theo bội số của *electronvolt*, kí hiệu là eV, và phát âm bằng cách đọc các chữ cái “e-V”. Một eV là năng lượng cần thiết để di chuyển một electron ngược hiệu điện thế 1 V, giống như hiệu điện thế có thể cung cấp bởi một ắc quy rất yếu. Tôi cũng sẽ dùng các đơn vị *gigaelectronvolt* hay GeV (đọc là “G-e-V”) và *teraelectronvolt* hay TeV; một GeV là một tỷ eV và một TeV là một ngàn tỷ eV (hoặc 1000 GeV).

Các nhà vật lí hạt thấy rằng sẽ là thuận tiện nếu dùng các đơn vị này để đo không chỉ năng lượng, mà cả khối lượng. Chúng ta có thể làm điều này do các hệ thức của thuyết tương đối hẹp giữa khối lượng, xung lượng và năng lượng nói với chúng ta rằng ba đại lượng này liên hệ với nhau thông qua tốc độ ánh sáng, là một hằng số,  $c = 299.792.458 \text{ m/s}$ . Bởi vậy, chúng ta có thể dùng tốc độ ánh sáng để chuyển một năng lượng xác định thành khối lượng hoặc xung lượng. Ví dụ công thức nổi tiếng của Einstein  $E = mc^2$  có nghĩa rằng có một khối lượng xác định liên hệ với một năng lượng cụ thể. Vì mọi người biết rằng hệ số chuyển đổi là  $c^2$  nên chúng ta có thể kết hợp nó và biểu diễn khối lượng theo đơn vị eV. Khối lượng của proton theo đơn vị này là 1 tỷ eV – tức là 1 GeV.

Việc chuyển các đơn vị theo cách này cũng tương tự như cách bạn làm hàng ngày khi bạn nói với ai đó, ví dụ, rằng “nhà ga cách đây 10 phút”. Bạn đang giả thiết một hệ số chuyển đổi cụ thể. Khoảng cách có thể là một nửa dặm, tương ứng với 10 phút đi bộ, hoặc cũng có thể là 10 dặm tương ứng với 10 phút trên đường cao tốc. Có một thừa số chuyển đổi ngầm định giữa bạn và đối tác đang nói chuyện với bạn.

Các hệ thức của thuyết tương đối hẹp này, phù hợp với nguyên lý bất định, xác định kích cỡ không gian tối thiểu của các quá trình vật lí mà một sóng hoặc một hạt với năng lượng hoặc khối lượng xác định có thể thể hiện hoặc phát hiện. Bây giờ chúng ta sẽ áp dụng các hệ thức này đối với hai giá trị năng lượng rất quan trọng đối với vật lí hạt.

Năng lượng đầu tiên, cũng được gọi là năng lượng thang yếu, bằng 250 GeV. Các quá trình vật lí tại năng lượng này xác định các tính chất chính của lực yếu và của các hạt cơ bản, đặc biệt nhất là cách thức chúng thu được khối lượng. Các nhà vật lí (kể cả tôi) hy vọng rằng khi chúng ta khảo sát năng lượng này, chúng ta sẽ thấy các hiệu ứng mới được tiên đoán bởi các lý thuyết vật lí mà cho đến nay chúng ta còn chưa biết và biết thêm nhiều điều về cấu trúc cơ bản của vật chất. May mắn là các thí nghiệm sắp sửa khám phá năng lượng thang yếu và sẽ sớm có thể nói với chúng ta về những điều chúng ta muốn biết.

Đôi khi tôi cũng nói tới khối lượng thang yếu, liên hệ với năng lượng thang yếu thông qua tốc độ ánh sáng. Theo các đơn vị khối lượng thuận tiện hơn thì khối lượng thang yếu là  $10^{-21}$  g. Nhưng như tôi vừa giải thích, các nhà vật lí hạt thường thích nói về khối lượng theo đơn vị GeV.

Độ dài thang yếu tương ứng là  $10^{-16}$  cm, hoặc một phần mười ngàn ngàn tỷ của cm. Đó là khoảng cách của lực yếu – khoảng cách cực đại mà qua đó các hạt có thể ảnh hưởng lên nhau thông qua lực này.

Do hệ thức bất định nói với chúng ta rằng các khoảng cách bé được thám hiểm chỉ với năng lượng cao, nên độ dài thang yếu cũng chính là độ dài tối thiểu mà một đối tượng với năng lượng 250 GeV có thể chạm – có nghĩa là đó là thang nhỏ nhất mà ở đó các quá trình vật lí có thể ảnh hưởng lên nó. Nếu các khoảng cách nhỏ hơn có thể được thám hiểm với giá trị năng lượng đó thì độ bất định về khoảng cách sẽ bé hơn  $10^{-16}$  cm, và mối liên hệ giữa các độ bất định của khoảng cách và xung lượng sẽ bị vi phạm. Máy gia tốc hiện đang hoạt động tại Fermilab và Máy gia tốc va chạm hadron lớn (Large Hadron Collider - LHC), được xây dựng tại CERN ở Geneva, thám hiểm các quá trình vật lí ở thang năng lượng đó.

Giá trị năng lượng quan trọng thứ hai, được gọi là năng lượng thang Planck,  $M_{Pl}$ , bằng  $10^{19}$  GeV. Năng lượng này liên quan mật thiết với bất cứ lý thuyết nào về lực hấp dẫn. Chẳng hạn hằng số hấp dẫn, có mặt trong định luật về lực hấp dẫn của Newton, tỷ lệ nghịch với bình phương của năng lượng thang Planck. Lực hút hấp dẫn giữa hai vật có khối lượng là bé vì năng lượng thang Planck lớn.

Ngoài ra năng lượng thang Planck là năng lượng lớn nhất mà ở đó một lý thuyết cổ điển về hấp dẫn có thể áp dụng được; vượt khỏi năng lượng thang Planck, một lý thuyết lượng tử về hấp dẫn, mô tả một cách phù hợp cả cơ học lượng tử và lực hấp dẫn, là cần thiết. Sau này khi chúng ta thảo luận về lý thuyết dây chúng ta cũng sẽ thấy rằng trong các mô hình lý thuyết dây cổ điển, độ căng của một dây rất có thể được xác định bởi năng lượng thang Planck.

Cơ học lượng tử và nguyên lý bất định nói với chúng ta rằng khi các hạt thu được năng lượng này, chúng nhạy với các quá trình vật lí ở các khoảng cách ngắn cỡ *độ dài thang Planck\**, bằng  $10^{-33}$  cm. Đây là một khoảng cách cực kỳ nhỏ – nhỏ hơn rất nhiều so với các khoảng cách có thể đo được. Nhưng để mô tả các quá trình vật lí diễn ra trên các khoảng cách nhỏ như vậy thì một lý thuyết về hấp dẫn lượng tử là cần thiết, và lý thuyết đó phải là lý thuyết dây. Vì lý do đó độ dài thang Planck, cùng với năng lượng thang Planck, là các thang quan trọng.

### ***Boson và fermion***

Cơ học lượng tử đưa ra sự phân loại quan trọng đối với các hạt, chia thế giới các hạt thành boson và fermion. Các hạt đó có thể là các hạt cơ bản chẳng hạn như các electron và các quark, hoặc là các hạt phức hợp như proton hoặc hạt nhân nguyên tử. Mỗi vật thể hoặc là boson, hoặc là fermion.

Việc một vật thể như vậy là một boson hay là một fermion phụ thuộc vào một tính chất được gọi là *spin nội tại*. Tên gọi này rất gợi nhớ, nhưng “spin” của các hạt không hề liên quan tới chuyển động thực nào trong không gian. Nhưng nếu một hạt có spin nội tại, nó tương tác giống như là nó đang quay, mặc dầu trong thực tế không phải như vậy.

Chẳng hạn tương tác giữa một electron và từ trường phụ thuộc vào sự quay cổ điển của electron – tức là sự quay thực sự của nó trong không gian. Nhưng tương tác của electron với từ trường cũng phụ thuộc vào spin nội tại của electron. Không giống spin cổ điển,

---

\* Đây cũng chính là đại lượng mà tôi đã gọi một cách đơn giản là “độ dài Planck” trong các chương trước.

xuất hiện từ chuyển động thực trong không gian vật lí\*, spin nội tại là một tính chất của hạt. Nó là cố định và có một giá trị xác định không đổi. Ví dụ photon là một boson có spin-1. Đó là một tính chất của photon; điều này cũng cơ bản như sự thật rằng photon chuyển động với tốc độ ánh sáng.

Trong cơ học lượng tử, spin bị lượng tử hoá. Spin lượng tử có thể nhận giá trị 0 (nghĩa là không có spin) hoặc 1, hoặc 2, hoặc bất cứ đơn vị số nguyên nào của spin... Tôi sẽ gọi chúng là spin-0, spin-1, spin-2... Các vật thể được gọi là boson, mang tên nhà vật lí Satyendra Nath Bose người Ấn Độ, có spin nội tại – spin cơ học lượng tử không phụ thuộc vào sự quay – và đó cũng là một số nguyên: các boson có thể có spin nội tại bằng 0,1,2...

Spin của fermion bị lượng tử hoá theo các đơn vị mà không ai nghĩ là có thể trước khi cơ học lượng tử ra đời. Các fermion, mang tên nhà vật lí Enrico Fermi người Ý, có các giá trị bán nguyên, chẳng hạn 1/2 hoặc 3/2. Trong khi một vật thể spin-1 trở về cấu hình ban đầu của nó sau khi nó quay một lần thì một hạt spin-1/2 trở về cấu hình ban đầu của nó chỉ sau khi quay hai lần. Mặc dầu có sự kỳ lạ của các giá trị bán nguyên của spin của fermion, proton, neutron và electron đều là các fermion với spin-1/2. Điều cơ bản là tất cả vật chất quen thuộc tạo bởi các hạt spin-1/2.

Bản chất fermion của hầu hết các hạt cơ bản xác định nhiều tính chất của vật chất xung quanh chúng ta. Đặc biệt, *nguyên lý loại trừ Pauli* nói rằng hai fermion cùng loại không bao giờ được tìm thấy tại cùng một vị trí. Nguyên lý loại trừ quy định cấu trúc của nguyên tử mà hoá học dựa vào đó. Do các electron với cùng spin

---

\* Đối với những người đã biết đôi chút về vật lí, đây là mô men xung lượng quỹ đạo.

không thể ở cùng vị trí nên chúng phải ở trên các quỹ đạo khác nhau.

Đó là lý do tại sao trước đây tôi có thể đưa ra một sự tương tự với các tầng khác nhau của một toà nhà cao tầng. Các tầng khác nhau biểu diễn các quỹ đạo electron bị lượng tử hoá khả dĩ khác nhau mà nguyên lý loại trừ Pauli nói với chúng ta rằng các quỹ đạo đó bị chiếm giữ khi một hạt nhân bị bao bọc bởi nhiều electron. Nguyên lý loại trừ cũng là lý do làm bạn không thể chọc tay qua bàn hoặc không thể rơi vào tâm Trái đất. Những chiếc bàn và tay của bạn có cấu trúc rắn là do nguyên lý bất định quy định cấu trúc nguyên tử, phân tử và tinh thể trong vật chất. Các electron trong tay của bạn, giống như các electron trong bàn, không có chỗ để di chuyển khi bạn chạm vào bàn. Không có hai fermion giống nhau nào có thể nằm ở cùng một vị trí tại cùng một thời điểm, bởi vậy vật chất không bị suy sụp.

Các boson thể hiện hoàn toàn ngược lại so với các fermion. Chúng có thể và sẽ được tìm thấy tại cùng vị trí. Các boson cũng giống như những con cá sấu – chúng thích xếp chồng lên đầu nhau. Nếu bạn chiếu ánh sáng vào nơi đã có ánh sáng nó sẽ cư xử rất khác với việc tay của bạn chọt lên bàn. Ánh sáng, được tạo bởi các photon là boson, đi qua ánh sáng. Hai chùm sáng có thể chiếu chính xác cùng một vị trí. Thực vậy laser hoạt động dựa trên điều đó: các boson chiếm giữ cùng trạng thái cho phép các laser tạo ra các chùm sáng kết hợp, mạnh của chúng. Các chất siêu lỏng và các chất siêu dẫn cũng tạo bởi các boson.

Một ví dụ điển hình của các tính chất boson là ngưng tụ Bose - Einstein, trong đó nhiều hạt giống nhau đóng vai trò cùng nhau như chỉ là một hạt - điều mà các fermion, phải nằm tại các vị trí khác nhau, không bao giờ làm được. Ngưng tụ Bose - Einstein là có thể

chỉ vì các boson mà chúng tạo bởi, không giống các fermion, có thể có các tính chất giống hệt nhau. Vào năm 2001, Eric Cornell, Wolfgang Ketterle và Carl Wieman nhận giải Nobel về vật lí do sự thực hiện về mặt thực nghiệm của họ đối với ngưng tụ Bose - Einstein. Sau này tôi sẽ không cần các tính chất chi tiết này về cách thức cư xử của các fermion và boson. Dữ kiện duy nhất mà tôi sẽ dùng từ phần này là các hạt cơ bản có spin nội tại và có thể thể hiện như là chúng đang quay theo hướng này hoặc hướng khác và tất cả các hạt có thể được đặc trưng bởi việc chúng là boson hoặc fermion.

### ***Ghi nhớ***

- Cơ học lượng tử nói với chúng ta rằng vật chất và ánh sáng tạo bởi các đơn vị gián đoạn gọi là *lượng tử*. Ví dụ, ánh sáng, trông có vẻ liên tục, thực tế được tạo bởi các lượng tử gián đoạn gọi là photon.
- Lượng tử là cơ sở của vật lí hạt. Mô hình chuẩn của vật lí hạt, giải thích vật chất và các lực đã biết, nói với chúng ta rằng tất cả vật chất và các lực, cuối cùng, có thể được giải thích theo các hạt và tương tác của chúng.
- Cơ học lượng tử cũng nói với chúng ta rằng mọi hạt có một sóng tương ứng, được gọi là *hàm sóng* của hạt. Bình phương của sóng này chính là xác suất mà hạt được tìm thấy tại một vị trí cụ thể. Để thuận tiện, đôi khi tôi sẽ nói về *sóng xác suất*, là bình phương của hàm sóng thường được dùng hơn. Giá trị của sóng xác suất này cho xác suất trực tiếp. Một sóng như vậy sau này sẽ xuất hiện khi chúng ta thảo luận về *graviton*, hạt truyền lực hấp dẫn. Sóng xác suất cũng sẽ quan trọng khi thảo luận về *các*

*mốt Kaluza – Klein (KK)*, là các hạt có xung lượng dọc theo các chiều bổ sung - nghĩa là vuông góc với các chiều thông thường.

- Một sự phân biệt cơ bản khác giữa vật lí cổ điển và cơ học lượng tử là cơ học lượng tử nói với chúng ta rằng bạn không thể xác định chính xác quỹ đạo của một hạt – bạn không bao giờ biết quỹ đạo chính xác của hạt khi nó đi từ điểm xuất phát của nó tới đích. Điều này nói với chúng ta rằng chúng ta phải xem xét tất cả các quỹ đạo mà một hạt có thể chọn khi nó truyền một lực do các quỹ đạo lượng tử có thể liên quan với bất cứ hạt tương tác nào nên các hiệu ứng cơ học lượng tử có thể ảnh hưởng tới các khối lượng và cường độ tương tác.
- Cơ học lượng tử chia các hạt thành boson và fermion. Sự tồn tại của hai nhóm riêng biệt của các hạt là điểm thiết yếu đối với cấu trúc của Mô hình chuẩn và đối với một mở rộng được đề xuất của Mô hình chuẩn là *siêu đối xứng*.
- *Nguyên lý bất định* của cơ học lượng tử, kết hợp với các hệ thức của thuyết tương đối hẹp, nói với chúng ta rằng bằng cách sử dụng các hằng số vật lí, chúng ta có thể liên hệ khối lượng, năng lượng và xung lượng của một hạt với kích cỡ tối thiểu của vùng mà trong đó một hạt có năng lượng như vậy có thể cảm nhận các lực hoặc các tương tác.
- Hai trong số những ứng dụng phổ biến nhất của các hệ thức này liên quan tới hai giá trị năng lượng được gọi là *năng lượng thang yếu* và *năng lượng thang Planck*. Năng



lượng thang yếu bằng 250 GeV và năng lượng Planck lớn hơn nhiều – 10 triệu ngàn tỷ GeV.

- Chỉ các lực với khoảng cách nhỏ hơn một phần trăm triệu tỷ ( $10^{-17}$ ) của cm mới tạo ra các hiệu ứng đo được trên một hạt với năng lượng thang yếu. Đây là một khoảng cách rất bé, nhưng nó liên quan tới các quá trình vật lí trong hạt nhân và với cơ chế mà theo đó các hạt thu được khối lượng.
- Dù rất bé, độ dài thang yếu lớn hơn nhiều so với độ dài thang Planck, bằng một phần triệu tỷ tỷ tỷ ( $10^{-33}$ ) của cm. Đó là kích cỡ của vùng mà ở đó các lực ảnh hưởng lên các hạt có năng lượng thang Planck. Năng lượng thang Planck xác định cường độ của lực hấp dẫn; đó là năng lượng mà các hạt phải có để lực hấp dẫn trở thành một lực mạnh.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. **Bài tập và lời giải Cơ học lượng tử**, Yung-Kuo Lim (chủ biên), NXB GD, Hà nội, 2008.
2. **Bài tập Vật lí lí thuyết tập 2**, Nguyễn Hữu Minh (chủ biên), NXB ĐHQG, Hà nội, 2001.
3. **Cơ học lượng tử**, Phạm Quý Tư, Đỗ Đình Thanh, NXB ĐHQG, Hà nội, 2005.
4. **Hình thức luận Dirac trong Quang học lượng tử**, Nguyễn Đức Vĩnh, Luận văn thạc sĩ Vật lí, Trường Đại học Vinh, 2008.
5. **Introductory Quantum Mechanics** (2<sup>nd</sup> edition), Richard L. Liboff, Addison-Wesley Publishing Company, 1993.
6. **Modern Quantum Mechanics**, J. J. Sakurai, San Fu Tuan, Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
7. **Warped Passages – Unraveling the Mysteries of the Universe’s Hidden Dimensions**, Lisa Randall, Harper Perennial, 2005.

**MỤC LỤC**

|  | Trang |
|--|-------|
| Lời nói đầu  | 2     |
| Chương I: Mở đầu   | 3     |
| Chương II: Các tiên đề của Cơ học lượng tử. Toán tử, hàm riêng và trị riêng  | 10    |
| Chương III: Hạt chuyển động trong hố thế   | 18    |
| Chương IV: Dao động tử điều hoà  | 27    |
| Chương V: Bài toán trị ban đầu. Hàm của toán tử  | 33    |
| Chương VI: Lí thuyết nhiễu loạn  | 39    |
| Chương VII: Các nguyên tử một electron   | 49    |
| Chương VIII: Cơ học ma trận  | 59    |
| Chương IX: Biểu diễn năng lượng  | 65    |
| Chương X: Hình thức luận Dirac   | 69    |
| Chương XI: Cơ học lượng tử: Sự bất định có nguyên tắc, những sự bất định có ý nghĩa quan trọng và nguyên lý bất định | 89    |
| Tài liệu tham khảo   | 130   |