NGUYỄN HUYỀN TỤNG

BÀI TẬP
CƠ HỌC LƯỢNG TỬ
CÓ HƯỚNG DẪN

(Tài liệu dùng cho sinh viên, học viên cao học các trường đại học tự nhiên, đại học công nghệ và sư phạm)

NHÀ XUẤT BẢN BÁCH KHOA — HÀ NỘI

Mã số: 47 – 2010/CXB/129 – 01/BKHN

Biên mục trên xuất bản phẩm của Thư viện Quốc gia Việt Nam

Nguyễn Huyền Tụng

Bài tập cơ học lượng tử / Nguyễn Huyền Tụng. - H. : Bách khoa Hà Nội, 2010. - 156tr. ; 24cm

Thư mục: tr. 155

1. Cơ học lượng tử 2. Bài tập 3. Giáo trình

530.12076 - dc14

BKE0002p-CIP

LỜI NÓI ĐẦU

Sau khi cuốn ***Cơ học Lượng tử*** của cùng tác giả ra đời, phản hồi của người đọc cho thấy không thể học "sử dụng" Cơ học lượng tử nếu thiếu các ví dụ và bài tập tốt. Giải các bài tập Cơ học lượng tử không dễ vì ngoài một số bài mang tính luyện tập, có những bài đã từng là những vấn đề nghiên cứu của các thế hệ các nhà vật lý đi trước.

Hiện tại đã có nhiều sách bài tập tốt về Cơ học Lượng tử bằng tiếng Việt nhưng vẫn cần có những tài liệu trợ giúp cho những người lần đầu làm quen với Cơ học Lượng tử. Hy vọng cuốn Bài tập này sẽ phần nào đáp ứng được yêu cầu đó.

Tác giả cảm ơn PGS. Phó Thị Nguyệt Hằng và các đồng nghiệp ở Bộ môn Vật lý Lý thuyết Đại học Bách Khoa Hà Nội đã cổ vũ và tạo điều kiện cho cuốn sách có thể ra đời.

TÁC GIẢ
nghtung@mail.hut.edu.vn

MỤC LỤC

TÓM TẮT NHỮNG CƠ SỞ CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

Trạng thái của vi hạt trong trường có thế năng $V(\mathrm{r},t)$ được mô tả bằng một hàm sóng (phức) $\Psi(\mathrm{r},t)$ là nghiệm của phương trình Shrodinger thời gian:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(r,t)+V(r,t)\Psi(r,t)=-i\hbar\frac{\partial\Psi(r,t)}{\partial t}$$

m là khối lượng hạt. Nếu nhân phương trình (1) với $\Psi^*(r,t)$ và phương trình liên hợp phức của nó (xác định $\Psi^*(r,t)$) với $\Psi(r,t)$ sau đó trừ hai vế của hai phương trình trên ta nhận được phương trình liên tục:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi(r,t)\right|^2+div\left[\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\nabla\Psi^*-\Psi^*\nabla\Psi\right)\right]=0$$

Phương trình trên mô tả bảo toàn đại lượng $\int\left|\Psi\right|^2 d\tau$, cho phép ta kết luận đại lượng $\left|\Psi(r,t)\right|^2$ có ý nghĩa là mật độ xác suất tìm thấy hạt ở vị trí $\boldsymbol{r}$ ở thời điểm t (xác suất tìm hạt trong yếu tố thể tích $d\tau$ bằng $\left|\Psi(r,t)\right|^2 d\tau$). Véctơ

$$\mathbf{j}=\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\nabla\Psi^*-\Psi^*\nabla\Psi\right)$$

mang ý nghĩa là mật độ dòng xác suất.

Từ ý nghĩa của $\left|\Psi\right|^2$, ta nhận được các yêu cầu mà $\Psi(r,t)$ phải thỏa mãn: đơn trị, hữu hạn, liên tục và có đạo hàm bậc nhất liên tục. Điều kiện liên quan đến liên tục của đạo hàm có thể bị vi phạm tại những điểm thế năng có gián đoạn loại II.

Nếu thế năng không phụ thuộc thời gian, tồn tại nghiệm của phương trình Schrodinger sao cho $\rho=\left|\Psi\right|^2$ và $\mathbf{j}$ không phụ thuộc thời gian. Nghiệm đó có dạng:

$$\Psi(r,t)=\psi(r)\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Thay hàm sóng trên vào (1) ta nhận được phương trình xác định $\psi(r)$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(r)\right]\psi(r)=E\psi(r)$$

Gọi toán tử $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\left(r\right)$, là Hamiltonian của hệ (toán tử năng lượng toàn phần), ta có:

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

trong đó E mang ý nghĩa là những giá trị khả dĩ của năng lượng hệ (hạt) và có thể nhận các giá trị liên tục hoặc gián đoạn. Phương trình trên chính là phương trình xác định trị riêng và hàm riêng của toán tử năng lượng toàn phần.

Với các trạng thái có phổ năng lượng gián đoạn, hàm sóng thỏa mãn điều kiện chuẩn hóa đơn vị:

$$\int\left|\Psi\right|^2 d\tau = 1.$$

Các trạng thái ứng với các giá trị năng lượng khác nhau trực giao.

Các hàm sóng ứng với phổ năng lượng liên tục chuẩn hóa theo δ — hàm, nghĩa là:

$$\int\psi^*\left(r,E\right)\psi\left(r,E^{'}\right)d\tau = \delta\left(E-E^{'}\right).$$

Trong ký hiệu Dirac, mỗi hàm sóng (vectơ trạng thái) mô tả bằng một ket—vectơ $\psi \to |\psi\rangle$ và bra—vectơ $\langle\psi|$ ứng với $\tilde{\psi}^*$, ta có:

$$\int\varphi^*\left(r\right)\psi\left(r\right)d\tau = \langle\varphi|\psi\rangle.$$

Hàm sóng trong biểu diễn tọa độ và xung lượng trong cách mô tả Dirac:

$$\psi(x) \to \langle x|\psi\rangle;\ \psi(p) \to \langle p|\psi\rangle.$$

Xác suất phép đo đại lượng vật lý được xác định bởi:

$$P_n(a_n) = \frac{|\langle\psi_n|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle}.$$

Giá trị trung bình của đại lượng vật lý A:

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_n a_n P_n(a_n) = \frac{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}.$$

Xác định xung lượng hạt từ mật độ dòng hạt:

$$\left\langle p\right\rangle = \int m\mathbf{j}d\tau,$$

và điều kiện $\left|\Psi\right|^2 = 0$ trên biên miền lấy tích phân, ta nhận được:

$$\left\langle p\right\rangle = \int\Psi^*\left(-i\hbar\nabla\right)\Psi d\tau.$$

Tương tự $\left\langle x\right\rangle = \int\Psi^* x\Psi d\tau.$

Từ đó suy ra các toán tử xung lượng và tọa độ (trong biểu diễn tọa độ):

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla;\quad \hat{x} = x.$$

Hai toán tử cơ bản trên là các toán tử tự liên hợp và thỏa mãn hệ thức giao hoán

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

Tính tự liên hợp của một toán tử được mô tả bởi hệ thức:

$$\int \Psi_1^* \hat{L} \Psi_2 d\tau = \int \Psi_2 \left(\hat{L} \Psi_1 \right)^* d\tau .$$

Từ các toán tử tọa độ và xung lượng ta xây dựng được các toán tử động năng, thế năng và Hamiltonian của hệ:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta; \quad \hat{V} = V\left(r\right); \quad \hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\left(r\right).$$

Toán tử mômen động lượng và bình phương của nó được cho bởi:

$$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y \ ; \ \hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z \ ; \ \hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x ;$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 .$$

Toán tử mômen trong tọa độ cầu:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi};$$

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

Xác định trung bình bình phương của độ phân tán của đại lượng λ xung quanh $\langle\lambda\rangle$

$$\left\langle \Delta\lambda^2 \right\rangle = \left\langle \left(\lambda - \left\langle \lambda \right\rangle \right)^2 \right\rangle = \int \psi^* \left(\hat{\lambda} - \left\langle \lambda \right\rangle \right)^2 \psi d\tau$$

Sử dụng tính chất tự liên hợp của $\hat{\lambda} - \left\langle \lambda \right\rangle$, ta có:

$$\left\langle \Delta\lambda^2 \right\rangle = \int \left| \left(\hat{\lambda} - \left\langle \lambda \right\rangle \right) \psi \right|^2 d\tau.$$

Như vậy để đại lượng λ đo được chính xác thì $\left\langle \Delta\lambda^2 \right\rangle = 0$, hay

$$\hat{\lambda}\psi = \left\langle \lambda \right\rangle \psi,$$

nghĩa là ψ là hàm riêng của toán tử $\hat{\lambda}$.

Với *L* và *M* là hai đại lượng vật lý tùy ý nói chung $\hat{L}\hat{M} \neq \hat{M}\hat{L}$. Trường hợp $\hat{L}\hat{M} = \hat{M}\hat{L}$, toán tử của hai đại lượng vật lý giao hoán:

$$[\hat{L}, \hat{M}] = 0 .$$

Nếu $\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = 0$, tác dụng $\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}$ lên hàm sóng tùy ý ψ cho kết quả bằng không, nghĩa là các toán tử $\hat{L}, \hat{M}$ có chung hệ hàm riêng và là các đại lượng có thể đo chính xác đồng thời. Nếu toán tử của hai đại lượng *A* và *B* không giao hoán, hai đại lượng không đo được chính xác đồng thời, độ tản mạn của phép đo các đại lượng trên thỏa mãn hệ thức bất định tổng quát:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right|,$$

ở đây $\Delta A = \sqrt{\langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2}$. Tập tối thiểu các đại lượng vật lý có thể xác định chính xác đồng thời đủ để xác định trạng thái của hệ lượng tử được gọi là *tập đầy đủ*.

Các toán tử mômen quĩ đạo trong tọa độ cầu

$$\hat{L}_x = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\hat{L}_y = i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

Các toán tử bậc thang

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \pm\hbar e^{\pm i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} \pm i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

Toán tử bình phương mômen

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

Trường hợp hạt trong trường có tâm đối xứng $V(r)$, các toán tử $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ và $\hat{L}_z$ giao hoán với nhau. Hàm riêng chung của các toán tử trên được tìm dưới dạng

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi),$$

Trong đó, hàm $Y(\theta,\varphi)$ được xác định từ các phương trình

$$\hat{L}^2 Y = \lambda Y \quad , \quad \hat{L}_z Y = \alpha Y.$$

Nghiệm của phương trình trên là các hàm điều hòa cầu

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = P_{lm}(\cos\theta)e^{im\varphi},$$

trong đó $\lambda = \hbar^2 l(l+1)$, $\alpha = \hbar m$; $l = 0,1,2,...$ $\quad m = 0,\pm1,\pm2,...,\pm l$, $P_l^m(x)$ là các đa thức Legandre liên đới.

Lấy đạo hàm giá trị trung bình $\langle\lambda\rangle = \int\psi^*(r,t)\hat{L}\psi(r,t)d\tau$ và sử dụng phương trình Schrodinger, ta có thể chứng minh được đạo hàm theo thời gian đại lượng vật lý λ ứng với toán tử

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial\hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{L} - \hat{L}\hat{H}\right).$$

Trong trường hợp $\frac{d\hat{L}}{dt} = 0$, đại lượng λ là một tích phân chuyển động. Như vậy để một đại lượng là tích phân chuyển động thì toán tử của nó phải không phụ thuộc tường minh vào thời gian và giao hoán với $\hat{H}$.

Hệ các hàm riêng của một toán tử của đại lượng vật lý nào đó tạo thành hệ cơ sở trực chuẩn và đầy đủ trong không gian trạng thái, nghĩa là

$$\int \psi_m^*\left(x\right)\psi_n\left(x\right)d\tau = \delta_{mn},$$

trường hợp phổ gián đoạn, và

$$\int \psi^*\left(r,\lambda\right)\psi_n\left(r,\lambda^{'}\right)d\tau = \delta\left(\lambda - \lambda^{'}\right),$$

trường hợp phổ liên tục.

Một trạng thái tùy ý luôn có thể khai triển theo các hàm riêng của toán tử $\hat{L}$ dưới dạng

$$\psi\left(r\right) = \sum_n c_n\psi_n\left(r\right) + \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} c\left(\lambda\right)\psi\left(r,\lambda\right)d\lambda.$$

với các hệ số

$$c_n = \int \psi_n^*\left(r\right)\psi\left(r\right)d\tau \qquad c\left(\lambda\right) = \int \psi^*\left(r,\lambda\right)\psi\left(r\right)d\tau,$$

thỏa mãn điều kiện chuẩn hóa

$$\sum_n \left|c_n\right|^2 + \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \left|c\left(\lambda\right)\right|^2 d\lambda = 1.$$

Giá trị trung bình của λ được xác định bằng

$$\left\langle\lambda\right\rangle = \sum_n \left|c_n\right|^2 \lambda_n + \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \lambda\left|c\left(\lambda\right)\right|^2 d\lambda$$

Như vậy $\left|c_n\right|^2$ và $\left|c\left(\lambda\right)\right|^2 d\lambda$ là xác suất để tìm thấy giá trị λ_n và λ trong khoảng $[\lambda, \lambda + d\lambda]$ trong trạng thái $\psi(r)$.

Nếu trong biểu diễn tọa độ, toán tử $\hat{M}$ cho liên hệ giữa hai trạng thái φ và ψ

$$\varphi\left(r\right) = \hat{M}\psi\left(r\right),$$

và nếu $\varphi\left(r\right) = \sum_n b_n\psi_n$ và $\psi\left(r\right) = \sum_n c_n\psi_n$ trong đó ψ_n là các hàm riêng của toán tử $\hat{L}$ trong λ — biểu diễn, ta có:

$$b_k = \sum_n \langle k\left|M\right|n\rangle c_n,$$

Ta thấy tập các giá trị $\{b_n\}$, $\{c_n\}$ chính là hàm φ và ψ trong λ — biểu diễn và đại lượng $\langle k|M|n\rangle = \int \psi_k^* \hat{M} \psi_n d\tau$ là yếu tố ma trận của toán tử $\hat{M}$ (toán tử $\hat{M}$ trong λ — biểu diễn)

Toán tử $\hat{L}$ trong biểu diễn riêng của nó

$$\langle k|L|n\rangle = \int \psi_k^* \hat{L} \psi_n d\tau = \lambda_n \delta_{kn},$$

cho ma trận chéo và các yếu tố ma trận trên đường chéo chính là các trị riêng của nó.

Để chuyển hàm sóng và toán tử từ biểu diễn này qua biểu diễn khác người ta sử dụng các toán tử (ma trận) Unita.

Ma trận $S_{\xi n} = \langle \xi | n \rangle$ được xây dựng từ các hệ hàm cơ sở $\{|n\rangle\}$ và $\{|\xi\rangle\}$ là hai hệ hàm riêng tương ứng của hai toán tử vật lý $\hat{F}$, $\hat{D}$ nào đó. Ta có $|n\rangle = S|\xi\rangle$, $|\xi\rangle = \Pi|n\rangle = S^{-1}|n\rangle$. Chuyển hàm sóng và toán tử từ F — biểu diễn sang D — biểu diễn

$$\Psi_\xi = \sum_n S_{\xi n} (\Psi)_n, \quad (\hat{F})_\xi = \hat{S}\hat{F}\hat{S}^{+}.$$

Chuyển hàm sóng từ biểu diễn toạ độ sang biểu diễn xung lượng, ta có:

$$S(p,x) = \langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px}.$$

Khi đó

$$\langle p|\Psi\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx e^{-\frac{i}{\hbar}px} \Psi(x) = \tilde{\Psi}(p),$$

$\tilde{\Psi}(p)$ là ảnh Fourier của $\Psi(x)$.

Thí nghiệm Stern—Gerlach cho thấy điện tử ngoài mômen động lượng $L = r \times p$ còn có mômen động lượng riêng hay spin S_x, S_y, S_z có thể nhận các giá trị $+\hbar/2$ và $-\hbar/2$.

Đưa vào các toán tử spin $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x$, $\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_y$, $\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z$. Các toán tử $\hat{\sigma}_{x,y,z}$ thỏa mãn các phản giao hoán tử $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y = -\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_z$ và có thể biểu diễn bằng các ma trận Pauli

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Hàm sóng của điện tử cần phụ biến gián đoạn, spin $\sigma = \pm 1$ và được biểu diễn trong dạng ma trận hai hàng một cột (spinơ).

$$\psi(r,\sigma)=\begin{pmatrix}\psi_1(r)\\ \psi_2(r)\end{pmatrix}.$$

Các giá trị $|\psi_1(r)|^2$, $|\psi_2(r)|^2$ ứng với mật độ xác suất tìm thấy hạt tại vị trí không gian với $\sigma=\pm1$ nghĩa là $S_z=+\hbar/2$, $S_z=-\hbar/2$.

Nếu bỏ qua tương tác spin — quỹ đạo, hàm sóng có thể viết dưới dạng

$$\psi(r,\sigma)=\psi_0(r)\cdot\chi(\sigma).$$

Cùng với mômen spin, điện tử có mômen từ riêng

$$\mu=\frac{e\hbar}{2m}\sigma\ .$$

Khi chuyển động trong từ trường, năng lượng tương tác từ của điện tử và từ trường bằng $-(\boldsymbol{\mu}\times\mathbf{B})$, $\mathbf{B}$ là véctơ cảm ứng từ. Như vậy khi tính đến spin phương trình sóng của điện tử có dạng (phương trình Pauli)

$$\frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{p}}-e\mathbf{A})^2\,\Psi(\mathbf{r},\sigma,t)-(\boldsymbol{\mu}\text{ và }\mathbf{B})\Psi(\mathbf{r},\sigma,t)+e\varphi\Psi(\mathbf{r},\sigma,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},\sigma,t)}{\partial t},$$

Mômen động lượng toàn phần của điện tử:

$$\hat{\mathbf{J}}=\hat{\mathbf{L}}+\hat{\mathbf{S}}$$

Các hệ thức giao hoán

$$[\hat{J}_x\hat{J}_y]=i\hbar\hat{J}_z,\quad [\hat{J}_y\hat{J}_z]=i\hbar\hat{J}_x,\quad [\hat{J}_z\hat{J}_x]=i\hbar\hat{J}_y,$$
$$[\hat{J}_x\hat{\mathbf{J}}^2]=0,\quad [\hat{J}_y\hat{\mathbf{J}}^2]=0,\quad [\hat{J}_z\hat{\mathbf{J}}^2]=0.$$

Trị riêng của bình phương mômen toàn phần và hình chiếu mômen trên trục z

$$\hat{J}^2\,|\,j,m\rangle=\hbar^2 j(j+1)\,|\,j,m\rangle,\quad \hat{J}_z\,|\,j,m\rangle=\hbar m\,|\,j,m\rangle,$$

Suy ra $\mathbf{j}^2=\hbar^2 j(j+1)$, $J_z=\hbar m$.

trong đó j là số lượng tử mômen toàn phần xác định bằng qui tắc cộng mômen

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

và $m=-j,-j+1,........,j-1,+j.$

Các toán tử bậc thang

$$\hat{J}_\pm=\hat{J}_x\pm i\hat{J}_y;$$
$$\hat{J}_\pm\,|\,j,m\rangle=\hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\,|\,j,m\pm1\rangle.$$

Phương trình Schrodinger chỉ cho nghiệm chính xác với một số trường hợp hạt chuyển động trong trường thế V(r) đơn giản.

— Giếng thế sâu vô cùng $E_n = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2$, $\psi_n(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\left(\dfrac{n\pi x}{a}\right)$, $(n = 1,2,3...)$.

— Dao động tử điều hòa

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + 1/2),\quad E_n = \hbar\omega(n + 1/2).$$

ở đây $\hat{a}^+$ và $\hat{a}$ là các toán tử sinh và hủy

$$\hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}},\ \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}};$$

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle,\ \hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle,$$

$$[\hat{a},\hat{a}^+] = 1.$$

$$\langle k|\hat{x}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\delta_{k,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{k,n+1}\right),$$

$$\langle k|\hat{p}|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\sqrt{n+1}\delta_{k,n+1} - \sqrt{n}\delta_{k,n-1})$$

— Nguyên tử Hydro

Phương trình xác định hàm tia $\dfrac{d^2R}{dr^2} + \dfrac{2}{r}\dfrac{dR}{dr} - \dfrac{l(l+1)}{r^2}R + \dfrac{2m}{\hbar}\left(E + \dfrac{Ze^2}{r}\right)R = 0$.

$$E_n = -\frac{me^4Z^2}{2\hbar^2n^2} = -13,5\frac{Z^2}{n^2}eV;$$

$$R_{nl}(r) = \left[\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]^3}\right]^{1/2}\left(\frac{2Z}{na_o}\right)^{l+3/2} r^l e^{-Zr/na_o} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_o}\right)$$

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi).$$

Nếu đã biết hàm riêng và trị riêng của toán tử $\hat{H}_0$ từ phương trình

$$\hat{H}_0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0,$$

thì hàm riêng và trị riêng của toán tử $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ là nghiệm của phương trình

$$\hat{H}\psi_k = E_k\psi_k,$$

được tìm dưới dạng: $\psi_k = \sum\limits_n c_{kn}\psi_n^0$. Các hệ số c_{kn} thỏa mãn phương trình

$$c_{kl}\left(E_l^0 - E_k\right) + \sum_n \langle l|W|n\rangle c_{kn} = 0.$$

Khai triển c_{kn} và E_k thành chuỗi lũy thừa của đại lượng nhỏ trong năng lượng nhiễu loạn.

$\hat{W} = \varepsilon \hat{V}_1$. Đối với các mức năng lượng không suy biến ta nhận được hàm sóng và năng lượng dưới dạng

$$\psi_k = \psi_k^0 + \sum_{n \neq k} \frac{\langle n|W|k\rangle}{E_k^0 - E_n^0} \psi_k^0 + ...,$$

$$E_k = E_k^0 + \langle k|W|k\rangle + \sum_{n \neq k} \frac{|\langle n|W|k\rangle|^2}{E_k^0 - E_n^0} + ...$$

Nếu E_k^0 suy biến bậc *s*, hàm sóng gần đúng bậc không được biểu diễn qua các hàm không nhiễu loạn ứng với cùng một mức năng lượng

$$\psi_k = \sum_{\beta=1}^{s} c_\beta \psi_{k\beta}^0,$$

trong đó

$$\hat{H}^0 \psi_{k\beta}^0 = E_k^0 \psi_{k\beta}^0 \qquad (\beta = 1, 2, ..., s)$$

Các hệ số c_β nhận được từ hệ *s* phương trình tuyến tính thuần nhất

$$\left(E_k^0 - E^{(1)} + \langle k_\beta|W|k_\beta\rangle\right) c_\beta + \sum_{\gamma \neq \beta} \langle k_\beta|W|k_\gamma\rangle c_\gamma = 0,$$

ở đây $\beta, \gamma = 1, 2, ..., s$. Điều kiện có nghiệm khác không của hệ phương trình trên là định thức

$$\left|\left(E_k^0 - E^{(1)}\right)\delta_{\beta\gamma} + \langle k_\beta|W|k_\gamma\rangle\right| = 0 \qquad (\beta, \gamma = 1, 2, ..., s).$$

Phương trình trên nói chung cho *s* nghiệm $E^{(1)}$ khác nhau, đồng thời cho ta khả năng tính được các hệ số c_β và các hàm sóng ψ_k của hệ bị nhiễu loạn.

Như vậy nhiễu loạn phụ thuộc thời gian $\hat{W}(r,t)$ sẽ là nguyên nhân dẫn đến chuyển trạng thái của hệ không nhiễu loạn (với toán tử năng lượng $\hat{H}_0$) từ một trạng thái ψ_k^0 tới trạng thái ψ_l^0.

Ký hiệu ψ_n^0 là các trạng thái không nhiễu loạn (nghiệm của phương trình $\hat{H}_0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0$). Tìm nghiệm của phương trình $\left(\hat{H}_0 + \hat{W}\right)\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$ dưới dạng

$$\Psi = \sum_n c_n(t) \psi_n^0 e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t}.$$

Trong đó $c_n(0)=\delta_{nk}$ (ở trạng thái đầu $\Psi=\psi_k^0$), $c_n(t)$ được xác định từ phương trình

$$i\hbar\frac{dc_k}{dt}=\sum_n W_{kn}(t)c_n(t)e^{i\omega_{kn}t},$$

ở đây $W_{kn}(t)=\int\psi_k^{0*}\ddot{W}(r,t)\psi_n^0 d\tau$, với $\omega_{kn}=(E_k^0-E_n^0)/\hbar$. Phương trình trên được giải bằng phép gần đúng liên tiếp. Ở gần đúng bậc nhất

$$c_k(t)=\delta_{kn}+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t V_{kn}e^{\frac{i}{\hbar}\omega_{kn}t'}dt'$$

Xác suất chuyển dời

$$P_{mn}=|c_m(t)|^2=|c_{mn}(t)|^2\to P_{mn}=\frac{4\pi^2}{\hbar^2}|V_{mn}(\omega_{mn})|^2,$$

ở đây $W_{lk}(\omega_{lk})=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}W_{lk}(t)\cdot e^{i\omega_{lk}t}dt$ là ảnh Fourier của yếu tố ma trận nhiễu loạn.

Nếu nhiễu loạn gây bởi tương tác giữa hệ nguyên tử với bức xạ điện từ trường hợp bức xạ có bước sóng lớn hơn kích thước nguyên tử ($\lambda>>a_{atom}$) rất nhiều, ta có:

$$\ddot{W}=-(\mathbf{E}(t).\mathbf{D}),$$

ở đây $\mathbf{E}(t)$ là cường độ điện trường của bức xạ, $\mathbf{D}=e\mathbf{r}$ là mômen lưỡng cực của hệ, khi ấy

$$P_{kn}=\frac{4\pi^2}{\hbar^2}\left|(D_E)_{kn}\right|^2,\left|E(\omega_{kn})\right|^2.$$

Biểu thức trên cho thấy để dưới tác dụng của bức xạ, hệ chuyển từ trạng thái n đến trạng thái k thì trong bức xạ phải chứa tần số ω_{kn} nghĩa là $\mathbf{E}(\omega_{kn})\neq 0$ và

$$(D_E)_{lk}\neq 0,$$

Điều kiện trên xác định các qui tắc lựa chọn của hệ.

Khi thế tán xạ là rất nhỏ so với động năng của các hạt bay tới, thế tán xạ U(r) có thể xem như nhiễu loạn, ở gần đúng bậc nhất ta có gần đúng Born được dùng để xác định biên độ và tiết diện tán xạ hiệu dụng vi phân

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f(\theta,\varphi)|^2=\frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int U(\mathbf{r}')e^{i\mathbf{qr}'}dV'\right|^2,\ \mathbf{q}=\mathbf{k}_0-\mathbf{k}.$$

Để tính biên độ tán xạ với thế năng tuỳ ý, người ta có thể dùng phương pháp sóng thành phần, theo đó biên độ tán xạ được cho bằng

$$f(\theta)=\sum_l^\infty f_l(\theta)=\frac{1}{k}\sum_l^\infty(2l+1)e^{i\delta_l}P_l(\cos\theta).$$

Các nội dung trên được xây dựng trên cơ sở các tiên đề của Cơ học lượng tử.

TIÊN ĐỀ 1: HÀM SÓNG

"*Ở mỗi thời điểm, trạng thái của hệ lượng tử được xác định bằng hàm* Ψ *được gọi là hàm sóng, là những hàm bình phương khả tích tạo thành một không gian Hilbert hay không gian trạng thái. Hàm sóng chứa tất cả các thông tin về hệ lượng tử*".

TIÊN ĐỀ 2: ĐẠI LƯỢNG VẬT LÝ

"*Tương ứng với mỗi đại lượng quan sát được, F là một toán tử Hermite,* $\hat{F}$ *tác dụng trong không gian trạng thái. Các kết quả đo được của đại lượng F chỉ có thể là các trị riêng của toán tử* $\hat{F}$".

$$\hat{F}\Psi_a = f_a\Psi_a.$$

Ψ_a là hàm riêng của toán tử $\hat{F}$ ứng với trị riêng f_a.

TIÊN ĐỀ 3: BẢN CHẤT THỐNG KÊ

"*Cho hệ lượng tử ở trạng thái, nếu tiến hành phép đo đại lượng F thì xác suất được giá trị* f_a *là* $\left|(\Psi_a, \Psi)\right|^2$ *trong đó* Ψ_a *là hàm riêng của toán tử* $\hat{F}$ *ứng với trị riêng* f_a".

TIÊN ĐỀ 4: PHƯƠNG TRÌNH CƠ BẢN

"*Sự biến đổi của trạng thái các hệ lượng tử theo thời gian được mô tả bởi phương trình Schrodinger* $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$, *trong đó* $\hat{H}$ *là toán tử Hamilton của hệ*".