

Theo yêu cầu của khách hàng, trong một năm qua, chúng tôi đã dịch qua 16 môn học, 34 cuốn sách, 43 bài báo, 5 sổ tay (chưa tính các tài liệu từ năm 2010 trở về trước) Xem ở đây

**DỊCH VỤ
DỊCH
TIẾNG
ANH
CHUYÊN
NGÀNH
NHANH
NHẤT VÀ
CHÍNH
XÁC
NHẤT**

Chỉ sau một lần liên lạc, việc dịch được tiến hành

Giá cả: có thể giảm đến 10 nghìn/1 trang

Chất lượng: Tạo dựng niềm tin cho khách hàng bằng công nghệ 1. Bạn thấy được toàn bộ bản dịch; 2. Bạn đánh giá chất lượng. 3. Bạn quyết định thanh toán.

Tài liệu này được dịch sang tiếng việt bởi:

www.mientayvn.com

Từ bản gốc:

<https://docs.google.com/file/d/0B2JJMzJbJcwVm5PZGNyTlktZDg/edit>

Liên hệ:

thanhlam1910_2006@yahoo.com hoặc frbwrthes@gmail.com

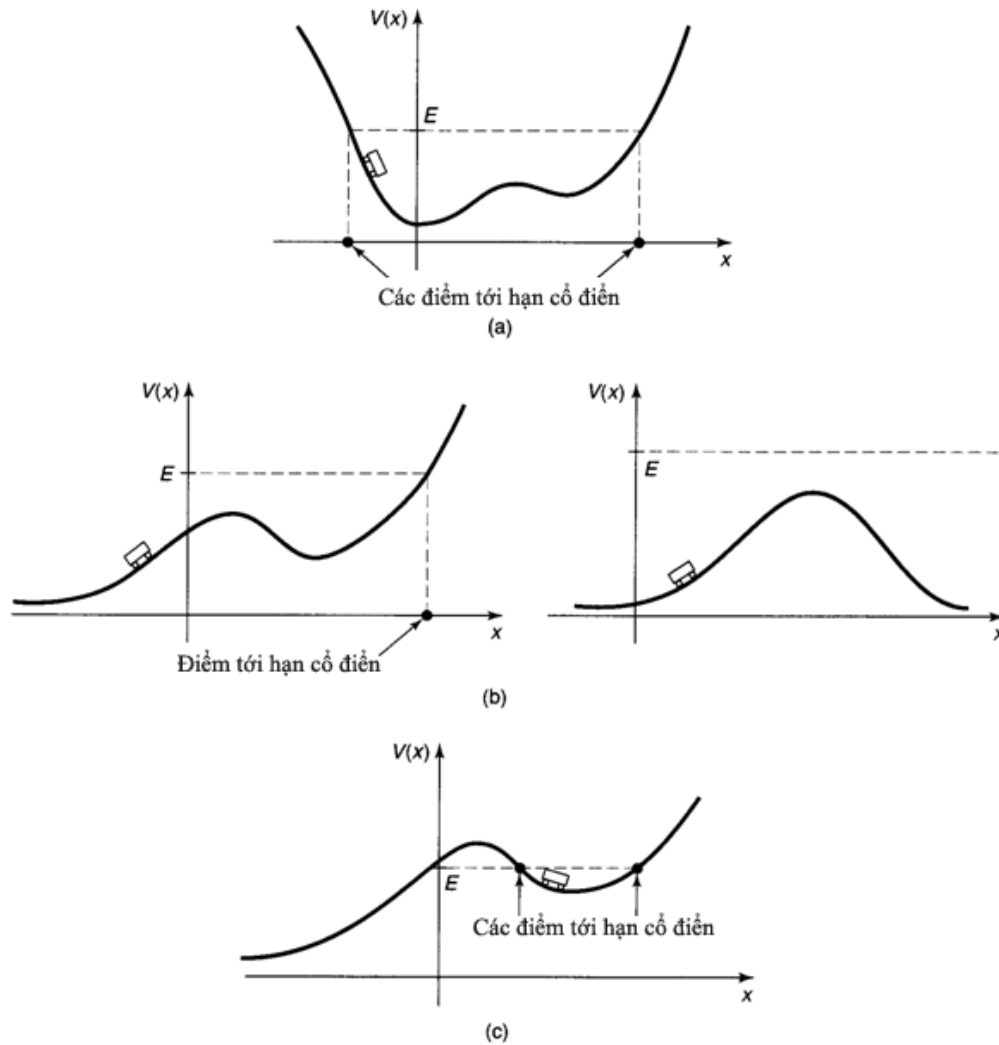
Dịch tài liệu của bạn:

http://www.mientayvn.com/dich_tiang_anh_chuyen_nganh.html

2.5 RÀO THỂ DẠNG DELTA

Chúng ta đã làm quen với 2 loại nghiệm khác nhau của phương trình Schrodinger dừng: Đối với hạt trong giếng thế sâu vô hạn và dao động tử điều hòa, các nghiệm này có thể chuẩn hóa được, và được đặt tên theo các chỉ số nguyên n ; còn đối với hạt tự do chúng không chuẩn hóa được, và được đặt tên theo biến liên tục k . Dạng nghiệm thứ nhất đại diện cho trạng thái vật lý thực, còn dạng nghiệm thứ hai thì không; nhưng trong cả 2 trường hợp, nghiệm tổng quát của phương trình Schrodinger dừng là một tổ hợp tuyến tính của các trạng thái dừng – đối với loại thứ nhất, tổ hợp này có dạng một tổng (theo n), nhưng trái lại loại thứ 2 là một tích phân (theo k). Sự khác biệt này có ý nghĩa vật lý như thế nào?

Trong cơ học cổ điển, thế năng một chiều không phụ thuộc thời gian có thể gây ra 2 loại chuyển động hơi khác nhau chút ít. Nếu $V(x)$ cao hơn tổng năng lượng của hạt (E) ở cả 2 phía (Hình 2.7a), thì hạt sẽ bị nhốt trong giếng thế - nó chuyển động qua lại giữa những điểm tới hạn (turning points), nhưng nó không thể thoát (Tất nhiên, nếu bạn không cung cấp cho nó nguồn năng lượng phụ, ví dụ như một động cơ, nhưng chúng ta sẽ không nói về điều đó ở đây). Chúng ta gọi trường hợp này là trạng thái liên kết.



Hình 2.7: (a) Trạng thái liên kết. (b) Các trạng thái tán xạ. (c) Một trạng thái liên kết cổ điển nhưng một trạng thái tán xạ lượng tử

Mặt khác, nếu E lớn hơn $V(x)$ ở một phía (hoặc cả hai), thì hạt đến từ “vô cùng”, chuyển động chậm dần hoặc nhanh dần dưới ảnh hưởng của thế năng, và quay trở về vô cùng (Hình 2.7 b). (Nó không thể bị bẫy trong rào thế nếu không có một số cơ chế, ví dụ như ma sát để làm tiêu hao năng lượng, nhưng một lần nữa, chúng ta sẽ không nói về điều đó). Chúng ta gọi trường hợp này là trạng thái tán xạ. Một số loại thế năng chỉ cho ra các trạng thái liên kết (chẳng hạn, dao động từ điều hòa); một số thì chỉ cho phép trạng thái tán xạ (ví dụ như: rào thế có dạng như một ngọn đồi không có chỗ trũng ở bên trong nó); một số loại rào thế cho phép cả hai loại, phụ thuộc vào năng lượng của hạt.

Có lẽ, chúng ta cũng đã thấy rằng hai loại nghiệm của phương trình Schrodinger tương ứng với các trạng thái liên kết và trạng thái tán xạ. Sự khác biệt giữa hai loại trạng thái này sẽ rõ ràng hơn trong miền lượng tử, bởi vì hiệu ứng đường hầm (chúng ta sẽ xem xét trong các phần tiếp theo)

cho phép hạt “lọt” qua bất kỳ một rào thế xác định nào, vì vậy điểm khác nhau duy nhất là thế năng tại vô cực (Hình 2.7c):

$$\begin{cases} E < V(-\infty) \text{ và } V(+\infty) \Rightarrow \text{trạng thái liên kết} \\ E > V(-\infty) \text{ hoặc } V(+\infty) \Rightarrow \text{trạng thái tán xạ} \end{cases} \quad [2.91]$$

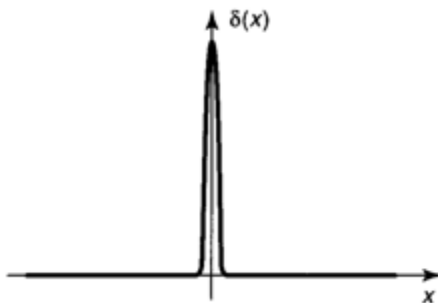
Trong thực tế, hầu hết mọi thế năng tiến tới 0 tại vô cùng, trong trường hợp đó điều kiện trên sẽ được đơn giản hóa thành:

$$\begin{cases} E < 0 \Rightarrow \text{Trang_thai_lien_ket} \\ E > 0 \Rightarrow \text{Trang_thai_tan-xa} \end{cases} \quad [2.92]$$

Bởi vì thế năng dạng chữ nhật sâu vô hạn và dao động tử điều hòa tiến tới vô cùng khi $x \rightarrow \pm\infty$, cho nên chúng chỉ bao gồm những trạng thái liên kết; bởi vì thế năng của hạt tự do bằng 0 ở mọi nơi, nó chỉ cho phép các trạng thái tán xạ²³. Trong phần này (và những phần sau) chúng ta sẽ khảo sát một dạng rào thế làm phát sinh cả hai loại trạng thái này.

Hàm delta Dirac, $\delta(x)$, được định nghĩa một cách không chính tắc như sau:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, \text{neu } x \neq 0 \\ \infty, \text{neu } x = 0 \end{cases}, \text{ với } \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1 \quad [2.93]$$



Hình 2.8: Hàm Delta Dirac (phương trình 2.93).

Nó là một đỉnh nhọn có chiều cao vô hạn, cực kỳ hẹp tại gốc tọa độ, diện tích của nó bằng 1 (Hình 2.8). Nói một cách nghiêm túc, nó không phải là một hàm, bởi vì nó không xác định tại $x=0$ (Các nhà toán học gọi nó là hàm suy rộng, hoặc phân bố)²⁴. Tuy nhiên, nó là một hàm cực kỳ hữu dụng trong vật lý lý thuyết. (Chẳng hạn, trong điện động lực học, mật độ điện tích của một điện tích điểm là hàm delta). Chú ý rằng $\delta(x-a)$ có một đỉnh nhọn tại điểm a và có diện tích bằng 1. Nếu nhân $\delta(x-a)$ với một hàm thông thường $f(x)$, việc đó sẽ tương tự như nhân với $f(a)$:

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a) \quad [2.94]$$

Bởi vì tích tiến tới 0 trong mọi trường hợp ngoại trừ tại điểm a. Đặc biệt,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a) \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a)dx = f(a) \quad [2.95]$$

Đó là tính chất quan trọng của hàm delta: dưới dấu tích phân, nó làm lộ ra giá trị $f(x)$ tại điểm a . (Tất nhiên, tích phân không nhất thiết phải đi từ $-\infty$ đến $+\infty$; miễn là phạm vi lấy tích phân chứa điểm a , nghĩa là cận tích phân có thể chạy từ $a-\varepsilon$ đến $a+\varepsilon$, với bất kỳ $\varepsilon > 0$)

Chúng ta hãy xét thế năng có dạng

$$V(x) = -\alpha\delta(x) \quad [2.96]$$

ở đây α là một hằng số nào đó. Đây là thế năng giả tạo (cũng giống như giếng thế hình chữ nhật sâu vô hạn), nhưng nó đơn giản, đẹp đẽ và xét ở một phương diện nào đó, nó thực tế hơn những thế năng mà chúng ta đã từng xét. Phương trình Schrodinger có dạng

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha\delta(x)\psi = E\psi \quad [2.97]$$

Thế năng này làm phát sinh cả các trạng thái liên kết ($E < 0$) và trạng thái tán xạ ($E > 0$); đầu tiên chúng ta sẽ xét trạng thái liên kết.

Trong vùng $x < 0$, $V(x) = 0$, ta có

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = k^2\psi \quad [2.98]$$

ở đây

$$k \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad [2.99]$$

(Bằng cách giả thiết E nhận giá trị âm, nên k thực và dương). Nghiệm tổng quát của phương trình 2.98 là

$$\psi(x) = Ae^{-kx} + Be^{kx}, \quad [2.100]$$

Nhưng số hạng đầu sẽ bằng ∞ khi $x \rightarrow -\infty$, vì vậy chúng ta phải chọn $A=0$:

$$\psi(x) = Be^{kx}, \quad (x < 0). \quad [2.101]$$

Trong vùng $x > 0$, $V(x)$ cũng lại bằng 0 và nghiệm tổng quát có dạng $F\exp(-kx) + G\exp(kx)$; lúc này số hạng thứ II sẽ tiến tới ∞ (khi $x \rightarrow \infty$)

Vì vậy

$$\psi(x) = Fe^{-kx}, \quad (x > 0) \quad [2.102]$$

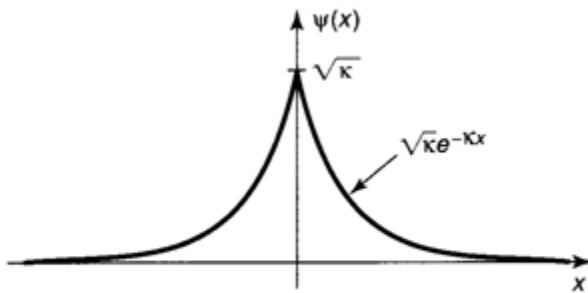
Vấn đề còn lại chỉ là gắn kết hai hàm lại với nhau, dùng điều kiện biên thích hợp tại $x=0$. Tôi sẽ nhắc lại những điều kiện biên tiêu chuẩn cho ψ trước đây:

$$\left\{ \begin{array}{l} 1. \psi \text{ luôn luôn liên tục, và} \\ 2. d\psi/dx \text{ liên tục ngoại trừ tại các} \\ \text{điểm thế năng không xác định} \end{array} \right. \quad [2.103]$$

Trong trường hợp này, điều kiện biên thứ nhất cho chúng ta $F=B$, vì vậy

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{\kappa x}, & (x \leq 0), \\ Be^{-\kappa x}, & (x \geq 0). \end{cases} \quad [2.104]$$

[Đồ thị của $\psi(x)$ được vẽ trong hình 2.9]. Điều kiện biên thứ 2 không đem lại hệ quả gì; đây là trường hợp ngoại lệ (giống như giếng thế chữ nhật sâu vô hạn) có V không xác định tại điểm giao nhau, và rõ ràng, từ đồ thị, ta thấy hàm này có một điểm uốn tại $x=0$. Hơn nữa, đến điểm này hàm delta không xác định. Hiển nhiên dù hàm delta gián đoạn tại $x=0$ nhưng đạo hàm của ψ , tại $x=0$ vẫn liên tục. Bây giờ tôi sẽ chỉ cho bạn chứng minh điều này, và như là một hệ quả chúng ta sẽ thấy tại sao $d\psi/dx$ thường là liên tục.



Hình 2.9: Hàm sóng trạng thái liên kết đối với rào thế delta (phương trình 2.104)

Trước hết, chúng ta lấy tích phân của phương trình Schrodinger từ $-\epsilon$ đến $+\epsilon$, và rồi lấy giới hạn khi $\epsilon \rightarrow 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} V(x)\psi(x) dx = E \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \psi(x) dx. \quad [2.105]$$

Tích phân đầu tiên được giữ nguyên nhưng $\frac{d\psi}{dx}$ được tính tại hai điểm nút; tích phân cuối cùng bằng 0 khi $\varepsilon \rightarrow 0$, vì nó là diện tích của một hình có chiều cao xác định và chiều rộng bằng không. Do đó

$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} V(x)\psi(x)dx \quad [2.106]$$

Thông thường giới hạn bên phải lại bằng 0, và vì thế $d\psi/dx$ là liên tục. Nhưng khi $V(x)$ không xác định tại biên, đối số đó sẽ sai. Đặc biệt, nếu $V(x) = -\alpha\delta(x)$ phương trình 2.95 cho ta:

$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = -\frac{2m}{\hbar^2}\psi(0) \quad [2.107]$$

Đối với trường hợp đang xét (Phương trình 2.104),

$$\begin{cases} d\psi/dx = -Bke^{-kx}, & \text{doi_voi}(x > 0), & \text{vi_vay } d\psi/dx|_+ = -Bk, \\ d\psi/dx = +Bke^{+kx}, & \text{doi_voi}(x < 0), & \text{vi_vay } d\psi/dx|_+ = +Bk, \end{cases}$$

Và vì thế $\Delta(d\psi/dx) = -2Bk$. Và $\psi(0) = B$. Vì vậy phương trình 2.107 cho ta:

$$k = \frac{m\alpha}{\hbar^2}, \quad [2.108]$$

Và những mức năng lượng được phép là (Phương trình 2.99)

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \quad [2.109]$$

Cuối cùng, chúng ta chuẩn hóa ψ :

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

Vì vậy (để cho thuận tiện ta chọn nghiệm thực dương):

$$B = \sqrt{k} = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} \quad [2.110]$$

Hiển nhiên giống thế hàm delta, bất kể độ lớn của α , có đúng một trạng thái liên kết:

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2}; E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \quad [2.111]$$

Thế còn trạng thái tán xạ với $E > 0$ thì sao? Khi $x < 0$ phương trình Schrodinger được viết lại là:

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

ở đây

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad [2.112]$$

là số thực dương. Nghiệm tổng quát là

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad [2.113]$$

và lúc này chúng ta không thể loại trừ số hạng nào, bởi vì không có số hạng nào phân kỳ. Tương tự, đối với $x > 0$

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \quad [2.114]$$

Để $\psi(x)$ liên tục tại $x=0$ thì:

$$F + G = A + B \quad [2.115]$$

Các đạo hàm là,

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

Và vì thế $\Delta(d\psi/dx) = ik(F - G - A + B)$. Trong khi đó $\psi(0) = A + B$, vì vậy điều kiện biên thứ hai (Phương trình 2.107) cho ta

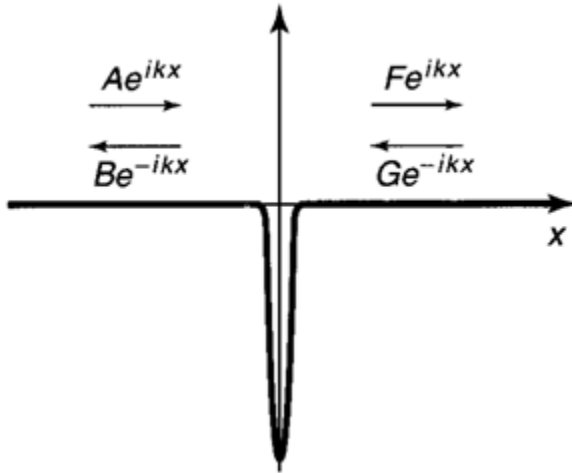
$$ik(F - G - A + B) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A + B), \quad [2.116]$$

Hoặc, ngắn gọn hơn,

$$F - G = A(1 + 2i\beta) - B(1 - 2i\beta), \quad \text{ở đây } \beta \equiv \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \quad [2.117]$$

Sử dụng điều kiện biên, chúng ta được 2 phương trình (phương trình 2.115 và phương trình 2.117) với 4 ẩn (A, B, F , và G) – chính xác là 5, nếu bạn tính luôn k . Việc chuẩn hóa không giúp ích được cho chúng ta – đây không phải là trạng thái chuẩn hóa. Do đó, có lẽ chúng ta nên dừng lại và khảo sát ý nghĩa vật lý của những hằng số này. Nhớ rằng $\exp(ikx)$ [khi được ghép với số hạng phụ thuộc thời gian $\exp(-iEt/\hbar)$] tạo ra một sóng lan truyền sang phải, và $\exp(-ikx)$ dẫn đến một sóng lan truyền sang trái. Như vậy A (trong phương trình 2.113) là biên độ của sóng đến từ bên trái, B là biên độ của sóng trở về bên trái, F (trong phương trình 2.114) là biên độ của sóng kết thúc ở bên phải, và G là biên độ của sóng đến từ bên phải (Hình 2.10). Trong thí nghiệm tán xạ thông thường, các hạt được xuất phát từ một hướng – có thể từ bên trái. Trong trường hợp đó, biên độ của sóng đến từ phía phải sẽ bằng 0:

$$G=0 \quad (\text{đối với trường hợp tán xạ từ bên trái}) \quad [2.118]$$



Hình 2.10: Tán xạ từ giếng dạng hàm delta

Do đó, A là biên độ của sóng tới, B là biên độ của sóng phản xạ, và F là biên độ của sóng truyền qua. Giải phương trình 2.115 và 2.117 cho B và F , chúng ta tìm được:

$$B = \frac{i\beta}{1-i\beta} A, \quad F = \frac{1}{1-i\beta} A \quad [2.119]$$

(Nếu bạn muốn nghiên cứu tán xạ từ bên phải, hãy đặt $A=0$; vì vậy G là biên độ sóng tới, F là biên độ sóng phản xạ, và B là biên độ sóng truyền qua).

Bây giờ, xác suất tìm hạt tại một vùng cụ thể là $|\psi|^2$, vì vậy xác suất tương đối²⁵ mà một hạt sẽ phản xạ trở lại là

$$R \equiv \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\beta^2}{1+\beta^2} \quad [2.120]$$

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

$$T \equiv \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \beta^2} \quad [2.121]$$

Tất nhiên, tổng của những xác suất này phải bằng 1:

$$R + T = 1 \quad [2.122]$$

Chú ý rằng R và T là các hàm của β , và vì thế (Phương trình 2.112 và 2.117) cũng là hàm của E :

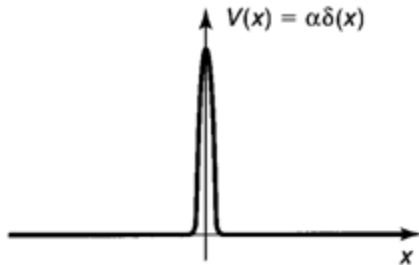
$$R = \frac{1}{1 + (2\hbar^2 E / m\alpha^2)}, \quad T = \frac{1}{1 + (m\alpha^2 / 2\hbar^2 E)} \quad [2.123]$$

Năng lượng càng cao thì xác suất truyền qua càng lớn (điều này có vẻ hợp lí)

Tất cả rất gọn gàng, nhưng có một vấn đề khó khăn của định luật mà chúng ta không thể hoàn toàn bỏ qua: Hàm sóng tán xạ này không được chuẩn hóa, vì vậy chúng không thực sự đại diện cho trạng thái khả dĩ của hạt. Nhưng chúng ta biết cách giải quyết vấn đề này là: chúng ta phải xây dựng các tổ hợp tuyến tính chuẩn hóa của những trạng thái dừng giống như chúng ta đã làm cho hạt tự do – nhưng hạt thực được biểu diễn bởi những bó sóng. Mặc dù không phức tạp về mặt lí thuyết, đây lại là công việc rất rối rắm trong thực hành, và vào lúc này, tốt nhất là nên giao bài toán cho máy tính²⁶. Trong khi đó, bởi vì có thể tạo ra những hàm sóng chuẩn hóa cho hạt tự do mà không dính dáng gì đến khoảng giá trị năng lượng, R và T có thể được xem như xác suất truyền qua và phản xạ gần đúng của hệ hạt trong vùng năng lượng hẹp quanh E . Ngẫu nhiên, điều này làm cho bạn phải chú ý rằng chúng ta có thể phân tích bài toán phụ thuộc thời gian dùng những trạng thái dừng một cách tinh túy (hạt đến, tán xạ với thế năng và bay ra xa ∞). Cuối cùng, ψ (trong phương trình 2.113 và 2.114) đơn giản là một số phức, không phụ thuộc thời gian, hàm sin, tiến tới ∞ ở mọi hướng (với biên độ không đổi). Và bây giờ, bằng cách sử dụng điều kiện biên thích hợp cho hàm này, chúng ta có thể xác định được xác suất mà một hạt (được biểu diễn bởi một bó sóng định xứ) sẽ bật ngược lại hoặc đi qua rào thế. Tôi cho rằng, hệ quả toán học kì diệu phía sau vấn đề này là sự kiện: bằng cách lấy tổ hợp tuyến tính của các trạng thái trải rộng trên toàn bộ không gian, và về cơ bản không phụ thuộc đáng kể vào thời gian, chúng ta có thể xây dựng nên các hàm sóng tập trung quanh một điểm (chuyển động), với những đặc tính phức tạp theo thời gian (xem bài tập 2.40).

Giả sử, chúng ta đã nhận được các phương trình thích đáng trên bảng, hãy nhìn lại trường hợp rào thế dạng delta (Hình 2.11). Thông thường, tất cả những gì chúng ta phải làm là thay đổi dấu của α . Tất nhiên, điều này sẽ làm triệt tiêu trạng thái liên kết (xem bài tập 2.2). Mặt khác, những hệ số phản xạ và truyền qua chỉ phụ thuộc vào α^2 , không đổi. Thật lạ, hạt đi qua hàng rào giống như

qua giếng! Tất nhiên về phương diện cổ điển, hạt không thể nhảy lên rào thế cao ∞ , bất kể năng lượng của nó. Quả thực, bài toán tán xạ cổ điển khá đơn điệu:



Hình 2.11: Hàng rào dạng hàm delta

Nếu $E > V_{max}$ thì $T=1$ và $R = 0$ – tất nhiên hạt tự làm nó đi lên; ngược lại, nếu $E < V_{max}$ thì $T=0$ và $R=1$ – nó đi lên dốc cho đến khi nó mất hết năng lượng và rồi trở về hướng cũ. Bài toán tán xạ lượng tử hấp dẫn hơn nhiều; hạt có xác suất đi qua hàng rào thậm chí nếu $E < V_{max}$. Chúng ta gọi hiện tượng này là hiệu ứng đường hầm; nó là một cơ chế tạo nên nhiều hệ điện tử hiện đại-đặc biệt là trong kính hiển vi. Ngược lại, cho dù $E > V_{max}$, hạt vẫn có xác suất bị phản xạ lại-mặc dù vậy, tôi khuyên bạn không nên trông mong rằng cơ học lượng tử sẽ cứu nguy cho bạn (xem bài tập 2.41).

4.4. SPIN

Trong cơ học cổ điển, một vật rắn có hai loại momen động lượng: momen động lượng quỹ đạo ($\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$), liên quan đến chuyển động của khối tâm, và Spin ($S = IW$) liên quan đến chuyển động quanh khối tâm. Chẳng hạn, trái đất có momen quỹ đạo do chuyển động quay hàng năm của nó quanh mặt trời, và momen động lượng Spin do chuyển động quay hàng ngày của nó quanh trục Bắc-Nam. Trong phạm vi cổ điển, sự phân loại này chỉ để cho thuận tiện, bởi vì khi bạn xem xét kĩ nó, \vec{S} không là gì mà chỉ là tổng của momen động lượng quỹ đạo của tất cả những cục đất và đá tạo nên trái đất, khi chúng quay quanh trục. Nhưng một sự tương tự cũng xảy ra trong cơ học lượng tử, và ở đây sự khác biệt là một vấn đề hết sức cơ bản. Trong phép cộng momen động lượng quỹ đạo (trong trường hợp của Hidro) có liên quan đến chuyển động của electron quanh hạt nhân (được miêu tả bởi hàm điều hoà cầu), electron cũng mang một dạng khác của momen động lượng, loại momen động lượng này không dính dáng gì đến chuyển động trong không gian (và do đó không được mô tả bởi bất kì hàm của các biến vị trí r, θ, ϕ), nhưng nó hơi giống với Spin cổ điển (do đó, chúng ta sẽ dùng từ tương tự để gọi nó). Đó là điều hiển nhiên và điều đó không cần phải suy nghĩ nhiều và theo như chúng ta đã biết electron là một chất điểm không cấu trúc và momen động lượng Spin của nó không thể được phân tích như là tổng momen động lượng quỹ đạo của các phần hợp thành (xem bài tập 4.26)²¹. Chúng ta có cơ sở để nói rằng những hạt cơ bản mang momen động lượng nội tại (\vec{S}) cùng với momen động lượng “bên ngoài” của chúng (\vec{L}).

Lý thuyết đại số của Spin là bản sao của lý thuyết momen động lượng quỹ đạo, bắt đầu với những hệ thức giao hoán²²:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, [S_y, S_z] = i\hbar S_x, [S_z, S_x] = i\hbar S_y \quad [4.134]$$

Như trước, chúng ta cũng suy ra rằng những vectơ riêng của của S^2 và S_z thỏa mãn²³

$$S^2|sm\rangle = \hbar^2 s(s+1)|sm\rangle; \quad S_z|sm\rangle = \hbar m|sm\rangle; \quad [4.135]$$

và

$$S_{\pm}|sm\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1)-m(m\pm 1)}|s(m\pm 1)\rangle, \quad [4.136]$$

Ở đây $S_{\pm} \equiv S_x \pm iS_y$. Nhưng lúc này những vectơ riêng không là hàm điều hòa cầu (chúng không phải là hàm của cả θ và ϕ), và không có lý do để loại trừ giá trị bán nguyên của s và m :

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots; \quad m = -s, -s+1, \dots, s-1, s \quad [4.137]$$

Một cách ngẫu nhiên, mọi hạt cơ bản đều có giá trị s cụ thể và không thay đổi, chúng ta gọi nó là Spin của những loại cụ thể đó: các pi meson có spin 0, electron có Spin $1/2$, photon có Spin 1; delta có Spin $3/2$, graviton có Spin 2, và .v.v.. Theo quy ước, số lượng tử momen động lượng quỹ đạo 1 (chẳng hạn đối với một electron trong nguyên tử hidro) có thể nhận bất kỳ giá trị nguyên nào mà bạn muốn, và sẽ thay đổi thành một giá trị khác khi hệ bị nhiễu. Nhưng s không đổi, đối với mọi loại hạt, và điều này làm cho lý thuyết Spin tương đối đơn giản.

4.4.1. Spin 1/2

Rõ ràng, trường hợp quan trọng nhất $s=1/2$, đây là spin của những hạt tạo nên vật chất (protons, neutron và electron), cũng như tất cả các quark và lepton. Hơn nữa, một khi bạn đã hiểu được spin $1/2$, vấn đề sẽ hoàn toàn đơn giản khi bạn tiếp tục nghiên cứu những hệ hạt đồng nhất có spin cao hơn. Chỉ có hai trạng thái riêng: $|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$, chúng ta gọi là spin-up (kí hiệu: \uparrow) và $|\frac{1}{2}(-\frac{1}{2})\rangle$, chúng ta gọi là spin-down (\downarrow). Sử dụng những trạng thái riêng này như những vectơ cơ sở, trạng thái tổng quát của hạt spin $1/2$ có thể được biểu diễn như một ma trận cột 2 yếu tố (hoặc Spinor):

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\chi_+ + b\chi_- \quad [4.139]$$

Với

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad [4.140]$$

Biểu diễn spin-up, và

$$\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad [4.141]$$

Biểu diễn spin-down. Lúc đó, toán tử spin trở thành ma trận 2x2, chúng ta có thể xây dựng được ma trận này bằng cách chú ý đến tác dụng của chúng lên χ_+ và χ_- : Phương trình 4.135 cho chúng ta

$$S^2 \chi_+ = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_+; \quad S^2 \chi_- = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_-; \quad S_z \chi_+ = \frac{\hbar}{2} \chi_+; \quad S_z \chi_- = \frac{\hbar}{2} \chi_-; \quad [4.142]$$

và phương trình 4.136 cho ta:

$$S_+ \chi_- = \hbar \chi_+; \quad S_- \chi_+ = \hbar \chi_-; \quad S_+ \chi_+ = S_- \chi_- = 0; \quad [4.143]$$

Bây giờ, $S_{\pm} = S_x \pm S_y$, vì vậy:

$$S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-) \quad \text{và} \quad S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-) \quad [4.144]$$

Và suy ra rằng

$$S_x \chi_+ = \frac{\hbar}{2} \chi_-; \quad S_x \chi_- = \frac{\hbar}{2} \chi_+; \quad S_y \chi_+ = -\frac{\hbar}{2i} \chi_-; \quad S_y \chi_- = \frac{\hbar}{2i} \chi_-; \quad [4.145]$$

Do đó

$$S^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad [4.146]$$

Trong khi

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad [4.147]$$

Để cô đọng hơn, chúng ta chia các số hạng trên cho $\hbar/2$: $S = \hbar/2 \sigma$, ở đây

$$\sigma_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad [4.148]$$

Đây là các ma trận spin Pauli nổi tiếng. Chú ý rằng S_x, S_y, S_z và S^2 đều là các toán tử Hermitic (bởi vì chúng đại diện cho những quan sát). Trong khi đó, S_+ và S_- không phải là những toán tử Hermitic- bằng chứng là chúng không thể quan sát được.

Spinor riêng của S_z là:

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ (trị riêng } +\frac{\hbar}{2} \text{); } \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ (trị riêng } -\frac{\hbar}{2} \text{)} \quad [4.149]$$

Nếu bạn đo S_z trên một hạt ở trạng thái tổng quát χ (phương trình 4.139), bạn có thể nhận được kết quả $+\frac{\hbar}{2}$, với xác suất $|a|^2$, hoặc $-\frac{\hbar}{2}$ với xác suất $|b|^2$. Từ đó, ta có

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \quad [4.150]$$

(tức là, Spinor phải được chuẩn hóa).²⁵

Nhưng nếu chúng ta chọn đo S_x thì sao? Kết quả có thể là gì và xác suất tương ứng của chúng là gì? Theo diễn giải thống kê tổng quát, chúng ta cần biết các trị riêng và các spinor riêng của S_x . Phương trình trị riêng là:

$$\begin{vmatrix} -\lambda & \hbar/2 \\ \hbar/2 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 = (\frac{\hbar}{2})^2 \Rightarrow \lambda = \pm \frac{\hbar}{2}$$

Không có gì ngạc nhiên, những giá trị khả dĩ của S_x giống như của S_z . Các Spinor riêng thu được theo cách thông thường:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \pm \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix},$$

Vì vậy $\beta = \pm \alpha$. Hiển nhiên, các spinor riêng khi được chuẩn hóa của S_x là:

$$\chi_+^{(x)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \text{ (trị riêng } +\frac{\hbar}{2} \text{); } \chi_-^{(x)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \text{ (trị riêng } -\frac{\hbar}{2} \text{)} \quad [4.151]$$

Đóng vai trò như một vector riêng của ma trận Hermitic, chúng trải rộng trong không gian; spinor tổng quát χ có thể được biểu diễn như một tổ hợp tuyến tính của chúng:

$$\chi = \left(\frac{a+b}{\sqrt{2}} \right) \chi_+^{(x)} + \left(\frac{a-b}{\sqrt{2}} \right) \chi_-^{(x)} \quad [4.152]$$

Nếu bạn đo S_x , xác suất để nhận được kết quả $+\frac{\hbar}{2}$ là $(1/2)|a+b|^2$, và xác suất để nhận được kết quả $-\frac{\hbar}{2}$ là $(1/2)|a-b|^2$, (Bạn hãy tự kiểm tra lại tổng các xác suất này bằng 1).

Ví dụ: Giả sử rằng hạt spin $\frac{1}{2}$ ở trạng thái

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1+i \\ 2 \end{pmatrix}$$

Nếu bạn đo S_z , xác suất để nhận được kết quả $+\frac{\hbar}{2}$ là $|(1+i)/\sqrt{6}|^2 = \frac{1}{3}$ và xác suất để nhận được kết quả $-\frac{\hbar}{2}$ là $|2/\sqrt{6}|^2 = \frac{2}{3}$. Nếu bạn đo S_x , xác suất để nhận được $+\frac{\hbar}{2}$ là $(1/2)|(3+i)/\sqrt{6}|^2 = \frac{5}{6}$, và xác suất để nhận được $-\frac{\hbar}{2}$ là $(1/2)|(-1+i)/\sqrt{6}|^2 = \frac{1}{6}$. Hiển nhiên, giá trị kỳ vọng của S_x là $\frac{5}{6}\left(+\frac{\hbar}{2}\right) + \frac{1}{6}\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = \frac{\hbar}{3}$.

Chúng ta cũng có thể thu được kết quả này bằng cách tính trực tiếp:

$$\langle S_z \rangle = \chi^T S_x \chi = \begin{pmatrix} \frac{1-i}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (1+i)/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{3}$$

Tôi sẽ dẫn dắt các bạn qua một phép đo tưởng tượng có liên quan đến spin $\frac{1}{2}$, bởi vì nó dùng để làm sáng tỏ một vài ý tưởng trừu tượng mà chúng ta đã thảo luận ở chương I. Chúng ta hãy bắt đầu với một hạt ở trạng thái χ_+ . Nếu có ai đó hỏi “thành phần z của momen động lượng Spin của hạt là gì?” Chúng ta có thể trả lời ngay rằng: $+\frac{\hbar}{2}$. Đo \widehat{S}_z thì tất nhiên sẽ thu lại được kết quả đó. Nhưng nếu người chấp vấn hỏi chúng ta “thành phần x của momen động lượng Spin của hạt là gì?” Chúng ta sẽ trả lời một cách mập mờ: Nếu bạn đo \widehat{S}_x , thì bạn có thể nhận được kết quả $\frac{\hbar}{2}$ hoặc $-\frac{\hbar}{2}$ với cơ hội 50-50. Nếu người hỏi là một nhà vật lý cổ điển hoặc một người theo trường phái “duy thực”, anh ấy sẽ nghĩ rằng câu trả lời không đầy đủ -nếu không nói là phi lí-anh ta sẽ nói: “Có phải bạn không biết trạng thái thật sự của hạt đó không?”. Trái lại, tôi biết chính xác trạng thái của hạt là gì: χ_+ . “Ồ, sao bạn lại không thể bảo với tôi thành phần x của Spin của nó là gì?”. Bởi vì đơn giản là không có một thành phần x nào cụ thể của Spin. Quả thật, không thể xảy ra trường hợp cả \widehat{S}_x và \widehat{S}_z đều xác định, nguyên lý bất định sẽ bị vi phạm.

Vào lúc này, người phản đối chúng ta sẽ chộp lấy ống điện tử và đo thành phần x của Spin của nó; Giả sử anh ta nhận được giá trị $+\frac{\hbar}{2}$ “A ha!” (anh ta gào lên trong chiến thắng), “Bạn nói láo! Hạt này có giá trị của \widehat{S}_x hoàn toàn xác định: Đó là $\frac{\hbar}{2}$ “Ồ chắc chắn rồi – bây giờ nó có giá trị đó nhưng trước khi bạn đo, nó có giá trị đó hay không.” Bạn đã làm cuộc tranh cãi dịu xuống. Và dù thế nào đi nữa, điều gì đã xảy ra với hệ thức bất định? Bây giờ tôi biết cả \widehat{S}_x và \widehat{S}_z Tôi xin lỗi để nói rằng, bạn không đúng: trong phép đo của bạn, bạn đã thay đổi trạng thái của hạt; bây giờ nó ở trong trạng thái χ_+ , và trong khi bạn biết giá trị của \widehat{S}_x , bạn còn lâu mới biết được giá trị của \widehat{S}_z “Nhưng tôi rất cẩn thận không làm nhiễu hạt khi tôi đo \widehat{S}_x ” Rất tốt, nếu bạn không tin tôi hãy kiểm tra nó: Đo \widehat{S}_z và xem xét những gì bạn nhận được (Tất nhiên, anh ấy cũng có thể nhận được giá trị $+\frac{\hbar}{2}$, cái này sẽ làm bạn lúng túng- nhưng nếu chúng ta lặp lại kịch bản này nhiều lần và vào giữa cuộc tranh luận anh ấy sẽ nhận được kết quả $+\frac{\hbar}{2}$).

4.4.2. Electron trong trường từ

Một hạt mang điện có spin tạo thành một lưỡng cực từ. Momen lưỡng cực từ $\boldsymbol{\mu}$ của nó tỉ lệ thuận với momen động lượng spin \mathbf{S} của nó:

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{S}; \quad [4.156]$$

Hằng số tỉ lệ γ được gọi là hệ số hồi chuyển²⁷. Khi một lưỡng cực từ được đặt trong trường từ \mathbf{B} , sẽ có một momen lực $\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}$ có khuynh hướng làm cho lưỡng cực song song với trường (giống như kim la bàn). Năng lượng liên kết với momen này là²⁸

$$\mathbf{H} = -\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}, \quad [4.157]$$

Vì vậy Hamilton của hạt mang điện có Spin trong một trường từ \mathbf{B} trở thành

$$\mathbf{H} = -\gamma \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} \quad [4.158]$$

Ở đây \mathbf{S} là ma trận spin thích hợp (phương trình 4.147, trong trường hợp Spin $1/2$).

Ví dụ: chuyển động tuế sai Larmor. Hãy tưởng tượng một hạt có Spin $1/2$ ở trong một trường từ đồng nhất trùng với hướng z:

$$\widehat{\mathbf{B}} = B_0 \hat{k} \quad [4.159]$$

Ma trận Hamilton là:

$$\mathbf{H} = -\gamma B_0 S_z = -\frac{\gamma B_0 \hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad [4.160]$$

Trạng thái riêng của H giống như của S_z :

$$\begin{cases} \chi_+, \text{ với năng lượng } E_+ = -(\gamma B_0 \hbar)/2, \\ \chi_-, \text{ với năng lượng } E_- = +(\gamma B_0 \hbar)/2. \end{cases} \quad [4.161]$$

Hiển nhiên, năng lượng nhỏ nhất khi momen lưỡng cực song song với trường- giống như cổ điển. Bởi vì Hamilton độc lập thời gian, nghiệm tổng quát của phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian:

$$i \hbar = \frac{\partial \chi}{\partial t} = H \chi \quad [4.162]$$

Có thể được biểu diễn theo các số hạng trong trạng thái dừng:

$$\chi(t) = a \chi_+ e^{-itE_+ \hbar} + b \chi_- e^{-itE_- \hbar} = \begin{pmatrix} a e^{i\gamma B_0 t/2} \\ b e^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix}$$

Các hằng số a và b được xác định bởi các điều kiện ban đầu; chẳng hạn như:

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Ở đây $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Sẽ không mất tính tổng quát nếu tôi viết $a = \cos(\alpha/2)$ và $b = \sin(\alpha/2)$ ở đây α là một góc xác định mà ý nghĩa vật lý của nó sẽ được làm rõ trong chốc lát. Vì thế:

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) e^{i\gamma B_0 t/2} \\ \sin(\alpha/2) e^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix} \quad [4.163]$$

Để có cảm nhận về nhận về những gì xảy ra ở đây. Chúng ta hãy tính giá trị kỳ vọng của Spin $\langle S \rangle$ như một hàm theo thời gian:

$$\langle S_x \rangle = \chi(t)^\dagger S_x \chi(t)$$

$$= (\cos(\alpha/2) e^{-i\gamma B_0 t/2} \quad \sin(\alpha/2) e^{i\gamma B_0 t/2}) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) e^{i\gamma B_0 t/2} \\ \sin(\alpha/2) e^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2} \sin \alpha \cos(\gamma B_0 t).$$

$$\text{Tương tự: } \langle S_y \rangle = \chi(t)^\dagger S_y \chi(t) = -\frac{\hbar}{2} \sin \alpha \sin(\gamma B_0 t), \quad [4.165]$$

và

$$\langle S_z \rangle = \chi(t)^\dagger S_z \chi(t) = \frac{\hbar}{2} \cos \alpha \quad [4.166]$$

Chúng ta thấy $\langle S \rangle$ nghiêng một góc không đổi bằng α so với trục z và chuyển động tuế sai xung quanh trục z với tần số Larmor

$$W = \gamma B_0 \quad [4.167]$$

Giống như trường hợp cổ điển³¹ (xem hình 4.7). Không có gì ngạc nhiên ở đây – định lý Ehrenfest (dưới dạng được rút ra từ bài tập 4.21) bảo đảm rằng $\langle S \rangle$ biến đổi theo các định luật cổ điển. Nhưng sẽ tốt hơn nếu thấy công việc này được thực hiện trong phạm vi cụ thể.

Ví dụ: thí nghiệm Stern – Gerlach. Trong một trường từ không đồng nhất, không chỉ có momen mà còn có lực tác dụng lên lưỡng cực từ:

$$\mathbf{F} = \nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) \quad [4.168]$$

Lực này có thể dùng để phân chia chùm hạt theo định hướng spin cụ thể của nó như sau: Hãy tưởng tượng một chùm hạt nguyên tử trung hòa tương đối nặng, di chuyển dọc theo trục y, đi ngang qua vùng trường từ không đồng nhất (Ảnh 4.8) – chẳng hạn,

$$\mathbf{B}(x,y,t) = -\alpha x \hat{i} + (B_0 + \alpha z) \hat{k} \quad [4.149]$$

Ở đây B_0 là trường đều mạnh và hằng số α được mô tả sự lệch nhỏ so với trường đồng nhất. (Thật sự, chúng ta chỉ cần thành phần z của trường này, nhưng không may điều đó không thể vì nó sẽ vi phạm định luật điện từ $\nabla \cdot \vec{B} = 0$; dù muốn hay không, thành phần x vẫn có mặt). Lực tác dụng lên những nguyên tử này là

$$\mathbf{F} = \gamma \alpha (-S_x \hat{i} + S_z \hat{k}) \quad [4.170]$$

Nhưng bởi vì chuyển động tuế sai Larmor xung quanh B_0 , S_x dao động nhanh và giá trị trung bình sẽ bằng 0; lực thực sự hướng theo trục z:

$$F_z = \gamma \alpha S_z \quad [4.170]$$

Và chùm hạt bị lệch lên hoặc xuống, tỉ lệ với thành phần z của momen động lượng Spin. Về phương diện cổ điển, chúng ta hy vọng một đốm, nhưng thực sự chùm tia bị phân thành $2s + 1$ chùm riêng biệt, chứng minh một cách rõ ràng sự lượng tử hóa của S_z . (Nếu bạn dùng nguyên tử Au, chẳng hạn, tất cả những electron bên trong đã ghép đôi để cho Spin và momen động lượng quỹ đạo của chúng triệt tiêu. Spin toàn phần đơn giản là của những electron bên ngoài, chưa ghép đôi, vì vậy trong trường hợp này $S = 1/2$, và chùm hạt bị tách làm 2).

Lí luận đó thuần cổ điển, cho đến bước cuối cùng; “Lực” sẽ không xuất hiện trong những phép tính lượng tử thích hợp, và do đó có lẽ bạn muốn tiếp cận bài toán này bằng phương pháp sau đây.

Chúng ta hãy khảo sát quá trình trong đó hệ quy chiếu di chuyển cùng với chùm hạt. Trong hệ quy chiếu này, lúc đầu Haminton bằng 0, sau đó khác không trong chu kỳ T (khi hạt đi qua nam châm) và rồi lại bằng không:

$$H(t) = \begin{cases} 0 & \text{khi } t < 0 \\ -\gamma(B_0 + \alpha z) S_z & \text{khi } 0 \leq t \leq T \\ 0 & \text{khi } t > T \end{cases} \quad [4.171]$$

(Tôi đã bỏ đi thành phần x phức của \mathbf{B} , vì lý do đã chỉ ra ở trên - không đóng vai trò quan trọng trong bài toán). Giả sử rằng nguyên tử có Spin $\frac{1}{2}$ và bắt đầu ở trạng thái

$$\chi(t) = a \chi_+ + b \chi_-, \text{ khi } t \leq 0$$

Trong khi Haminton tác động, $\chi(t)$ biến đổi theo thời gian theo cách thông thường:

$$\chi(t) = a \chi_+ e^{-iE_+t/\hbar} + b \chi_- e^{-iE_-t/\hbar} \text{ khi } 0 \leq t \leq T$$

Ở đây (từ phương trình 4.158)

$$E_{\pm} = \mp \gamma(B_0 + \alpha z) \frac{\hbar}{2} \quad [4.172]$$

Và vì thế nó sẽ xuất hiện trong trạng thái

$$\chi(t) = (a e^{i\gamma T B_0/2} \chi_+) e^{i(\alpha\gamma T/2)z} + (b e^{-i\gamma T B_0/2} \chi_-) e^{-i(\alpha\gamma T/2)z}, \quad t \geq T \quad [4.173]$$

Bây giờ 2 số hạng mang động lượng theo hướng z (xem phương trình 3.131); thành phần Spin-up có động lượng:

$$p_z = \frac{\alpha \gamma T \hbar}{2} \quad [4.174]$$

Và nó di chuyển theo trục z cộng; thành phần Spin-down có động lượng ngược dấu và nó di chuyển theo hướng z trừ. Do đó chùm hạt bị tách thành 2 như trước. (Chú ý rằng phương trình 4.174 phù hợp với kết quả trước đó, phương trình 4.170, đối với trường hợp này $S_z = \frac{\hbar}{2}$ và $P_z = F_z T$).

Thí nghiệm Stern- Gerlach đóng vai trò quan trọng trong triết lí của cơ học lượng tử, ở đây nó cung cấp cả quy trình chuẩn bị một trạng thái lượng tử và làm rõ mô hình đối với một loại phép đo lượng tử nào đó. Chúng ta giả sử rằng trạng thái ban đầu của hệ đã biết (phương trình Schrodinger cho chúng ta biết nó sẽ thay đổi theo thời gian như thế nào). Nhưng chắc chắn chúng ta sẽ không biết làm thế nào để có được một hệ ở một trạng thái cụ thể ở nơi đầu tiên. Ở nếu bạn muốn chuẩn bị một chùm nguyên tử có cấu hình Spin nhất định, bạn cho chùm tia không phân cực qua nam châm Stern- Gerlach, và chọn dòng hạt đi ra mà bạn thích (chặn tất cả những chùm khác lại với

vách ngăn và màn chắn thích hợp). Ngược lại, nếu bạn muốn đo thành phần z của Spin của nguyên tử bạn cho nó qua thiết bị Stern-Gerlach và bắt được nó đang ở đâu. Tôi không khẳng định rằng đây là cách thực tiễn để thực hiện công việc, nhưng nó rất rõ ràng về mặt khái niệm và vì thế là một trường hợp có ích để khảo sát các bài toán chuẩn bị và đo trạng thái.

4.4.3. Phép cộng momen động lượng:

Bây giờ giả sử rằng chúng ta có 2 hạt Spin 1/2 - chẳng hạn, electron và proton ở trạng thái cơ bản trong nguyên tử Hydro. Mỗi hạt có thể có Spin-up hoặc Spin-down, vì vậy có tất cả 4 khả năng:

$$\uparrow\uparrow, \uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow, \downarrow\downarrow, \quad [4.175]$$

ở đây mũi tên đầu đề cập đến electron và thứ hai đề cập đến proton. Vấn đề đặt ra là: momen động lượng toàn phần của nguyên tử bằng bao nhiêu? Đặt

$$\mathbf{S} \equiv \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)} \quad [4.176]$$

Mỗi trạng thái trong 4 trạng thái này là trạng thái riêng của S_z - thành phần z được cộng đơn giản

$$\begin{aligned} S_z \chi_1 \chi_2 &= (S_z^{(1)} + S_z^{(2)}) \chi_1 \chi_2 = (S_z^{(1)} \chi_1) \chi_2 + \chi_1 (S_z^{(2)} \chi_2) \\ &= (\hbar m_1 \chi_1) \chi_2 + \chi_1 (\hbar m_2 \chi_2) = \hbar(m_1 + m_2) \chi_1 \chi_2, \end{aligned}$$

[Chú ý rằng $\mathbf{S}^{(1)}$ chỉ tác dụng lên χ_1 , và $\mathbf{S}^{(2)}$ chỉ tác dụng lên χ_2]. Vì vậy m (số lượng tử của hệ hỗn hợp) chính là $m_1 + m_2$:

$$\begin{aligned} \uparrow\uparrow &: m = 1; \\ \uparrow\downarrow &: m = 0; \\ \downarrow\uparrow &: m = 0; \\ \downarrow\downarrow &: m = -1. \end{aligned}$$

Thoạt nhìn, điều này có vẻ không đúng: m là số nguyên chạy từ -s đến +s, vì vậy có vẻ s = 1- nhưng có thêm một trạng thái phụ m = 0. Một cách để gỡ rối vấn đề này là áp dụng các toán tử hạ thấp $S_- = S_-^1 + S_-^2$ cho trạng thái $\uparrow\uparrow$, dùng phương trình 4.143:

$$\begin{aligned} S_-(\uparrow\uparrow) &= (S_-^1 \uparrow) \uparrow + \uparrow (S_-^2 \uparrow) \\ &= (\hbar \downarrow) \uparrow + \uparrow (\hbar \downarrow) = \hbar(\uparrow\downarrow + \uparrow\downarrow). \end{aligned}$$

Tất nhiên, 3 trạng thái với s = 1 là (kí hiệu $|sm\rangle$):

$$\left\{ \begin{array}{l} |11\rangle = \uparrow\uparrow \\ |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) \\ |1-1\rangle = \downarrow\downarrow \end{array} \right\} \quad s=1(\text{Boi_ba}) \quad [4.177]$$

(Để kiểm tra, hãy thử áp dụng toán tử hạ thấp cho $|10\rangle$; Bạn sẽ nhận được gì? Xem bài tập 4.35). Đây được gọi là sự kết hợp bộ ba, vì những lí do đã nói ở trên. Trong khi đó, trạng thái trực giao $m=0$ mang $s=0$:

$$\left\{ |00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) \right\} \quad s=0 \quad (\text{don}) \quad [4.178]$$

(Nếu bạn tác dụng toán tử nâng cao và hạ thấp cho trạng thái này, bạn sẽ nhận được giá trị 0. Xem bài tập 4.35).

Do đó, tôi khẳng định rằng sự kết hợp của 2 hạt Spin $1/2$ có thể làm cho Spin tổng có giá trị 1 hoặc 0, phụ thuộc vào việc chúng chiếm cấu hình bộ ba hay đơn. Để chứng minh điều này, tôi cần chứng tỏ rằng trạng thái bộ ba là vector riêng của S^2 với trị riêng $2\hbar^2$ và bộ đơn là vector riêng của S^2 với trị riêng 0. Bây giờ :

$$S^2 = (S^{(1)} + S^{(2)})(S^{(1)} + S^{(2)}) = (S^{(1)})^2 + (S^{(2)})^2 + 2S^{(1)}S^{(2)} \quad [4.179]$$

Dùng phương trình 4.142 và 4.145, chúng ta có

$$\begin{aligned} S^{(1)} \cdot S^{(2)} &= \left(S_x^{(1)} S_x^{(2)} + S_y^{(1)} S_y^{(2)} + S_z^{(1)} S_z^{(2)} \right) \\ &= \left(\frac{\hbar}{2} \downarrow \right) \left(\frac{\hbar}{2} \uparrow \right) + \left(\frac{i\hbar}{2} \downarrow \right) \left(-\frac{i\hbar}{2} \uparrow \right) + \left(\frac{\hbar}{2} \uparrow \right) \left(-\frac{\hbar}{2} \downarrow \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \left(\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow \right) \end{aligned}$$

Tương tự,

$$S^{(1)} \cdot S^{(2)} \left(\uparrow\uparrow \right) = \frac{\hbar^2}{4} \left(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow \right)$$

Suy ra rằng

$$S^{(1)} \cdot S^{(2)} |10\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow + 2\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow \right) = \frac{\hbar^2}{4} |10\rangle, \quad [4.180]$$

Và

$$S^{(1)} \cdot S^{(2)} |00\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow - 2\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) = -\frac{3\hbar^2}{4} |00\rangle, \quad [4.181]$$

Quay lại phương trình 4.179 (và dùng phương trình 4.142 một lần nữa), chúng ta kết luận rằng

$$S^{(2)} |10\rangle = \left(\frac{3\hbar^2}{4} + \frac{3\hbar^2}{4} + \frac{2\hbar^2}{4} \right) |10\rangle = 2\hbar^2 |10\rangle, \quad [4.182]$$

Vì vậy $|10\rangle$ thực sự là trạng thái riêng của S^2 với trị riêng $2\hbar^2$; và

$$S^{(2)} |00\rangle = \left(\frac{3\hbar^2}{4} + \frac{3\hbar^2}{4} - 2 \frac{3\hbar^2}{4} \right) |00\rangle = 0, \quad [4.183]$$

Vì vậy $|00\rangle$ là một trạng thái riêng của S^2 với trị riêng 0. (Tôi sẽ để cho bạn chứng minh rằng $|11\rangle$ và $|1-1\rangle$ là trạng thái riêng của S^2 , với trị riêng thích hợp-xem bài tập 4.35).

Việc chúng ta vừa làm (kết hợp Spin $\frac{1}{2}$ với Spin $\frac{1}{2}$ để nhận được Spin 1 và Spin 0) là một ví dụ đơn giản nhất của bài tập lớn hơn: Nếu bạn kết hợp Spin s_1 với Spin s_2 , Spin tổng s sẽ bằng bao nhiêu?. Câu trả lời là bạn nhận được mọi Spin từ $(s_1 + s_2)$ giảm xuống đến $(s_1 - s_2)$ hoặc $(s_2 - s_1)$, nếu $s_2 > s_1$ - trong dãy số nguyên:

$$s = (s_1 + s_2), (s_1 + s_2 - 1), (s_1 + s_2 - 2), \dots, |s_1 - s_2|, \quad [4.184]$$

(Có thể nói một cách gần đúng rằng, Spin tổng cộng cao nhất khi các Spin thành phần được xếp hàng song song với nhau, và nhỏ nhất khi chúng không song song). Chẳng hạn, nếu bạn ghép hạt có Spin $3/2$ với hạt có Spin 2, bạn có thể nhận được Spin tổng là $7/2, 5/2, 3/2$ hoặc $1/2$, phụ thuộc vào cấu hình. Ví dụ khác: Nếu nguyên tử Hidro ở trong trạng thái ψ_{nlm} , momen động lượng toàn phần của electron (Spin + quỹ đạo) là $l + \frac{1}{2}$ hoặc $l - \frac{1}{2}$; Bây giờ nếu bạn thêm vào Spin của proton, số lượng tử momen quỹ đạo toàn phần của nguyên tử là $l + 1, l$ hoặc $l - 1$ (và l có thể đạt được theo 2 cách riêng biệt, phụ thuộc vào electron độc thân ở trạng thái $l + \frac{1}{2}$ hay $l - \frac{1}{2}$).

Trạng thái cụ thể $|sm\rangle$ với Spin toàn phần s và thành phần z m sẽ là tổ hợp tuyến tính của những trạng thái thành phần $|s_1 m_1\rangle |s_2 m_2\rangle$:

$$|sm\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} C_{m_1 m_2 m}^{s_1 s_2 s} |s_1 m_1\rangle |s_2 m_2\rangle \quad [4.185]$$

LÍ THUYẾT NHIỀU LOẠN KHÔNG PHỤ THUỘC THỜI GIAN

6.1. Trường hợp không suy biến

6.1.1. Phương pháp luận tổng quát:

Giả sử rằng chúng ta đã giải được phương trình Schrodinger cho một vài hàm thế (chẳng hạn, thế của giếng chữ nhật một chiều sâu vô hạn):

$$H^0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0 \quad [6.1]$$

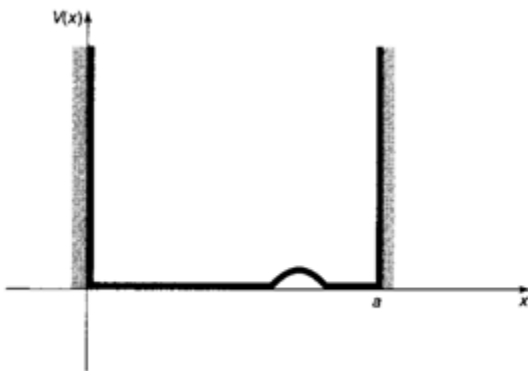
thu được một tập đầy đủ của những hàm riêng trực chuẩn, ψ_n^0 ,

$$\langle \psi_n^0 | \psi_m^0 \rangle = \delta_{mn} \quad [6.2]$$

và các trị riêng tương ứng là E_n^0 . Bây giờ chúng ta làm nhiều thế năng một ít (chẳng hạn, bằng cách đặt một cái bơm nhỏ ở đáy giếng – Hình 6.1). Chúng ta cần giải phương trình Schrodinger cho hàm riêng và trị riêng mới:

$$H \psi_n = E_n \psi_n \quad [6.3]$$

Nhưng nếu không may mắn, chúng ta khó có thể giải được phương trình Schrodinger chính xác cho những thế năng phức tạp này. Lý thuyết nhiễu loạn là một phương pháp cho phép thu được lời giải gần đúng của bài toán nhiễu loạn bằng cách xây dựng trên lời giải chính xác đã biết từ trường hợp không nhiễu loạn.



Hình 6.1: Giếng chữ nhật sâu vô hạn với một nhiễu loạn nhỏ

Để bắt đầu chúng ta viết Haminton mới như tổng của hai số hạng:

$$H = H_0 + \lambda H', \quad [6-4]$$

Ở đây H' là nhiễu loạn. Chúng ta sẽ chọn λ là một số nhỏ. Sau đó chúng ta sẽ đặt nó bằng 1, và H sẽ là Haminton chính xác. Viết ψ_n và E_n như một chuỗi lũy thừa theo λ :

$$\psi_n = \psi_n^0 + \lambda \psi_n^1 + \lambda^2 \psi_n^2 + \dots; \quad [6-5]$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots; \quad [6-6]$$

ở đây E_n^1 là hiệu chỉnh bậc nhất cho trị riêng thứ n , và ψ_n^1 là hiệu chỉnh bậc nhất cho hàm riêng thứ n ; E_n^2 và ψ_n^2 là các hiệu chỉnh bậc II, và .v.v..Thế 6.4, 6.5, và 6.6 vào phương trình 6.3, chúng ta có:

$$(H^0 + \lambda H^1)[\psi_n^0 + \lambda \psi_n^1 + \lambda^2 \psi_n^2 + \dots] = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots)[\psi_n^0 + \lambda \psi_n^1 + \lambda^2 \psi_n^2 + \dots],$$

hoặc (gộp các số hạng có λ cùng bậc):

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

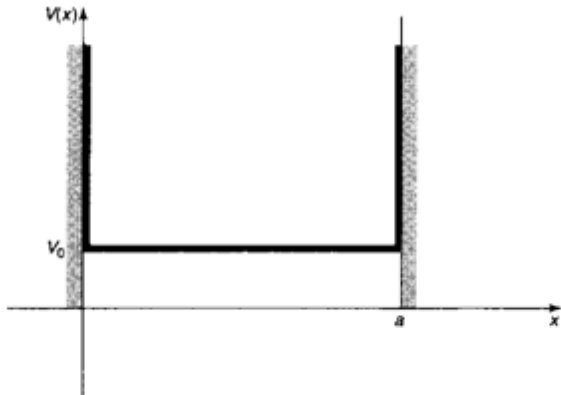
Đối với bậc thấp nhất (λ^0) cho ta $H^0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0$, điều này không có gì mới (chỉ là phương trình 6.1). Đối với bậc I (λ^1),

$$H^0 \psi_n^1 + H^1 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^1 + E_n^1 \psi_n^0, \quad [6.7]$$

Đối với bậc II (λ^2),

$$H^0 \psi_n^2 + H^1 \psi_n^1 = E_n^0 \psi_n^2 + E_n^1 \psi_n^1 + E_n^2 \psi_n^0, \quad [6.8]$$

Và .v.v... (Tôi đã thực hiện với λ , nó chỉ là phương tiện để phân biệt một cách trực quan các bậc khác nhau trong phương trình gần đúng – vì vậy khi kết thúc quá trình tính toán, chúng ta sẽ cho nó bằng 1)



Hình 6.2: Một nhiễu loạn không đổi trên toàn bộ giếng

6.1.2.Lí thuyết bậc I:

Lấy tích trong của phương trình 6.7 với ψ_n^0 [Điều đó có nghĩa là nhân với $(\psi_n^0)^*$ và lấy tích phân],

$$\langle \psi_n^0 | H^0 \psi_n^1 \rangle + \langle \psi_n^0 | H^1 \psi_n^0 \rangle = E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle + E_n^1 \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle.$$

Nhưng H_0 là toán tử hermitic, vì vậy

$$\langle \psi_n^0 | H_0 \psi_n^1 \rangle = \langle H^0 \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle = \langle E_n^0 \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle = E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle,$$

Và thao tác này đã làm triệt tiêu số hạng thứ I bên phải. Hơn nữa, $\langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = 1$, vì vậy

$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | H^1 | \psi_n^0 \rangle \quad [6.9]$$

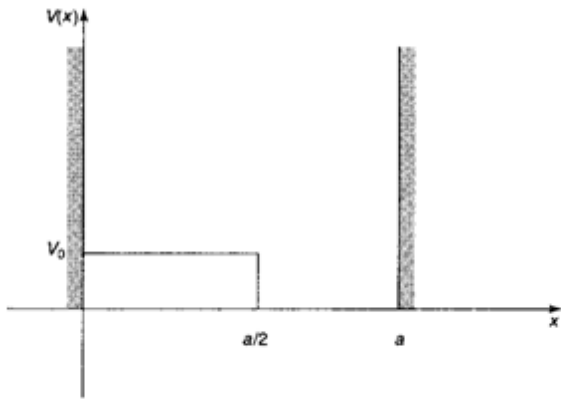
Đây là cơ sở của lý thuyết nhiễu loạn bậc nhất; Trong thực tế, có lẽ đây là phương trình quan trọng nhất trong cơ học lượng tử. Ý nghĩa của nó là hiệu chỉnh bậc I của năng lượng là giá trị kỳ vọng của nhiễu loạn trong trạng thái không nhiễu.

Ví dụ: Hàm sóng không nhiễu loạn của giếng thế hình chữ nhật sâu vô hạn là (Phương trình 2.24)

$$\psi_n^0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right).$$

Giả sử đầu tiên chúng ta làm nhiễu hệ bằng cách nâng “sàn” của giếng lên một lượng không đổi V_0 (hình 6.2). Trong trường hợp đó, $H^1 = V_0$, và số hạng hiệu chỉnh bậc I cho năng lượng của trạng thái thứ n là

$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | V_0 | \psi_n^0 \rangle = V_0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = V_0$$



Hình 6.3: Một nhiễu loạn không đổi chỉ xuất hiện trên nửa giếng

Do đó, các mức năng lượng chính xác là $E_n \cong E_n^0 + V_0$; chúng chỉ đơn giản được nâng lên lượng V_0 . Tất nhiên! Điều làm chúng ta ngạc nhiên là trong trường hợp này, lý thuyết bậc I mang lại câu

trả lời chính xác. Rõ ràng, đối với những nhiễu loạn không đổi theo thời gian, tất cả những số hạng hiệu chỉnh bậc cao hơn sẽ biến mất. Nếu bây giờ, nhiễu loạn chỉ mở rộng đến nửa chiều dài của giếng thế (Hình 6.3) thì:

$$E_n^1 = \frac{2V_0}{a} \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = \frac{V_0}{2}.$$

Trong trường hợp này mỗi mức năng lượng được nâng lên $V_0/2$. Có thể đoán rằng đó là kết quả không chính xác nhưng dường như nó hợp lí trong phép gần đúng bậc I.

Phương trình 6.9 là hiệu chỉnh bậc nhất đối của năng lượng; để tìm hiệu chỉnh bậc I của hàm sóng chúng ta viết lại phương trình 6.7:

$$(H^0 - E_n^0)\psi_n^1 = -(H^1 - E_n^1)\psi_n^0. \quad [6.10]$$

Vế phải là hàm đã biết, vì vậy phương trình này tương đương với phương trình vi phân không đồng nhất của ψ_n^1 . Bây giờ, hàm sóng không nhiễu tạo thành một tập hợp hoàn chỉnh, vì vậy ψ_n^1 (hoặc bất kỳ hàm nào khác) có thể biểu diễn như một tổ hợp tuyến tính của chúng

$$\psi_n^1 = \sum_{m \neq n} c_m^{(n)} \psi_m^0. \quad [6.11]$$

[Không cần phải xét đến trường hợp $m=n$ trong tổng, trong trường hợp nếu ψ_n^1 thỏa mãn phương trình 6.10, vì vậy $(\psi_n^1 + \alpha\psi_n^0)$ cũng thỏa mãn, đối với bất kỳ hằng số α , và chúng ta có thể dùng sự tự do này để tách ra số hạng ψ_n^0] Nếu chúng ta có thể xác định hệ số $c_m^{(n)}$ chúng ta sẽ làm. Hãy đặt phương trình 6.11 vào trong phương trình 6.10, và dùng sự kiện ψ_m^0 thỏa mãn phương trình Schrodinger không nhiễu (phương trình 6.1), chúng ta có:

$$\sum_{m \neq n} (E_m^0 - E_n^0) c_m^{(n)} \psi_m^0 = -(H^1 - E_n^1) \psi_n^0.$$

Thực hiện tích trong với ψ_l^0 ,

$$\sum_{m \neq n} (E_m^0 - E_n^0) c_m^{(n)} \langle \psi_l^0 | \psi_m^0 \rangle = -\langle \psi_l^0 | H^1 | \psi_n^0 \rangle + E_n^1 \langle \psi_l^0 | \psi_n^0 \rangle,$$

Nếu $l = n$, vế trái bằng 0 và chúng ta nhận lại phương trình 6.9, nếu $l \neq n$ chúng ta nhận được:

$$(E_l^0 - E_n^0) c_n^{(n)} = -\langle \psi_l^0 | H^1 | \psi_n^0 \rangle,$$

Hoặc

$$c_m^{(n)} = \frac{\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0}, \quad [6.12]$$

Vậy

$$\psi_n^1 = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \psi_m^0. \quad [6.13]$$

Chú ý rằng mẫu số có nghĩa, bởi vì không có hệ số với $m = n$, với điều kiện là phổ năng lượng không nhiễu không suy biến. Nhưng nếu 2 trạng thái không nhiễu có cùng một mức năng lượng, chúng ta sẽ gặp rắc rối lớn (chúng ta đã thực hiện phép chia cho số 0 trong phương trình 6.12); trong trường hợp đó, chúng ta cần lí thuyết nhiễu loạn có suy biến, và lí thuyết này sẽ được đề cập đến trong phần 6.2.

Ở trên ta vừa hoàn thành xong lí thuyết nhiễu loạn bậc nhất: E_n^1 được tính theo phương trình 6.9 và ψ_n^1 được tính theo phương trình 6.13. Chúng ta nên chú ý rằng lí thuyết nhiễu loạn thường mang đến những năng lượng chính xác đến ngạc nhiên (nghĩa là, $E_n^0 + E_n^1$ hoàn toàn gần với giá trị chính xác E_n), còn hàm sóng thì ít được nhắc đến.

6.1.3. Các năng lượng bậc 2

Tiếp tục như trước, chúng ta lấy tích trong của phương trình bậc II (phương trình 6.8) với ψ_n^0 :

$$\langle \psi_n^0 | H^0 \psi_n^2 \rangle + \langle \psi_n^0 | H' \psi_n^1 \rangle = E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^2 \rangle = E_n^1 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle + E_n^2 \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle.$$

Một lần nữa chúng ta sử dụng tính Hermitic của H_0 :

$$\langle \psi_n^0 | H^0 \psi_n^2 \rangle = \langle H^0 \psi_n^0 | \psi_n^2 \rangle = E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^2 \rangle,$$

Vì vậy số hạng đầu bên trái triệt tiêu với số hạng đầu bên phải. Trong khi đó, $\langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = 1$ và chúng ta thu được công thức cho E_n^2 :

$$E_n^2 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^1 \rangle - E_n^1 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle,$$

Nhưng

$$\langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle = \sum_{m \neq n} c_m^{(n)} \langle \psi_n^0 | \psi_m^0 \rangle = 0,$$

Vì vậy

$$E_n^2 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^1 \rangle = \sum_{m \neq n} c_m^{(n)} \langle \psi_n^0 | H' | \psi_m^0 \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle \langle \psi_n^0 | H' | \psi_m^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0}$$

Và, cuối cùng,

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \quad [6.14]$$

Đây là kết quả cơ bản của lí thuyết nhiễu loạn bậc II. Chúng ta có thể tiếp tục tính toán hiệu chỉnh bậc II cho hàm sóng (ψ_n^2), hiệu chỉnh bậc III của năng lượng, và .v.v...nhưng trong thực hành phương trình 6.14 thường được sử dụng nhiều nhất.

6.2 Lí thuyết nhiễu loạn suy biến

Nếu trạng thái không nhiễu loạn suy biến, nghĩa là, nếu 2 (hoặc nhiều) trạng thái (ψ_a^0 và ψ_b^0) có cùng mức năng lượng- thì lí thuyết nhiễu loạn thông thường sẽ sai: $c_a^{(b)}$ (Phương trình 6.12) và E_a^2 (Phương trình 6.14) sẽ vô nghĩa (nếu không, có thể tử số sẽ biên mất, $\langle \psi_a^0 | H' | \psi_b^0 \rangle = 0$ -dữ kiện này sẽ rất quan trọng cho chúng ta sau này). Do đó trong trường hợp suy biến, không thể tin vào cả số hạng hiệu chỉnh bậc nhất của năng lượng (Phương trình 6.9), và chúng ta phải tìm một phương pháp khác để giải bài toán này.

6.2.1.Suy biến bội II:

Giả sử rằng:

$$H^0 \psi_a^0 = E^0 \psi_a^0, \quad H^0 \psi_b^0 = E^0 \psi_b^0, \quad \text{và} \quad \langle \psi_a^0 | \psi_b^0 \rangle = 0. \quad [6.15]$$

Chú ý rằng tổ hợp tuyến tính của những trạng thái này

$$\psi^0 = \alpha \psi_a^0 + \beta \psi_b^0, \quad [6.16]$$

Vẫn là một trạng thái riêng của H^0 , với trị riêng E^0 :

$$H^0 \psi^0 = E^0 \psi^0 \quad [6.17]$$

Thông thường, nhiễu loạn (H') sẽ “phá vỡ” sự suy biến: khi chúng ta tăng λ (từ 0 tới 1), năng lượng không nhiễu loạn E^0 sẽ bị tách làm đôi (hình 6.4). Vấn đề chủ yếu là ở đây: Khi chúng ta tắt nhiễu loạn, trạng thái “cao hơn” sẽ rút về một tổ hợp tuyến tính của ψ_a^0 và ψ_b^0 và trạng thái “thấp hơn” cũng rút về một tổ hợp tuyến tính nào đó, nhưng chúng ta không biết trước được những tổ

hợp tuyến tính “tốt” này sẽ là gì. Vì lí do đó, chúng ta không thể tính thậm chí cả năng lượng bậc I (Phương trình 6.9) bởi vì chúng ta không biết được các trạng thái không nhiễu nào để dùng.

Do đó, hiện tại chúng ta hãy viết trạng thái không nhiễu dưới dạng tổng quát (phương trình 6.16), giữ cho α và β có thể thay đổi. Chúng ta cần giải phương trình Schrodinger

$$H\psi = E\psi, \quad [6.18]$$

Với $H = H^0 + \lambda H'$ và:

$$E = E^0 + \lambda E^1 + \lambda^2 E^2 + \dots, \quad \psi = \psi^0 + \lambda \psi^1 + \lambda^2 \psi^2 + \dots \quad [6.19]$$

Thế những số hạng này vào phương trình (6.18) và tổ hợp các số hạng có cùng bậc λ , như trước chúng ta tìm được:

$$H^0\psi^0 + \lambda(H'\psi^0 + H^0\psi^1) + \dots = E^0\psi^0 + \lambda(E^1\psi^0 + E^0\psi^1) + \dots \dots$$

Nhưng $H^0\psi^0 = E^0\psi^0$ (phương trình 6.17), vì vậy số hạng đầu triệt tiêu; ở bậc λ^1 chúng ta có:

$$H'\psi^0 + H^0\psi^1 = E^1\psi^0 + E^0\psi^1 \quad [6.20]$$

Lấy tích trong với ψ_a^0 :

$$\langle \psi_a^0 | H^0 \psi^1 \rangle + \langle \psi_a^0 | H' \psi^0 \rangle = E^0 \langle \psi_a^0 | \psi^1 \rangle + E^1 \langle \psi_a^0 | \psi^0 \rangle.$$

Bởi vì H^0 là Hermitic, số hạng đầu bên trái triệt tiêu với số hạng đầu bên phải. Đặt phương trình 6.16 và sử dụng điều kiện chuẩn hóa 6.15 chúng ta thu được

$$\alpha \langle \psi_a^0 | H' | \psi_a^0 \rangle + \beta \langle \psi_a^0 | H' | \psi_b^0 \rangle = \alpha E^1,$$

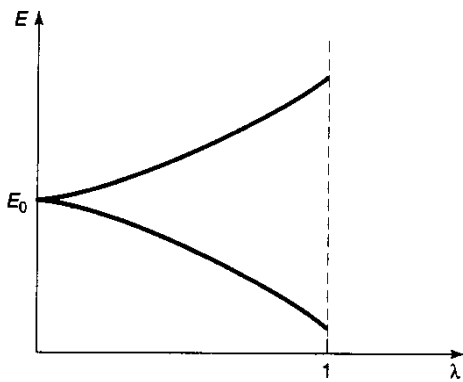


Figure 6.4: “Lifting” of a degeneracy by a perturbation.

Hoặc gọn hơn,

$$\alpha W_{aa} + \beta W_{ab} = \alpha E^1, \quad [6.21]$$

ở đây

$$W_{ij} \equiv \langle \psi_i^0 | H' | \psi_j^0 \rangle, \quad \langle j = a, b \rangle \quad [6.22]$$

Tương tự, lấy tích trong với ψ_b^0 , ta thu được:

$$\alpha W_{ba} + \beta W_{bb} = \alpha E^1, \quad [6.23]$$

Chú ý rằng các W là những đại lượng đã biết (về nguyên tắc)—chúng chỉ là những yếu tố ma trận của H', với hàm sóng không nhiễu ψ_a^0 và ψ_b^0 . Nhân phương trình 6.23 với W_{ab} , và dùng phương trình 6.21 để loại bỏ βW_{ab} , chúng ta tìm được:

$$\alpha [W_{ab} W_{ba} - (E^1 - W_{aa})(E^1 - W_{bb})] = 0. \quad [6.24]$$

Nếu α khác 0, phương trình 6.24 mang đến một phương trình cho E^1 :

$$(E^1)^2 - E^1(W_{aa} + W_{bb}) + (W_{aa}W_{bb} - W_{ab}W_{ba}) = 0. \quad [6.25]$$

Dùng công thức tìm nghiệm của phương trình bậc II, và chú ý rằng (từ phương trình 6.22) $W_{ab} = W_{ba}$ chúng ta có:

$$E_{\pm}^1 = \frac{1}{2} \left[W_{aa} + W_{bb} \pm \sqrt{(W_{aa} - W_{bb})^2 + 4|W_{ab}|^2} \right] \quad [6.26]$$

Đây là kết quả cơ bản của lí thuyết nhiễu loạn suy biến; 2 nghiệm tương ứng với 2 mức năng lượng nhiễu loạn.

Nhưng điều gì sẽ xảy ra nếu α bằng 0? Trong trường hợp đó $\beta = 1$, phương trình 6.21 cho ta $W_{ab} = 0$, và phương trình 6.23 cho ta $E^1 = W_{bb}$. Điều này được chứa đựng trong một kết quả tổng quát hơn (phương trình 6.26), với dấu cộng (dấu - tương ứng với $\alpha = 1, \beta = 0$). Còn gì nữa, câu trả lời là:

$$E_+^1 = W_{bb} = \langle \psi_b^0 | H' | \psi_b^0 \rangle, \quad E_-^1 = W_{aa} = \langle \psi_a^0 | H' | \psi_a^0 \rangle,$$

đúng với những gì mà chúng ta đã thu được bằng cách dùng lí thuyết nhiễu loạn không suy biến (phương trình 6.9) Chúng ta đơn giản là đã gặp may: các trạng thái ψ_a^0 và ψ_b^0 đã là các tổ hợp tuyến tính “chính xác” rồi. Hiển nhiên, nếu bằng cách nào đó, chúng ta có thể đoán ngay được

những trạng thái tốt ngay từ lúc bắt đầu thì sẽ rất tuyệt. Trong thực tế, chúng ta thường có thể làm như vậy bằng cách khai thác định lý sau:

Định lý : Giả sử A là toán tử Hermitic giao hoán với H' . Nếu ψ_a^0 và ψ_b^0 là các hàm riêng của A với những trị riêng khác nhau,

$$A\psi_a^0 = \mu\psi_a^0, \quad A\psi_b^0 = \nu\psi_b^0, \quad \text{và } \mu \neq \nu,$$

thì $W_{ab} = 0$ (và vì thế ψ_a^0 và ψ_b^0 là những trạng thái tốt để dùng trong lý thuyết nhiễu loạn).

Chứng minh : giả sử rằng $[A, H'] = 0$, vì vậy

$$\begin{aligned} \langle \psi_a^0 | [A, H'] | \psi_b^0 \rangle &= 0 \\ &= \langle \psi_a^0 | AH' \psi_b^0 \rangle - \langle \psi_a^0 | H' A \psi_b^0 \rangle \\ &= \langle A \psi_a^0 | H' \psi_b^0 \rangle - \langle \psi_a^0 | H' \nu \psi_b^0 \rangle \\ &= (\mu - \nu) \langle \psi_a^0 | H' \psi_b^0 \rangle = (\mu - \nu) W_{ab}. \end{aligned}$$

Nhưng $\mu \neq \nu$, vì vậy $W_{ab} = 0$. KẾT THÚC CHỨNG MINH

6.2.2. Suy biến bậc cao hơn:

Trong phần trước, tôi đã giả sử rằng suy biến là bội II, nhưng từ trường hợp này, chúng ta có thể dễ dàng tổng quát hóa cho các bậc suy biến cao hơn. Viết lại phương trình 6.21 và 6.23 dưới dạng ma trận:

$$\begin{pmatrix} W_{aa} & W_{ab} \\ W_{ba} & W_{bb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E^1 \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad [6.27]$$

Dễ thấy rằng E^1 chính là trị riêng của ma trận W ; Phương trình 6.25 là phương trình trị riêng (phương trình 3.70) cho ma trận này, và các tổ hợp tuyến tính tốt của các trạng thái không nhiễu là vectơ riêng của W . Trong trường hợp suy biến cấp n , chúng ta tìm trị riêng của ma trận n hàng và n cột.

$$W_{ij} = \langle \psi_i^0 | H' | \psi_j^0 \rangle. \quad [6.28]$$

Theo ngôn ngữ của đại số tuyến tính, tìm hàm sóng không nhiễu “tốt” tương đương với xây dựng một cơ sở trong không gian con suy biến chéo hóa với nhiễu loạn H' . Một lần nữa, nếu bạn nghĩ ra

một toán tử A giao hoán với H' , và dùng các hàm riêng đồng thời của A và H^0 , thì ma trận W sẽ tự động được chéo hóa, và bạn sẽ không cần phải giải phương trình trị riêng.

CHƯƠNG 9: LÍ THUYẾT NHIỀU LOẠN PHỤ THUỘC THỜI GIAN

Cho đến thời điểm này, thực tế mọi thứ chúng ta đã làm đều có liên quan đến những đối tượng được gọi là tĩnh học lượng tử, ở đó hàm thế không phụ thuộc vào thời gian $V(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r})$. Trong trường hợp đó, phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian,

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

có thể giải bằng cách tách biến:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar},$$

ở đây $\psi(\mathbf{r})$ thỏa mãn phương trình Schrodinger dừng,

$$H\psi = E\psi,$$

Bởi vì sự phụ thuộc thời gian của ψ là do số hạng ($e^{-iEt/\hbar}$), nó bị triệt tiêu khi chúng ta xây dựng đại lượng $|\psi|^2$, là một đại lượng có ý nghĩa vật lý. Tất cả những xác suất và giá trị kỳ vọng đều là hằng số. Bằng cách xây dựng các tổ hợp tuyến tính của những trạng thái dừng này, chúng ta thu được hàm sóng với sự phụ thuộc thời gian đáng quan tâm hơn, nhưng thậm chí khi đó những giá trị khả dĩ của năng lượng, và các xác suất tương ứng của chúng cũng là hằng số.

Nếu chúng ta muốn theo dõi sự chuyển dời từ mức năng lượng này đến mức năng lượng khác, chúng ta phải đưa ra loại thế năng phụ thuộc thời gian (động lực học lượng tử). Có một vài bài toán có thể giải được chính xác trong động lực học lượng tử. Tuy nhiên, nếu phần phụ thuộc thời gian của Hamilton là nhỏ so với phần không phụ thuộc thời gian, nó có thể được xem như một nhiễu loạn. Mục đích của tôi trong chương này là phát triển lý thuyết nhiễu loạn phụ thuộc thời gian và nghiên cứu ứng dụng quan trọng nhất của nó: Sự phát và hấp thụ bức xạ của một nguyên tử - một quá trình mà trong lý thuyết Bohr gọi là **bước nhảy lượng tử**.

9.1. Các hệ 2 mức:

Để bắt đầu, chúng ta hãy giả sử rằng chỉ có 2 trạng thái của hệ (không nhiễu), ψ_a và ψ_b . Chúng là các trạng thái riêng của Hamilton không nhiễu H_0 :

$$H_0\psi_a = E_a\psi_a \quad H_0\psi_b = E_b\psi_b \quad [9-1]$$

Và chúng trực chuẩn:

$$\langle \psi_a | \psi_b \rangle = \delta_{ab} \quad [9.2]$$

Bất kì trạng thái nào cũng có thể được biểu diễn như một tổ hợp tuyến tính của chúng ; cụ thể là:

$$\psi(0) = c_a \psi_a + c_b \psi_b \quad [9.3]$$

Các trạng thái ψ_a và ψ_b có thể là những hàm sóng của tọa độ, hoặc các Spinor, hoặc thứ gì đó khác thường hơn – điều đó không quan trọng. Chúng ta chỉ quan tâm đến sự phụ thuộc thời gian của nó, vì vậy khi tôi viết $\psi(t)$, tức là tôi muốn nói đến trạng thái của hệ tại thời điểm t . Lúc không có bất kì nhiễu loạn nào, mỗi thành phần biến đổi theo thời gian với nhân tố e mũ riêng của nó.

$$\psi(t) = c_a \psi_a e^{-iE_a t / \hbar} + c_b \psi_b e^{-iE_b t / \hbar} \quad [9-4]$$

$|c_a|^2$ là “xác suất để hạt ở trạng thái ψ_a ” – tức là xác suất của phép đo năng lượng sẽ mang lại giá trị E_a . Tất nhiên, sự chuẩn hóa hàm sóng ψ cho ta:

$$|c_a|^2 + |c_b|^2 = 1 \quad [9.5]$$

9.1.1. Hệ bị nhiễu:

Bây giờ giả sử rằng chúng ta mở một nhiễu loạn phụ thuộc thời gian $H'(t)$. Bởi vì ψ_a và ψ_b tạo ra một tập đầy đủ, hàm sóng $\psi(t)$ vẫn còn được biểu diễn như tổ hợp tuyến tính của chúng. Sự khác biệt chỉ là c_a và c_b bây giờ là hàm của t :

$$\psi(t) = c_a(t) \psi_a e^{-iE_a t / \hbar} + c_b(t) \psi_b e^{-iE_b t / \hbar} \quad [9-6]$$

[Tôi có thể gộp các yếu tố e mũ vào trong $c_a(t)$ và $c_b(t)$, và nhiều người thích làm cách này hơn, nhưng tôi nghĩ việc để riêng phần phụ thuộc thời gian ra sẽ đẹp hơn thậm chí khi không có nhiễu loạn]. Toàn bộ vấn đề là xác định c_a và c_b như hàm theo thời gian. Nếu chẳng hạn, hạt bắt đầu ở trạng thái ψ_a , vì vậy mà $c_a(0) = 1$ và $c_b(0) = 0$, và tại một thời điểm t_1 sau đó, chúng ta thấy rằng $c_a(t_1) = 0$, $c_b(t_1) = 1$, tức là hệ đang thực hiện chuyển dời từ ψ_a tới ψ_b .

Chúng ta tìm $c_a(t)$ và $c_b(t)$ dựa trên việc $\psi(t)$ phải thỏa mãn phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian.

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad \text{ở đây } H = H_0 + H'(t) \quad [9-7]$$

Từ phương trình 9.6 và phương trình 9.7, chúng ta tìm được

$$c_a[H_0\psi_a]e^{-iE_a t/\hbar} + c_b[H_0\psi_b]e^{-iE_b t/\hbar} + c_a[H'\psi_a]e^{-iE_a t/\hbar} + c_b[H'\psi_b]e^{-iE_b t/\hbar} = i\hbar \left[\dot{c}_a\psi_a e^{-iE_a t/\hbar} + \dot{c}_b\psi_b e^{-iE_b t/\hbar} + c_a\psi_a \left(-\frac{iE_a}{\hbar}\right) e^{-iE_a t/\hbar} + c_b\psi_b \left(-\frac{iE_b}{\hbar}\right) e^{-iE_b t/\hbar} \right].$$

Xem lại phương trình 9.1 ta thấy 2 số hạng đầu ở vế trái sẽ triệt tiêu 2 số hạng cuối cùng ở bên phải, và vì thế

$$c_a[H'\psi_a]e^{-iE_a t/\hbar} + c_b[H'\psi_b]e^{-iE_b t/\hbar} = i\hbar \left[\dot{c}_a\psi_a e^{-iE_a t/\hbar} + \dot{c}_b\psi_b e^{-iE_b t/\hbar} \right] \quad [9-8]$$

Để tách được \dot{c}_a , chúng ta dùng thủ thuật thông thường: Lấy tích trong với ψ_a và khai thác tính trực giao của ψ_a và ψ_b (phương trình 9-2):

$$c_a \langle \psi_a | H' | \psi_a \rangle e^{-iE_a t/\hbar} + c_b \langle \psi_a | H' | \psi_b \rangle e^{-iE_b t/\hbar} = i\hbar \dot{c}_a e^{-iE_a t/\hbar}.$$

Để ngắn gọn, chúng ta định nghĩa:

$$H'_{ij} \equiv \langle \psi_i | H' | \psi_j \rangle; \quad [9-9]$$

Chú ý rằng H' là toán tử Hermitic $H'_{ij} = (H'_{ji})^*$. Nhân hai vế với

$$-(i/\hbar)e^{iE_a t/\hbar}$$

chúng ta thu được

$$\dot{c}_a = -\frac{i}{\hbar} [c_a H'_{aa} + c_b H'_{ab} e^{-i(E_b - E_a)t/\hbar}] \quad [9-10]$$

Tương tự lấy tích trong với ψ_b ta được:

$$c_a \langle \psi_b | H' | \psi_a \rangle e^{-iE_a t/\hbar} + c_b \langle \psi_b | H' | \psi_b \rangle e^{-iE_b t/\hbar} = i\hbar \dot{c}_b e^{-iE_b t/\hbar}.$$

và vì thế:

$$\dot{c}_b = -\frac{i}{\hbar} [c_b H'_{bb} + c_a H'_{ba} e^{-i(E_b - E_a)t/\hbar}] \quad [9-11]$$

Phương trình 9-10 và 9-11 xác định $c_a(t)$ và $c_b(t)$, gộp lại với nhau, chúng hoàn toàn tương đương với phương trình Schrodinger (phụ thuộc thời gian), cho hệ hai mức năng lượng. Thông thường, những yếu tố ma trận chéo hóa sẽ của H' sẽ biến mất (Xem bài tập 9.4 cho trường hợp tổng quát hơn ở đó số hạng chéo hóa khác 0):

$$H'_{aa} = H'_{bb} = 0 \quad [9-12]$$

Trong trường hợp đó, các phương trình được đơn giản hóa thành:

$$\begin{aligned}\dot{c}_a &= -\frac{i}{\hbar} H'_{ab} e^{-i\omega_0 t} c_b \\ \dot{c}_b &= -\frac{i}{\hbar} H'_{ba} e^{-i\omega_0 t} c_a\end{aligned}\quad [9.13]$$

ở đây

$$\omega_0 = \frac{E_b - E_a}{\hbar} \quad [9.14]$$

(Chúng ta giả sử rằng $E_b \geq E_a$, vì vậy $\omega_0 \geq 0$)

9.1.2. Lí thuyết nhiễu loạn phụ thuộc thời gian:

Cho đến bây giờ, mọi thứ đều chính xác: chúng ta chưa đưa ra giả định về mức độ của nhiễu loạn. Nhưng nếu H' nhỏ, chúng ta có thể giải phương trình 9-13 theo một quy trình gần đúng liên tiếp như sau. Giả sử rằng hạt bắt đầu ở trạng thái thấp:

$$c_a(0) = 1, \quad c_b(0) = 0, \quad [9.15]$$

Nếu không có nhiễu loạn nào, chúng sẽ ở trạng thái này mãi mãi:

Bậc 0 :

$$c_a^{(0)}(t) = 1, \quad c_b^{(0)}(t) = 0, \quad [9.16]$$

Để tính phép gần đúng bậc I, chúng ta thế những giá trị này vào vế phải của Phương trình 9.13:

Bậc I:

$$\begin{aligned}\frac{dc_a}{dt} = 0 &\quad \Rightarrow \quad c_a^{(1)}(t) = 1; \\ \frac{dc_b}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H'_{ba} e^{i\omega_0 t} &\quad \Rightarrow \quad c_b^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{ba}(t') e^{i\omega_0 t'} dt';\end{aligned}\quad [9.17]$$

Bây giờ chúng ta chèn những biểu thức này vào bên phải để thu được phép gần đúng bậc II:

Bậc II:

$$\frac{dc_a}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H'_{ab} e^{-i\omega_0 t} \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \int_0^t H'_{ba}(t') e^{i\omega_0 t'} dt'$$

$$\Rightarrow c_a^{(2)}(t) = 1 - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t H'_{ab}(t') e^{i\omega_0 t'} \left[\int_0^{t'} H'_{ba}(t'') e^{i\omega_0 t''} dt'' \right] dt', \quad [9.18]$$

Trong khi đó c_b không đổi, $c_b^{(2)}(t) = c_b^{(1)}(t)$ [Chú ý rằng trong $c_a^{(2)}(t)$ bao gồm cả số hạng bậc 0, hiệu chỉnh bậc II sẽ chỉ là một mình số hạng tích phân].

Theo nguyên tắc, chúng ta có thể tiến hành quy trình này mãi mãi, luôn luôn thế gần đúng bậc n vào vế phải của phương trình 9.13 và giải phương trình bậc $n + 1$, chú ý rằng c_a sẽ thay đổi trong mỗi bậc chẵn, và c_b sẽ thay đổi trong mỗi bậc lẻ. Bên cạnh đó, sai số trong phép gần đúng bậc nhất hiển nhiên nằm ở chỗ

$$|c_a^{(1)}(t)|^2 + |c_b^{(1)}(t)|^2 \neq 1$$

(tất nhiên các hệ số chính xác phải tuân theo phương trình 9.5). Tuy nhiên,

$|c_a^{(1)}(t)|^2 + |c_b^{(1)}(t)|^2 \neq 1$ sẽ bằng 1 đối với bậc I trong H' , đó là tất cả những gì chúng ta mong đợi từ phép gần đúng bậc I. Và hoàn toàn tương tự đối với các bậc cao hơn.

9.1.3. Những nhiễu loạn hình sin:

Giả sử rằng nhiễu loạn phụ thuộc thời gian có dạng hình sin:

$$H'(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r}) \cos(\omega t) \quad [9.22]$$

Vì vậy:

$$H'_{ab} = V_{ab} \cos(\omega t) \quad [9.23]$$

ở đây

$$V_{ab} \equiv \langle \psi_a | V | \psi_b \rangle. \quad [9.24]$$

(Như trước, tôi sẽ giả sử rằng yếu tố ma trận chéo hóa biến mất, vì lẽ rằng điều này hầu như luôn luôn đúng trong thực tế). Đối với bậc I (từ bây giờ chúng ta sẽ chỉ làm việc với bậc I). Chúng ta có (phương trình 9.17):

$$\begin{aligned} c_b(t) &\cong -\frac{i}{\hbar} V_{ba} \int_0^t \cos(\omega t') e^{i\omega_0 t'} dt' = -\frac{iV_{ba}}{2\hbar} \int_0^t \left[e^{i(\omega_0+\omega)t'} + e^{i(\omega_0-\omega)t'} \right] dt' \\ &= -\frac{V_{ba}}{2\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_0+\omega)t}-1}{\omega_0+\omega} + \frac{e^{i(\omega_0-\omega)t}-1}{\omega_0-\omega} \right]. \end{aligned} \quad [9.25]$$

Đây là kết quả nhưng nó hơi cồng kềnh. Về thực chất, bài toán sẽ trở nên đơn giản hơn nếu chúng ta chỉ chú ý đến các tần số cưỡng bức (ω) gần với tần số dịch chuyển (ω_0), vì thế số hạng thứ II trong các ngoặc vuông chiếm ưu thế, chúng ta giả sử rằng:

$$\omega_0 + \omega \gg |\omega_0 - \omega|. \quad [9.26]$$

Điều này chẳng có sự giới hạn gì lắm, bởi vì nhiễu loạn tại những tần số khác có một xác suất gây ra sự chuyển dịch không đáng kể. Bỏ số hạng thứ nhất, chúng ta có:

$$\begin{aligned} c_b(t) &\cong -\frac{V_{ba}}{2\hbar} \frac{e^{i(\omega_0-\omega)t/2}}{\omega_0 - \omega} [e^{i(\omega_0-\omega)t/2} - e^{-i(\omega_0-\omega)t/2}] \\ &= -i \frac{V_{ba}}{\hbar} \frac{\sin[(\omega_0 - \omega)t/2]}{\omega_0 - \omega} e^{i(\omega_0-\omega)t/2}. \end{aligned} \quad [9.27]$$

Xác suất dịch chuyển – xác suất mà một hạt ban đầu ở trạng thái ψ_a và vào thời điểm t , ở trạng thái ψ_b là:

$$P_{a \rightarrow b}(t) = |c_b(t)|^2 \cong \frac{|V_{ab}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{\omega_0 - \omega} \quad [9.28]$$

Điều đáng chú ý của kết quả này là, với tư cách là hàm theo thời gian, xác suất chuyển dời dao động hình sin (Hình 9.1). Sau khi đạt giá trị cực đại $|V_{ab}|^2/\pi^2(\omega_0 - \omega)^2$ – nhỏ hơn nhiều so với 1, nếu không giả thiết nhiễu loạn nhỏ sẽ không có hiệu lực – nó sẽ rơi xuống giá trị 0! Tại những thời điểm $t_n = 2n\pi/|\omega_0 - \omega|$, ở đây $n = 1, 2, 3, \dots$, hạt chắc chắn trở về trạng thái thấp. Nếu bạn muốn tăng cơ hội kích thích một sự chuyển dời, bạn không nên duy trì sự nhiễu loạn trong thời gian dài: bạn nên tắt nó sau một khoảng thời gian $\pi/|\omega_0 - \omega|$, và hy vọng sẽ bắt gặp hệ ở trạng thái cao. Trong bài tập 9.7, người ta chỉ ra rằng “sự lắc lư” này không phải là một đối tượng lạ chỉ có trong lý thuyết nhiễu loạn – nó cũng xuất hiện trong nghiệm chính xác, mặc dù sự lắc lư tần số hơi thay đổi một chút.

Như tôi đã nói từ trước, xác suất chuyển dời lớn nhất khi tần số cưỡng bức gần với tần số “tự nhiên” ω_0 . Điều này được minh họa trong hình 9.2, $P_{a \rightarrow b}$ được vẽ như hàm theo ω . Đỉnh có chiều cao là $(|V_{ab}|t/2\hbar)^2$ và bề rộng $4\pi/t$; hiển nhiên nó sẽ cao hơn và hẹp hơn khi thời gian trôi. (Có vẻ là giá trị cực đại sẽ tăng một cách không giới hạn). Tuy nhiên, nhiễu loạn được giả sử rằng mất đi trước khi nó tiến tới 1, vì vậy chúng ta có thể tin rằng kết quả chỉ áp dụng cho những khoảng thời gian t tương đối nhỏ. Trong bài tập 9.7, bạn sẽ thấy rằng kết quả chính xác là sẽ không bao giờ lớn hơn 1.

