

PHAN ĐÌNH KIẾN

GIÁO TRÌNH  
**CƠ HỌC LƯỢNG TỬ**

NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

---

**Mã số: 01.02.5/46. ĐH 2004**

# MỤC LỤC

<b>Lời nói đầu</b>	<b>7</b>
<b>Chương 1. SỰ RA ĐỜI CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ</b>	<b>8</b>
§1. Những tiên đề của cơ học lượng tử	8
§2. Tính chất sóng – hạt của các vi hạt	10
§3. Hàm sóng	14
§4. Bó sóng – Vận tốc pha, vận tốc nhóm	18
§5. Nguyên lí chồng chất trạng thái	21
§6. Các tập hợp thống kê lượng tử	24
<b>Chương 2. TOÁN TỬ</b>	<b>27</b>
§1. Toán tử tuyến tính	27
§2. Trị riêng và hàm riêng của toán tử	30
§3. Toán tử tự liên hợp tuyến tính (Toán tử Hermite)	31
§4. Những tính chất cơ bản của hàm riêng	33
§5. Điều kiện khả dĩ để hai toán tử có chung hàm riêng	37
<b>Chương 3. CÁC ĐẠI LƯỢNG CƠ HỌC LƯỢNG TỬ VÀ TOÁN TỬ</b>	<b>39</b>
§1. Nguyên lí tương ứng. Các tiên đề của cơ học lượng tử	39
§2. Giá trị trung bình và độ lệch toàn phương trung bình	40
§3. Phương pháp xác định giá trị đo các đại lượng vật lí	42
§4. Dạng tường minh của một số toán tử	44
§5. Điều kiện khả dĩ để hai đại lượng vật lí có giá trị đồng thời xác định	47
§6. Hệ thức bất định Heisenberg	49
<b>Chương 4. SỰ BIẾN ĐỔI TRẠNG THÁI VÀ CÁC ĐẠI LƯỢNG VẬT LÍ THEO THỜI GIAN</b>	<b>57</b>
§1. Phương trình Schrodinger	57
§2. Mật độ xác suất và mật độ dòng xác suất	60
§3. Trạng thái dừng	63
§4. Đạo hàm của toán tử theo thời gian	65
§5. Phương trình chuyển động trong cơ học lượng tử	68
§6. Tích phân chuyển động	70

<b>Chương 5. PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER VỚI MỘT SỐ BÀI TOÁN ĐƠN GIẢN</b>	73
§1. Hàng rào thế năng có bề dày vô hạn	73
§2. Hàng rào thế năng có bề dày hữu hạn	78
§3. Hố thế năng có thành cao vô hạn	81
§4. Hố thế năng có thành cao hữu hạn	84
§5. Hố thế ba chiều	86
§6. Electron trong kim loại	88
§7. Dao động tử điều hoà	90
<b>Chương 6. CHUYỂN ĐỘNG TRONG TRƯỜNG XUYÊN TÂM</b>	95
§1. Toán tử momen động lượng và các tính chất của nó	95
§2. Hàm riêng và trị riêng của các toán tử $\hat{M}^2$ và $\hat{M}_z$	98
§3. Chuyển động trong trường đối xứng tâm	102
§4. Chuyển động trong trường Coulomb	104
§5. Nguyên tử Hydro	107
§6. Rotato	110
§7. Định luật bảo toàn chắn lẻ	113
<b>Chương 7. NGUYÊN TỬ TRONG TỪ TRƯỜNG NGOÀI</b>	117
§1. Momen cơ và momen từ của electron	117
§2. Dòng điện trong nguyên tử Hydro	120
§3. Phương trình Schrodinger của electron trong từ trường	122
§4. Hiệu ứng Zeeman đơn giản	124
<b>Chương 8. CƠ SỞ CỦA LÍ THUYẾT BIỂU DIỄN</b>	129
§1. Các phép biểu diễn trạng thái các hệ lượng tử	129
§2. Các phép biểu diễn các toán tử	131
§3. Toán tử và ma trận	132
§4. Phép chuyển biểu diễn	136
§5. Trị trung bình dưới dạng ma trận	140
§6. Hàm riêng và trị riêng dưới dạng ma trận	141
§7. Phương trình Schrodinger và phương trình Heisenberg dưới dạng ma trận	143
§8. Kí hiệu Dirac	145

<b>Chương 9. SPIN – HỆ HẠT ĐỒNG NHẤT</b>	149
§1. Spin của các hạt cơ bản. Hàm sóng spin và toán tử spin	149
§2. Hàm riêng của các toán tử hình chiếu spin	153
§3. Nguyên lí đồng nhất của các hạt cơ bản	154
§4. Trạng thái đối xứng và phản đối xứng	155
§5. Hàm sóng của hệ các hạt Fermion và hệ các hạt Boson. Nguyên lí Pauli	157
§6. Hàm sóng của hệ hai hạt đồng nhất có spin $\frac{1}{2}$	160
§7. Phương pháp lượng tử hóa thứ cấp đối với hệ các hạt Boson	162
§8. Phương pháp lượng tử hóa thứ cấp đối với các hạt Fermion	167
<b>Chương 10. LÍ THUYẾT NHIỄU LOẠN</b>	169
§1. Đặt vấn đề bài toán nhiễu loạn	169
§2. Lí thuyết nhiễu loạn dừng không suy biến	170
§3. Lí thuyết nhiễu loạn dừng có suy biến	173
§4. Trạng thái cơ bản của nguyên tử Heli và các ion tương tự	176
§5. Trạng thái bất kì của nguyên tử Heli và các ion tương tự. Năng lượng trao đổi	179
§6. Hiệu ứng Stark	182
§7. Nhiễu loạn không dừng	189
§8. Sự chuyển dịch của hệ đến trạng thái mới dưới ảnh hưởng của nhiễu loạn	192
<b>Chương 11. LÍ THUYẾT TÁN XẠ</b>	195
§1. Đặt vấn đề bài toán tán xạ	195
§2. Tính biên độ tán xạ đàn hồi bằng phương pháp gần đúng Born	199
§3. Pha của sóng tán xạ và tiết diện hiệu dụng riêng phần	204
§4. Tán xạ đàn hồi bởi nguyên tử đối với các hạt mang điện chuyển động nhanh	207
§5. Tán xạ cộng hưởng	210
<b>Phụ lục</b>	212
<b>Tài liệu tham khảo</b>	229



## Lời nói đầu

*Giáo trình Cơ học lượng tử* này được biên soạn theo chương trình đào tạo mới xây dựng của trường Đại học Sư phạm – Đại học Thái Nguyên.

Nội dung cuốn sách này chủ yếu dựa trên cơ sở cuốn “Giáo trình Cơ học lượng tử” của tác giả, đã được trường Đại học Sư phạm – Đại học Thái Nguyên lưu hành trong những năm gần đây, đồng thời được chỉnh lí và bổ sung thêm để phù hợp với chương trình mới.

Cuốn sách được dùng cho sinh viên các trường Đại học Sư phạm và cũng có thể dùng làm tài liệu tham khảo cho những ai cần đến Cơ học lượng tử.

Việc soạn một giáo trình Cơ học lượng tử vừa đảm bảo các yêu cầu cơ bản theo chương trình chung của Bộ, vừa mang tính sư phạm, phù hợp với đối tượng đào tạo là việc làm khó khăn, đòi hỏi nhiều công sức. Do vậy cuốn sách chắc chắn còn nhiều thiếu sót, chúng tôi rất mong và cảm ơn sự góp ý của bạn đọc.

Tác giả xin chân thành cảm ơn Giáo sư Đỗ Đình Thanh, Giáo sư Nguyễn Văn Thoả đã đóng góp nhiều ý kiến quý báu cho cuốn sách này.

**Tác giả**



## Chương 1

# SỰ RA ĐỜI CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

### §1. NHỮNG TIỀN ĐỀ CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

Đến cuối thế kỉ thứ XIX Vật lí học đã tích lũy được rất nhiều các tư liệu thực nghiệm và khám phá ra hàng loạt các sự kiện mới. Lí thuyết cổ điển không thể giải thích thoả mãn những sự kiện đó. Vào đầu thế kỉ XX đã nổ ra cuộc khủng hoảng vật lí học rất trầm trọng và ảnh hưởng sâu rộng đến các ngành khoa học khác. Khó khăn gay gắt nhất là việc giải thích sự phân bố phổ bức xạ của vật đen tuyệt đối. Từ lí thuyết cổ điển Rayleigh và Jeans đã chứng minh một cách chặt chẽ và rút ra công thức:

$$\rho_{\lambda T} = f\lambda^{-4}T \quad (1.1)$$

Ở đây:  $f$  là hệ số tỉ lệ;  $\lambda$  là bước sóng;  $T$  là nhiệt độ tuyệt đối.

Công thức (1.1) cho thấy năng suất bức xạ toàn phần tỉ lệ thuận với nhiệt độ tuyệt đối và tỉ lệ nghịch với lũy thừa bậc 4 của bước sóng. Công thức này chỉ đúng với vùng có bước sóng dài  $\lambda > \lambda_{\max}$ , còn không đúng với vùng có bước sóng ngắn – vùng tử ngoại. Ngược lại, công thức của Wien chỉ đúng với vùng có bước sóng ngắn.

$$\rho_{\lambda T} = c_1 \lambda^{-5} e^{-\frac{c_2}{\lambda T}} \quad (1.2)$$

Ở đây  $c_1, c_2$  là các hệ số tỉ lệ.

Ngoài ra, lí thuyết cổ điển cũng bất lực trong việc giải thích nhiệt lượng riêng của vật rắn ở nhiệt độ thấp, sự tồn tại 5 bậc tự do của phân tử hai nguyên tử ở nhiệt độ thường,...

Vào năm 1900, Planck đã thoát ra khỏi những bế tắc trên bằng cách đưa ra thuyết lượng tử. Ông cho rằng sở dĩ Rayleigh – Jeans và Wien thất bại trong việc giải thích năng suất bức xạ của vật đen tuyệt đối là vì các nhà bác học đó quan niệm năng lượng của các dao động tử có tính liên tục. Trái lại, Planck đưa ra giả thuyết rất cách mạng: năng lượng của các dao



động tử có tính gián đoạn như điện lượng, nghĩa là năng lượng của một dao động tử không thể có giá trị bất kì mà bao giờ cũng gấp một số nguyên lần năng lượng nguyên tố  $\varepsilon$  (gọi là lượng tử năng lượng). Với dao động có tần số  $\nu$  thì:

$$\varepsilon = h\nu \quad (1.3)$$

$h = 6.6256 \cdot 10^{-34} \text{Js}$  là hằng số Planck.

Công thức Planck phù hợp với thực nghiệm ở mức độ chính xác cao. Dựa vào công thức này, Planck đã suy ra công thức năng suất bức xạ toàn phần của vật đen tuyệt đối

$$\rho_{\lambda,T} = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{k\lambda T}} - 1} \quad (1.4)$$

Ở đây:  $c$  là vận tốc ánh sáng;  $k$  là hằng số Boltzmann

Các công thức Rayleigh – Jeans và Wien là những trường hợp đặc biệt của công thức Planck.

Đến năm 1905, trên cơ sở phát triển thuyết lượng tử của Planck, Einstein đã đưa ra thuyết phôtôn. Thuyết này giải thích được đầy đủ các hiện tượng quang điện.

Các thí nghiệm của Frank và Hertz đã chứng tỏ năng lượng của các nguyên tử có tính gián đoạn.

Nghiên cứu tính chất gián đoạn của năng lượng đối với hệ nguyên tử và sự bức xạ của nó, năm 1913 Bohr đề nghị sửa đổi các định luật cổ điển, lựa chọn và vận dụng thích hợp đối với hệ nguyên tử bằng cách đưa vào hằng số Planck. Bohr đưa ra hai tiên đề nổi tiếng sau đây:

– **Tiên đề 1:** Hệ nguyên tử chỉ bền khi ở trong các trạng thái dừng xác định, ứng với một chuỗi các giá trị năng lượng gián đoạn hoặc liên tục. Mọi sự thay đổi bất kì về năng lượng đều gắn liền với sự dịch chuyển nhảy vọt của hệ từ trạng thái dừng này sang trạng thái dừng khác.

– **Tiên đề 2:** Bức xạ điện từ chỉ xảy ra khi hệ nguyên tử chuyển từ trạng thái dừng này sang trạng thái dừng khác. Bức xạ ứng với sự dịch chuyển từ trạng thái có mức năng lượng  $E_i$  sang trạng thái có mức năng lượng  $E_j$  là bức xạ đơn sắc và tần số được xác định theo công thức:

$$h\nu = E_i - E_j \quad (1.5)$$

$E_i > E_j$  : Phát xạ

$E_i < E_j$  : Hấp thụ

Bức xạ có thể tự phát khi hệ ở các mức năng lượng cao hơn mức cơ bản.

## §2. TÍNH CHẤT SÓNG – HẠT CỦA CÁC VI HẠT

### 1. Tính chất sóng hạt của ánh sáng

Lưỡng tính sóng – hạt của các vi hạt đầu tiên được xác định đối với ánh sáng.

– Tính chất sóng của ánh sáng được thể hiện qua các hiện tượng giao thoa, nhiễu xạ, phân cực... Bản chất sóng ánh sáng là sóng điện từ. Các đại lượng đặc trưng cho sóng là:

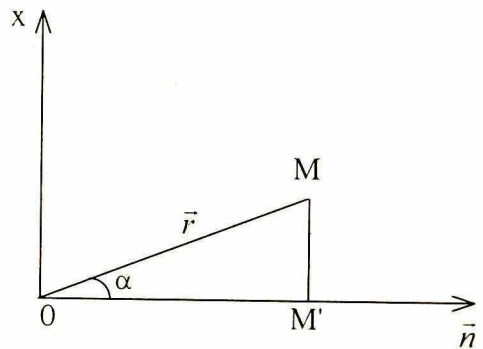
$$\text{Tần số: } \nu = \frac{1}{T} = \frac{\omega}{2\pi} \quad (1.6)$$

$$\text{Bước sóng: } \lambda = \frac{2\pi}{k} \quad (1.7)$$

$$\text{Số sóng: } \vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n}$$

( $\vec{n}$  là vectơ đơn vị chỉ phương truyền sóng).

Phương trình sóng: Giả sử tại điểm 0 sóng có dạng  $x_0 = A\cos\omega t$ , sau thời gian  $\Delta t = \frac{d}{c}$  ( $d = r\cos\alpha = \vec{r} \cdot \vec{n}$ ) sóng lan đến điểm M, li độ dao động tại điểm M' giống li độ tại điểm 0.



Hình 1

Vì sóng phẳng nên mặt sóng đi qua M và M' đồng thời. Sóng tại điểm M' có dạng:

$$x_{M'} = A\cos\omega(t - \Delta t) = A\cos\omega\left(t - \frac{d}{v}\right) = A\cos\left(\omega t - \frac{2\pi d}{T v}\right) = A\cos\left(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n} \cdot \vec{r}\right)$$