

NGUYỄN HỮU MÌNH (chủ biên) - TẠ DUY LỢI
ĐỖ ĐÌNH THANH - LÊ TRỌNG TƯỜNG

BÀI TẬP VẬT LÝ LÍ THUYẾT

TẬP HAI

(CƠ HỌC LƯỢNG TỬ - VẬT LÝ THỐNG KÊ)

NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC



NGUYỄN HỮU MINH (chủ biên)
TẠ DUY LỢI - ĐỖ ĐÌNH THANH – LÊ TRỌNG TƯỜNG

Bài tập **VẬT LÝ LÝ THUYẾT**

Tập hai

(Cơ học lượng tử – Vật lý thống kê)
(Tái bản lần thứ nhất)

NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC

Bản quyền thuộc Nhà xuất bản Giáo dục

11-2007/CXB/286-2119/GD

Mã số: 7K536T7 - DAI

Phần III

CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

A – ĐỀ BÀI

§1. NHỮNG CƠ SỞ VẬT LÝ CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ MẪU NGUYÊN TỬ RUTHERFORD (RUTHEFORD) LÍ THUYẾT BO (BOHR)

1. Xác định năng lượng, khối lượng và xung lượng của photon có bước sóng tương ứng với :

- a) Ánh sáng trông thấy có $\lambda = 0,7\mu\text{m}$
- b) Bức xạ Ronghen có $\lambda = 0,25\text{\AA}$
- c) Bức xạ gamma có $\lambda = 0,016\text{\AA}$

2. Ánh sáng có bước sóng $\lambda = 4,2 \cdot 10^{-7}\text{m}$ được chiếu trên mặt kim loại kali. Công thoát của electron từ mặt kim loại kali bằng $3,2 \cdot 10^{-19}\text{J}$. Xác định vận tốc cực đại của electron bay ra từ mặt kim loại kali.

3. Tìm công thức để tính bước sóng Đơ Broi (DeBroglie) cho hạt tương đối tính.

4. Tìm bước sóng De Broglie cho các trường hợp sau :

a) Electron bay qua các hiệu điện thế 1V, 100V, 1000V

b) Electron bay với vận tốc $v = 10^8$ cm/s

c) Electron chuyển động với năng lượng 1 MeV.

d) Quả cầu có khối lượng 1g chuyển động với vận tốc $v = 1$ m/s.

5. Dùng điều kiện lượng tử hoá Bo $\oint p dq = nh$ (q là tọa độ suy rộng tương ứng với xung lượng suy rộng p , n là số nguyên $n = 1, 2, 3, \dots$ và h là hằng số Planck) (Planck) để tìm :

a) Bán kính quỹ đạo Bo thứ nhất và thứ hai của electron trong nguyên tử hydro và các vận tốc của nó trên các quỹ đạo đó.

b) Các mức năng lượng của electron trong nguyên tử hydro xác định giá trị mức năng lượng của electron trên quỹ đạo Bo thứ nhất.

c) Bước sóng của vạch quang phổ khi electron trong nguyên tử hydro chuyển từ quỹ đạo lượng tử thứ tư ($n = 4$) về quỹ đạo lượng tử thứ hai ($n = 2$).

6. Dùng điều kiện lượng tử hóa Bo để tìm các mức năng lượng của dao động tử điều hoà một chiều với tần số ω .

7. Hàm sóng của hạt trong giếng thế một chiều có dạng :

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right)$$

trong đó $0 \leq x \leq d$ với $n = 1, 2, 3, 4, \dots$. Xác định A từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng.

8. Trạng thái của hạt được mô tả bằng hàm sóng :

$$\psi(x) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2} + ikx}$$

trong đó A , a , k là những hằng số.

- a) Từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng xác định A.
 b) Xác định x để cho mật độ xác suất tìm thấy hạt có trị lớn nhất.
 c) Tìm xác suất để hạt nằm trong khoảng từ $-a$ đến $+a$ trên trục x. Cho biết :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad , \quad \int_0^1 e^{-x^2} dx = 0,84 \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

9. Hàm sóng của electron trong nguyên tử hiđrô ở trạng thái cơ bản (trạng thái có mức năng lượng thấp nhất) có dạng :

$$\varphi(r) = A e^{-\frac{r}{a}}$$

trong đó $a = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ là bán kính quỹ đạo Bo thứ nhất.

- a) Dùng điều kiện chuẩn hoá hàm sóng xác định A.
 b) Xác định r để cho mật độ xác suất theo bán kính có giá trị lớn nhất.

§2. TOÁN TỬ

10. Chứng minh rằng :

$$a) \frac{d^2}{dx^2} x^2 = x^2 \frac{d^2}{dx^2} + 4x \frac{d}{dx} + 2.$$

$$b) \left(\frac{d}{dx} x \right)^2 = x^2 \frac{d^2}{dx^2} + 3x \frac{d}{dx} + 1.$$

11. Chứng minh rằng nếu các toán tử $\hat{A}$ và $\hat{B}$ là những toán tử tuyến tính thì toán tử $(\hat{A} + \hat{B})$ và toán tử $\hat{A}\hat{B}$ cũng là những toán tử tuyến tính.

12. Chứng tỏ rằng nếu các toán tử $\hat{A}$ và $\hat{B}$ là những toán tử ecmit thì các toán tử $(\hat{A} + \hat{B})$ và $(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})$ là những toán tử ecmit. Với điều kiện nào thì $\hat{A}\hat{B}$ hoặc $\hat{B}\hat{A}$ là toán tử ecmit ?

13. Chứng tỏ rằng các toán tử sau đây là ecmit :

$$a) \hat{x} = x, \hat{y} = y, \hat{z} = z, \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x},$$

$$\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

$$b) \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} + U(x, y, z)$$

(m là khối lượng của hạt, U là thế năng của hạt)

$$c) \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x, \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$$

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

14. Chứng minh rằng nếu $\hat{A}$, $\hat{B}$ là những toán tử ecmit thì

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hat{C}$$

trong đó $\hat{C}$ là toán tử ecmit.

15. Chứng minh rằng nếu $\hat{A}$, $\hat{B}$ là những toán tử ecmit, $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$ và α là số thực thì :

$$\int |(\alpha\hat{A} - i\hat{B})\psi(x)|^2 dx = \int \psi^*(x)(\alpha^2\hat{A}^2 + \alpha\hat{C} + \hat{B}^2)\psi(x)dx$$

16. Toán tử tịnh tiến một vectơ vô cùng bé $\vec{a}$ được kí hiệu là $\hat{T}_{\vec{a}}$ và được định nghĩa như sau :

$$\hat{T}_{\vec{a}}\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{a})$$

Tìm dạng toán tử tịnh tiến $\hat{T}_a$ và biểu diễn nó qua toán tử xung lượng

$$\hat{p} = -i\hbar \left[\bar{r} \frac{\partial}{\partial x} + z \frac{\partial}{\partial y} + \bar{k} \frac{\partial}{\partial z} \right] = -i\hbar \nabla$$

17. Tìm toán tử quay một góc $\delta\varphi$ rất bé quay hướng $\bar{n}_0$ và biểu diễn nó qua toán tử mômen xung lượng $\hat{L} = [\bar{r} \wedge \bar{p}]$. Cho biết toán tử quay một góc bé $\delta\varphi = \bar{n}_0 \delta\varphi$ được kí hiệu là $\hat{R}(\delta\varphi)$ và được định nghĩa như sau :

$$\hat{R}(\delta\varphi)\psi(\bar{r}) = \psi(\bar{r} + \delta\bar{r})$$

trong đó $\delta\bar{r} = [\delta\varphi \wedge \bar{r}]$.

18. Toán tử A^+ được gọi là toán tử liên hiệp ecmit với toán tử $\hat{A}$ nếu :

$$\int \psi(x) (\hat{A}^+ \varphi(x))^* dx = \int \varphi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx$$

Chứng minh rằng :

a) Toán tử $\hat{A}$ là toán tử ecmit nếu $\hat{A}^+ = \hat{A}$

b) $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+$

c) $[\hat{A}, \hat{B}]^+ = [\hat{B}^+, \hat{A}^+]$

19. Chứng minh rằng ta có các hệ thức giao hoán giữa các toán tử sau :

a) $y \hat{p}_x - \hat{p}_x y = 0, \quad z \hat{p}_x - \hat{p}_x z = 0, \quad x \hat{p}_x - \hat{p}_x x = i\hbar.$

b) $x \hat{L}_x - \hat{L}_x x = -i\hbar z, \quad z \hat{L}_x - \hat{L}_x z = i\hbar y$

trong đó $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{L}_x = y \hat{p}_z - z \hat{p}_y.$

20. Đặt $\widehat{L}_- = \widehat{L}_x + i\widehat{L}_y$, $\widehat{L}_+ = \widehat{L}_x - i\widehat{L}_y$ chứng minh rằng :

a) $\widehat{L}_z\widehat{L}_- - \widehat{L}_+\widehat{L}_z = \hbar\widehat{L}_-$

b) $\widehat{L}_z\widehat{L}_+ - \widehat{L}_-\widehat{L}_z = -\hbar\widehat{L}_+$

c) $\widehat{L}_z(\widehat{L}_-\widehat{L}_+) - (\widehat{L}_-\widehat{L}_+)\widehat{L}_z = 0$

d) $\widehat{L}^2 = \widehat{L}_-\widehat{L}_+ + \widehat{L}_z^2 + \hbar\widehat{L}_z$.

e) $\widehat{L}_z\widehat{L}^2 - \widehat{L}^2\widehat{L}_z = 0$, $\widehat{L}_y\widehat{L}^2 - \widehat{L}^2\widehat{L}_y = 0$, $\widehat{L}_x\widehat{L}^2 - \widehat{L}^2\widehat{L}_x = 0$

trong đó $\widehat{L}^2 = \widehat{L}_x^2 + \widehat{L}_y^2 + \widehat{L}_z^2$.

21. Chứng minh rằng ta có các hệ thức giao hoán sau :

a) $\widehat{p}_x f(x) - f(x)\widehat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial f(x)}{\partial x}$

b) $\widehat{p}\vec{A}(x, y, z) - \vec{A}(x, y, z)\widehat{p} = -i\hbar \text{div}\vec{A}$

trong đó $\widehat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, $\widehat{p} = -i\hbar \nabla$, $f(x)$ là hàm của x và $\vec{A}$ là vec tơ phụ thuộc vào x, y, z .

c) $\hat{E}t - t\hat{E} = i\hbar$ với $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ và t là thời gian.

22. Tìm hàm riêng và trị riêng của các toán tử sau đây :

a) $\widehat{K} = -i\left(\frac{x}{a^2} + \frac{d}{dx}\right)$ với $a = \text{const.}$

b) $\widehat{L}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$.

c) $\widehat{P}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$ nếu hàm riêng của $\widehat{p}_x$ là $\psi(x)$ thoả mãn điều

kiện $\psi(x) = \psi(x + a)$ với $a = \text{const.}$

$$d) \hat{T} = \frac{\widehat{L_z^2}}{2I} = -\frac{\hbar^2}{2I} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

trong đó $I = \text{const}$ (I là mômen quán tính và $\hat{T}$ là toán tử động năng của rôto phẳng).

23. Toán tử Haminton $\hat{H}$ của hạt ở trong giếng thế vuông góc một chiều có dạng :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + U(x)$$

$$\text{trong đó } U(x) = \begin{cases} 0 & \text{khi } 0 \leq x \leq d \\ \infty & \text{khi } x > d \text{ và } x < 0 \end{cases}$$

Tìm hàm riêng đã chuẩn hoá và trị riêng của toán tử $\hat{H}$.

24. Gọi L_z là trị riêng của toán tử $\widehat{L_z}$ và L^2 là trị riêng của toán tử $\widehat{L^2}$.

a) Chứng minh rằng $L^2 - L_z^2 \geq 0$.

b) Chứng tỏ rằng nếu $\psi_m(\varphi)$ là hàm riêng của toán tử $\widehat{L_z}$ tương ứng với trị riêng $m\hbar$ thì $\widehat{L_-}\psi_m(\varphi)$ và $\widehat{L_+}\psi_m(\varphi)$ cũng là những hàm riêng của toán tử $\widehat{L_z}$ tương ứng với các trị riêng $(m+1)\hbar$ và $(m-1)\hbar$.

c) Gọi l là giá trị lớn nhất của m , chứng minh rằng $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$.

25. Tìm các trị riêng của toán tử $\widehat{L^2}$ tương ứng với hàm riêng :

$$Y(\theta, \varphi) = A \{ \cos\theta + 2\sin\theta \cos\varphi \}, A = \text{const.}$$

26. Từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng, xác định hệ số chuẩn hoá N_{lm} của hàm $Y_{lm}(\theta, \varphi) = N_{lm} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}$ ($Y_{lm}(\theta, \varphi)$ là hàm riêng của toán tử $\widehat{L^2}$).

27. Chứng tỏ rằng trị trung bình của bình phương toán tử emmit là không âm.

28. Trạng thái của hạt được mô tả bởi hàm sóng.

$$\varphi(x) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2} + ikx}$$

trong đó a, k là những hằng số và $A = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}$.

Tính các trị trung bình $\overline{x}, \overline{p_x}, \overline{\Delta x^2}, \overline{\Delta p_x^2}$ và nghiệm lại hệ thức bất định.

29. Hạt chuyển động trong giếng thế chữ nhật một chiều có thành cao vô hạn được mô tả bằng hàm sóng đã chuẩn hoá :

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right)$$

trong đó d là bề rộng của giếng thế và $n = 1, 2, 3, \dots$

a) Dùng hệ thức bất định ước tính mức năng lượng thấp nhất có thể có của hạt .

b) Tính các trị trung bình $\overline{x}, \overline{(x - \overline{x})^2}$ và động năng trung bình $\overline{T}$ của hạt.

c) Tìm phân bố xác suất những giá trị khác nhau của xung lượng của hạt.

30. Cho một dao động tử điều hoà một chiều.

a) Xuất phát từ hệ thức bất định, xác định mức năng lượng thấp nhất có thể có của dao động tử điều hoà.

b) Tính các trị trung bình $\overline{x}$, $\overline{x^2}$, $\overline{x^3}$ và $\overline{x^4}$ của dao động tử điều hoà ở trạng thái cơ bản (trạng thái có mức năng lượng thấp nhất) $\psi_0(x)$.

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-\frac{ax^2}{2}}, \quad a = \frac{m\omega}{\hbar}$$

c) Các hệ thức sau đây $\overline{x^2} = (\overline{x})^2$, $\overline{x^4} = (\overline{x^2})^2$ có đúng không ?

31. Trạng thái cơ bản của electron trong nguyên tử hydro được mô tả bằng hàm sóng :

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}$$

trong đó a là bán kính quỹ đạo Bo thứ nhất.

a) Tính các trị trung bình $\overline{r}$ và $\overline{r^2}$ trong trạng thái cơ bản này.

b) Tìm phân bố xác suất những giá trị khác nhau của xung lượng của electron ở trạng thái cơ bản.

32. Chứng tỏ rằng nếu ψ là hàm riêng của toán tử $\widehat{L_z}$ thì các trị trung bình $\overline{L_x}$ và $\overline{L_y}$ trong trạng thái này đều bằng không.

33. Rôto phẳng là mô hình của hạt chuyển động quay trong mặt phẳng có mômen xung lượng L_z . Tìm các giá trị có thể có của mômen L_z , các xác suất của chúng và trị trung bình của mômen L_z trong trạng thái của rôto phẳng mô tả bằng hàm sóng :

$$\psi(\varphi) = A \cos^2 \varphi$$

trong đó A là hệ số chuẩn hoá và φ là góc quay xung quanh trục Oz .

34. Hạt chuyển động trong giếng thế một chiều có bề rộng d có thành cao vô hạn được mô tả bằng hàm sóng :

$$\psi(x) = Ax(d - x)$$

trong đó A là hệ số chuẩn hoá.

a) Tìm phân bố xác suất của các giá trị khác nhau của năng lượng của hạt.

b) Tính trị trung bình của năng lượng $\bar{E}$ và $\overline{(E - \bar{E})^2}$. Cho biết:

$$\sum_{n=1,3,5}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{96}, \quad \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{8}$$

35. Thiết lập quy tắc lấy đạo hàm theo thời gian của tích hai toán tử.

36. Chứng tỏ rằng trị trung bình của xung lượng ở trạng thái dừng có phổ gián đoạn bằng không.

37. Giá trị trung bình của đại lượng L ở thời điểm t được xác định như sau :

$$\bar{L} = \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{L} \psi(\vec{r}, t) dV$$

trong đó $\hat{L}$ không phụ thuộc rõ vào thời gian.

a) Chứng minh rằng nếu ta có $\hat{\mathcal{V}}(t) = \hat{S}^{-1}(t) \hat{L} \hat{S}(t)$, với toán tử $\hat{S}(t)$ được xác định bằng hệ thức $\hat{S}(t) \psi(\vec{r}, 0) = \psi(\vec{r}, t)$ thì :

$$\bar{L} = \int \psi^*(\vec{r}, 0) \hat{\mathcal{V}}(t) \psi(\vec{r}, 0) dV.$$

b) Chứng minh rằng ta có hệ thức :

$$\frac{d\hat{T}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{T} - \hat{T}\hat{H})$$

trong đó $\hat{H} = \hat{S}^{-1}\hat{H}\hat{S}$.

c) Chứng minh rằng nếu : $\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = i\hbar\hat{N}$ thì $\hat{T}\hat{H} - \hat{H}\hat{T} = i\hbar\hat{T}$.

trong đó $\hat{H} = \hat{S}^{-1}\hat{M}\hat{S}$, $\hat{L} = \hat{S}^{-1}\hat{N}\hat{S}$ và $\hat{T} = \hat{S}^{-1}(t)\hat{L}\hat{S}(t)$.

38. Toán tử Haminton của hạt mang điện tích e chuyển động trong điện từ trường có dạng :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi$$

trong đó $\vec{A}(x, y, z)$ là thế vectơ, $\varphi(x, y, z)$ là thế vô hướng của trường điện từ và m là khối lượng của hạt.

a) Tìm toán tử vận tốc $\hat{v}$ của hạt.

b) Thiết lập các hệ thức giao hoán giữa các toán tử thành phần của vận tốc $\hat{v}_x, \hat{v}_y, \hat{v}_z$.

c) Thiết lập phương trình chuyển động của hạt.

39. Xuất phát từ phương trình Heisenberg (Heisenberg), hãy xét xem đối với hạt tự do, các đại lượng như năng lượng, xung lượng, các hình chiếu của mômen xung lượng và bình phương mômen xung lượng có được bảo toàn không ?

40. Với những điều kiện nào thì $\overline{L_z}$ và $\overline{L^2}$ là những tích phân chuyển động.

41. Những đại lượng cơ học nào (năng lượng, các hình chiếu xung lượng, các hình chiếu mômen xung lượng và bình phương mômen xung lượng) sẽ được bảo toàn khi hạt chuyển động trong :

- a) Trường thế $U(z) = az$ ($a = \text{const}$).
- b) Trường biến thiên $U(z,t) = a(t)z$.
- c) Trường đối xứng xuyên tâm $U(r)$.

§3. PHƯƠNG TRÌNH SƠĐỘNG (Schrödinger)

42. Tìm nghiệm tổng quát của phương trình Schrödinger một chiều phụ thuộc vào thời gian đối với hạt tự do.

43. Chứng tỏ rằng hạt chuyển động tự do có phổ năng lượng liên tục.

44. Hạt chuyển động trong trường thế năng $U(\vec{r})$ không phụ thuộc rõ vào thời gian.

a) Tìm dạng hàm sóng ở trạng thái dừng.

b) Hàm sóng $\psi(\vec{r}, t) = \sum_k e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} \psi_k(\vec{r})$ là chồng chất các hàm

sóng ở các trạng thái dừng. Hàm này có thể là nghiệm của phương trình Schrödinger tổng quát và dừng được không ?

45. Tại thời điểm $t = 0$ hạt tự do có hàm sóng :

a) $\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \sin(kx)$.

b) $\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ikx}, k = \frac{\pi}{\hbar}$.

Tìm hàm sóng của hạt ở các thời điểm sau trong hai trường hợp trên.

46. Hàm sóng của hạt ở trong giếng thế vuông góc một chiều có bề rộng d , có thành cao vô hạn ở thời điểm ban đầu $t = 0$ có dạng $\psi(x, 0) = Ax(d - x)$ trong đó $A = (30d^{-5})^{1/2}$ là hệ số chuẩn hoá hàm sóng. Tìm hàm sóng của hạt ở thời điểm t bất kì.

47. Chứng minh rằng bài toán xác định chuyển động của dao động tử dưới tác dụng của lực cưỡng bức $f(t)$ có thể chuyển về bài toán chuyển động của dao động tử điều hoà tự do nếu thay biến số $x_1 = x - \xi(t)$ trong đó $\xi(t)$ thoả mãn phương trình cổ điển : $m\ddot{\xi} = f(t) - m\omega^2\xi$.

48. Chứng minh rằng :

a) Mật độ xác suất và mật độ dòng xác suất của hạt ở trạng thái dừng không phụ thuộc rõ vào thời gian.

b) Mật độ dòng xác suất của hạt tự do có khối lượng m ở trạng

thái $\psi(x, 0) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2} + ikx}$ bằng $\frac{\hbar k}{m} \rho(x)$, trong đó $\rho(x) = A^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}}$

và $A = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}$.

c) Mật độ dòng xác suất của hạt chuyển động tự do trong không gian ba chiều $\vec{j} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\vec{p}}{m}$, trong đó $\vec{p}$ là xung lượng của hạt và m là khối lượng của nó.

49. Trạng thái của rôta to phẳng ở thời điểm ban đầu $t = 0$ được mô tả bằng hàm sóng :

$$\psi(\varphi, 0) = A \sin^2 \varphi$$

a) Từ điều kiện chuẩn hoá của hàm sóng, xác định A .

b) Giải phương trình Schrödinger tìm năng lượng, nghiệm dừng và nghiệm tổng quát.

c) Tìm các giá trị có thể có của hình chiếu mômen xung lượng trên trục Oz và các xác suất của chúng.

d) Tính trị trung bình của hình chiếu mômen xung lượng trên trục Oz, trị trung bình của bình phương hình chiếu mômen xung lượng trên trục Oz ở trạng thái dừng tổng quát.

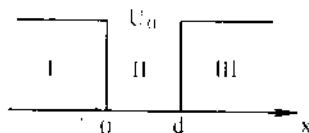
50. Hạt có khối lượng m chuyển động trong trường thế :

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{khi } 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b, 0 \leq z \leq c \\ \infty & \text{khi } x < 0, x > a, y < 0, y > b, \\ & z < 0, z > c \end{cases}$$

Tìm hàm sóng và năng lượng của hạt.

51. Hạt có khối lượng m chuyển động trong trường thế :

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & \text{khi } x < 0 \\ 0 & \text{khi } 0 \leq x \leq d \\ U_0 & \text{khi } x > d \end{cases}$$



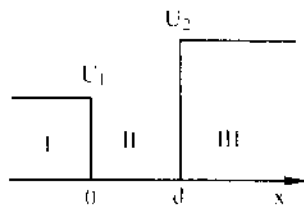
Hình 3.1

Tìm phương trình xác định phổ năng lượng E trong miền $E < U_0$.

Lập luận về tính gián đoạn của phổ năng lượng (h.3.1).

52. Hạt có khối lượng m chuyển động trong trường thế có dạng :

$$U(x) = \begin{cases} U_1 & \text{khi } x < 0 \\ 0 & \text{khi } 0 \leq x \leq d \\ U_2 & \text{khi } x > d \end{cases}$$



Hình 3.2

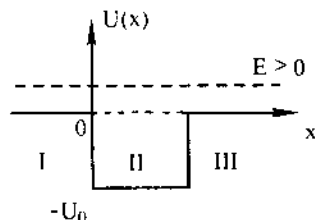
với $U_1 < U_2$. Tìm phương trình xác định năng lượng E của hạt trong vùng $E < U_1$ (h.3.2).

53. Hạt có khối lượng m , có năng lượng $E > 0$ chuyển động từ trái sang phải trong trường thế có dạng :

$$U(x) = \begin{cases} -U_0 & \text{khi } 0 \leq x \leq d \\ 0 & \text{khi } x < 0 \text{ và } x > d \end{cases}$$

a) Xác định hàm sóng của hạt (h.3.3).

b) Tìm hệ số phản xạ R và hệ số truyền qua D của hạt.



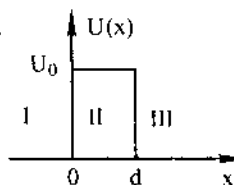
Hình 3.3

54. Hạt có khối lượng m chuyển động qua hàng rào thế chữ nhật có dạng :

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & \text{khi } 0 \leq x \leq d \\ 0 & \text{khi } x < 0 \text{ và } x > d \end{cases}$$

Xác định hệ số phản xạ R và hệ số truyền qua D khi năng lượng E của hạt lớn hơn U_0 và bé hơn U_0 (h.3.4).

55. Chứng tỏ rằng trong trường hợp tổng quát đối với hàng rào thế có dạng bất kì luôn luôn thoả mãn hệ thức $R + D = 1$ (R là hệ số phản xạ và D là hệ số truyền qua).



Hình 3.4

56. Tìm hàm sóng đã chuẩn hoá và năng lượng của dao động tử điều hoà một chiều. Tính các trị trung bình $\bar{x}$ và $\overline{x^2}$.

57. Thế năng của dao động tử điều hoà ba chiều có dạng :

$$U(x, y, z) = \frac{1}{2} m \omega_1^2 x^2 + \frac{1}{2} m \omega_2^2 y^2 + \frac{1}{2} m \omega_3^2 z^2$$

trong đó m, ω_1 , ω_2 , ω_3 là những hằng số.

a) Tìm hàm sóng và các mức năng lượng của dao động tử điều hoà ba chiều.

b) Tìm bội suy biến của các mức năng lượng khi $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega$.

58. Xác định các mức năng lượng và hàm sóng của electron chuyển động trong từ trường đều có cảm ứng từ $\vec{B}$ hướng dọc theo trục Oz.

59. Tìm mức năng lượng và hàm sóng của dao động tử lượng tử một chiều dưới tác dụng của điện trường không đổi $\vec{E}$ đặt dọc theo phương dao động Ox. Cho biết khối lượng của hạt là m và điện tích của nó là e.

60. Hai hạt có khối lượng m_1 và m_2 với $m_1 = m_2 = m$ chuyển động dọc theo trục Ox và liên hệ với nhau bởi lực đàn hồi có hệ số đàn hồi β . Ngoài ra mỗi hạt liên hệ với gốc toạ độ (điểm $x = 0$) bằng lực đàn hồi với hệ số đàn hồi α . Xác định các mức năng lượng và hàm sóng của hệ hai hạt.

61. Tìm mức năng lượng và hàm sóng của rôtao lượng tử đối xứng với toán tử Haminton có dạng :

$$\hat{H} = \frac{1}{2I_1}(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2) + \frac{1}{2I_3}\hat{L}_z^2$$

trong $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ là những toán tử hình chiếu mômen xung lượng I_1, I_2, I_3 ($I_1 = I_2$) là mômen quán tính của con quay đối với trục Ox, Oy, Oz đi qua khối tâm.

62. Tìm các mức năng lượng và các hàm sóng của hạt ở trong trường thế Culông (Coulomb) một chiều có dạng :

$$U(x) = -\frac{c^2}{|x|}$$

63. Tìm các mức năng lượng và các hàm sóng của hạt ở trong trường thế $U(x) = U_0(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x})$ trong đó U_0 và α là những hằng số (thế Mo (More)).

64. Tìm các mức năng lượng và các hàm sóng của hạt ở trong trường thế $U(x) = -\frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)}$ trong đó U_0 và α là những hằng số.

65. Tìm các hàm sóng và các mức năng lượng tương ứng của hạt trong trường thế có dạng :

$$U(x) = U_0 \left(\frac{A}{x} - \frac{x}{A} \right)^2 \text{ với } x > 0, A = \text{const.}$$

66. Xác định các mức năng lượng và các hàm sóng tương ứng của hạt trong trường thế $U(x) = U_0 \cot^2\left(\frac{\pi x}{d}\right)$, ($0 < x < d$). Tìm hàm sóng ở trạng thái cơ bản (không tính đến chuẩn hoá).

67. Trạng thái của hạt ở trong trường xuyên tâm $U(r)$ được biểu diễn bằng hàm sóng trong tọa độ cầu :

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

a) Tìm phương trình vi phân xác định hàm bán kính $R(r)$.

b) Tìm mức năng lượng và hàm bán kính $R(r)$ chưa chuẩn hoá

khi trường thế $U(r)$ có dạng $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$.

68. Electron chuyển động trong trường Coulomb của hạt nhân với thế năng $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$.

Xác định thừa số chuẩn hoá của hàm sóng bán kính $R_{nl}(r)$.

69. Electron trong nguyên tử hydro ở trạng thái dừng được mô tả bởi hàm sóng đối xứng cầu $\psi(r) = A(1 + \alpha r)e^{-\alpha r}$ (A, α là những hằng số). Từ phương trình Schrödinger xác định các hằng số α, A và tìm năng lượng của electron. Xác định các số lượng tử tương ứng của trạng thái electron.

70. Tìm các hàm sóng của các trạng thái dừng và các mức năng lượng của hạt trong giếng thế năng đối xứng cầu có dạng $U(r) = 0$ khi $r \leq a$ và $U(r) = \infty$ khi $r > a$.

71. Tìm các hàm sóng và các mức năng lượng tương ứng ở các trạng thái dừng với mômen bằng không của hạt trong giếng thế năng có dạng $U(r) = -U_0 e^{-\frac{r}{a}}$, trong đó U_0 và a là những hằng số.

72. Tìm các hàm sóng và các mức năng lượng của hạt ở trong trường thế năng $U(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r}$ trong đó A, B là những hằng số.

73. Tìm các hàm sóng và các mức năng lượng của hạt ở trong trường thế năng $U(r) = \frac{A}{r^2} + Br^2$ (A, B là những hằng số).

74. Tìm các hàm sóng và các mức năng lượng của dao động tử điều hoà ba chiều đồng nhất.

75. Xác định các mức năng lượng của hạt ở trạng thái s ($l = 0$) trong giếng thế đối xứng xuyên tâm :

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & \text{khi } r \leq a \\ 0 & \text{khi } r > a \end{cases}$$

76. Giải bài toán Kêple (Kepler) trong trường hợp hai chiều, nghĩa là tìm các mức năng lượng và hàm sóng của hạt nằm trong

trường thế $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ trong đó

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}.$$

§4. LÝ THUYẾT BIỂU DIỄN

77. Chứng minh rằng :

a) Nếu $\hat{F}$ là toán tử ecmit thì ma trận với phần tử F_{nm} là ma trận ecmit.

b) Nếu S đồng thời là ma trận unita và ma trận ecmit thì $S^2 = Z$ trong đó Z là ma trận đơn vị.

c) Nếu A, B là các ma trận hạng hai thì AB và BA có cùng trị riêng.

78. Xác định các phần tử ma trận sau :

$$a) x_{nm} = \int_0^d \psi_n^*(x) \hat{x} \psi_m(x) dx$$

$$b) (p_x)_{nm} = \int_0^d \psi_n^*(x) \hat{p}_x \psi_m(x) dx$$

$$c) (L_z)_{mm'} = \int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi) \widehat{L}_z \psi_{m'}(\varphi) d\varphi$$

trong đó $\widehat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$, $\widehat{L}_z = -i\hbar \frac{d}{d\varphi}$, $\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$ là hàm

riêng của $\widehat{L}_z$ và $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin \frac{n\pi x}{d}$ ($n = 1, 2, \dots$) là hàm sóng của

hạt trong giếng thế một chiều có bề rộng d có thành cao vô hạn.

79. Dùng hệ thức giao hoán của x và p_x tìm giá trị riêng của toán tử Haminton của dao động tử điều hoà một chiều và xác định các phần tử ma trận của toạ độ $\hat{x}$ và xung lượng $\widehat{p}_x$ trong biểu diễn năng lượng.

80. Gọi $\hat{j}_x$, $\hat{j}_y$, $\hat{j}_z$ là các toán tử thành phần của toán tử $\hat{j}$ thoả mãn các hệ thức giao hoán sau :

$$\hat{j}_x \hat{j}_y - \hat{j}_y \hat{j}_x = i\hbar \hat{j}_z$$

$$\hat{j}_y \hat{j}_z - \hat{j}_z \hat{j}_y = i\hbar \hat{j}_x$$

$$\hat{j}_z \hat{j}_x - \hat{j}_x \hat{j}_z = i\hbar \hat{j}_y$$

($\hat{j}_x$, $\hat{j}_y$, $\hat{j}_z$ là những toán tử ecmit).

1) Chứng minh rằng

$$a) [\hat{j}^2, \hat{j}_x] = [\hat{j}^2, \hat{j}_y] = [\hat{j}^2, \hat{j}_z] = 0$$

$$b) [\hat{j}_+, \hat{j}_z] = -\hbar \hat{j}_+; [\hat{j}_-, \hat{j}_z] = \hbar \hat{j}_-; [\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2\hbar \hat{j}_z$$

$$c) \hat{j}^2 = \hat{j}_+ \hat{j}_- + \hat{j}_z^2 - \hbar \hat{j}_z, \hat{j}^2 = \hat{j}_- \hat{j}_+ + \hat{j}_z^2 + \hbar \hat{j}_z$$

trong đó $\hat{j}_+ = \hat{j}_x + i\hat{j}_y$, $\hat{j}_- = \hat{j}_x - i\hat{j}_y$

2) Tìm trị riêng của $\hat{j}^2$ và $\hat{j}_z$

3) Tìm các phần tử ma trận của $\hat{j}_+$, $\hat{j}_-$, $\hat{j}_x$ và $\hat{j}_y$ trong $\hat{j}^2$ và $\hat{j}_z$ - biểu diễn.

81. Tìm toán tử toạ độ và toán tử xung lượng trong biểu diễn xung lượng.

82. Viết toán tử Haminton của dao động tử điều hoà một chiều trong biểu diễn xung lượng. Tìm hàm riêng và trị riêng của nó trong biểu diễn xung lượng.

83. Tìm hàm sóng của hạt trong xung lượng biểu diễn trong các trường hợp sau :

1) Đối với hạt ở các trạng thái trong tọa độ biểu diễn có dạng:

$$a) \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x}.$$

$$b) \psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{d}} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x} & \text{khi } -\frac{d}{2} \leq x \leq \frac{d}{2} \\ 0 & \text{khi } |x| > \frac{d}{2} \end{cases}$$

$$c) \psi(x) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2} + \frac{i}{\hbar} p_0 x} \quad \text{với } A = \left(\frac{1}{\pi a^2} \right)^{1/4}.$$

2) Đối với dao động tử điều hoà ở trạng thái cơ bản

$$\psi(x) = \left(\alpha \sqrt{\frac{2}{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2} \quad \text{với } \alpha = \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{1/2}.$$

84. Tìm hàm sóng của hệ trong L_z – biểu diễn (L_z là hình chiếu mômen xung lượng trên trục Oz) khi trạng thái của hệ được mô tả bằng hàm sóng.

$$\psi(\varphi) = A(1 + \cos\varphi)^2.$$

85. Tìm hàm sóng của hạt trong biểu diễn năng lượng khi hạt ở trong giếng thế một chiều có thành cao vô hạn có bề rộng d và ở trong trạng thái :

$$\psi(x) = \begin{cases} x^2 - 4d^2 & \text{khi } 0 \leq x \leq d \\ 0 & \text{khi } x > d \text{ và } x < 0. \end{cases}$$

§5. SPIN VÀ HỆ HẠT ĐỒNG NHẤT

86. Mômen riêng hay spin là đại lượng vật lí đặc trưng cho hạt được biểu diễn bằng toán tử $\hat{S}$ với các toán tử hình chiếu $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$, $\hat{S}_z$ thoả mãn các hệ thức giao hoán :

$$\hat{S}_x \hat{S}_y - \hat{S}_y \hat{S}_x = i\hbar \hat{S}_z$$

$$\hat{S}_y \hat{S}_z - \hat{S}_z \hat{S}_y = i\hbar \hat{S}_x$$

$$\hat{S}_z \hat{S}_x - \hat{S}_x \hat{S}_z = i\hbar \hat{S}_y$$

a) Chứng minh rằng có thể đo được đồng thời bình phương spin và hình chiếu spin trên cùng một trục.

b) Tìm trị riêng của $\hat{S}^2$ và $\hat{S}_z$.

87. Êlectron có spin $s = \frac{1}{2}$.

a) Viết các toán tử hình chiếu spin của êlectron trong S_z - biểu diễn, S_x - biểu diễn và S_y - biểu diễn.

b) Đặt $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x$, $\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_y$, $\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z$. Tìm hàm riêng và trị riêng của các ma trận $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$.

c) Các bình phương hình chiếu spin của êlectron trên các trục x , y , z có giá trị đồng thời xác định không ?

d) Tính bình phương của hình chiếu spin của êlectron trên một phương bất kì.

88. Tìm giá trị riêng của tích vô hướng $\widehat{S}_1\widehat{S}_2$ của hai electron khi spin của chúng song song và đối song song.

89. Gọi $\widehat{L}$ là toán tử mômen xung lượng, $\widehat{S}$ là toán tử spin của hạt. Toán tử mômen toàn phần $\widehat{j} = \widehat{L} + \widehat{S}$ với các toán tử thành phần $\widehat{j}_x = \widehat{L}_x + \widehat{S}_x$, $\widehat{j}_y = \widehat{L}_y + \widehat{S}_y$, $\widehat{j}_z = \widehat{L}_z + \widehat{S}_z$.

a) Chứng tỏ rằng ta có các hệ thức giao hoán sau :

$$\widehat{j}_x\widehat{j}_y - \widehat{j}_y\widehat{j}_x = i\hbar\widehat{j}_z$$

$$\widehat{j}_y\widehat{j}_z - \widehat{j}_z\widehat{j}_y = i\hbar\widehat{j}_x$$

$$\widehat{j}_z\widehat{j}_x - \widehat{j}_x\widehat{j}_z = i\hbar\widehat{j}_y$$

b) Tìm trị riêng của các toán tử $\widehat{j}^2$, $\widehat{j}_z$, và $\widehat{j}\widehat{S}$.

90. Hạt có spin bằng bao nhiêu nếu các toán tử hình chiếu spin của nó có dạng :

$$\widehat{S}_x = \hbar\beta_1, \widehat{S}_y = \hbar\beta_2, \widehat{S}_z = \hbar\beta_3$$

trong đó :

$$\beta_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\beta + \beta^*), \beta_2 = \frac{i}{\sqrt{2}}(\beta - \beta^*), \beta_3 = \beta^+\beta - \beta\beta^+$$

với

$$\beta = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

91. Dạng tổng quát của hàm spin của hạt có spin $\frac{1}{2}$ trong S_z - biểu diễn là :

$$\psi_1 = e^{i\alpha} \cos\delta, \psi_2 = e^{i\beta} \sin\delta$$

trong đó α , β và δ là những số thực. Hàm sóng đó mô tả trạng thái của hạt trong đó xác suất của giá trị spin $\frac{1}{2}$ trên trục z (hay $-\frac{1}{2}$) bằng $\cos^2\delta$ (hay $\sin^2\delta$). Tính xác suất hình chiếu của spin trên một trục bất kì.

92. Hạt có spin $\frac{1}{2}$ chuyển động trong trường xuyên tâm. Tìm hàm sóng mà nó đồng thời là hàm riêng của các toán tử

$$\widehat{J}_z = \widehat{L}_z + \widehat{S}_z, \widehat{L}^2, \widehat{J}^2.$$

93. Tìm số cực đại của các electron trong nguyên tử có cùng những số lượng tử sau đây,

a) n, l, m ;

b) n, l ;

c) n .

94. Viết hàm sóng hệ hai hạt electron tương tác yếu với nhau có thể bỏ qua.

§6. CÁC PHƯƠNG PHÁP TÍNH GẦN ĐÚNG

95. Thế năng của dao động tử phi điều hoà một chiều có dạng :

$$U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \varepsilon_1 \left(\frac{x}{x_0} \right)^3 + \varepsilon_2 \left(\frac{x}{x_0} \right)^4$$

trong đó $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, m , ω , ε_1 , ε_2 là những hằng số. Trong gần

đúng bậc nhất của lý thuyết nhiễu loạn, xác định các mức năng lượng của dao động tứ phi điều hoà.

96. Tính đến phép gần đúng bậc nhất của lý thuyết nhiễu loạn độ dịch chuyển mức năng lượng ở trạng thái cơ bản của nguyên tử hoặc ion tương tự hydro do hạt nhân không phải là một điểm. Coi hạt nhân như hình cầu có bán kính R có điện tích Ze phân bố đều theo tất cả thể tích.

97. Rôtao quay trong mặt phẳng xOy (quay xung quanh trục Oz) có mômen quán tính I và mômen lưỡng cực $\vec{D}$. Nghiên cứu ảnh hưởng của điện trường đều cường độ E hướng dọc theo trục x lên mức năng lượng của rôtao.

98. Toán tử mô tả tương tác mômen từ quỹ đạo $\widehat{M}_L = \frac{e}{2\mu c} \widehat{L}$

và mômen từ spin $\widehat{M}_s = \frac{e}{\mu c} \widehat{S}$ của electron trong nguyên tử với từ trường ngoài không đổi $\vec{B}$ ($\vec{B}$ hướng dọc theo Oz) có dạng

$$\widehat{U} = -\vec{B}(\widehat{M}_L + \widehat{M}_s)$$

Tìm hiệu chỉnh bậc nhất mức năng lượng của electron do ảnh hưởng của từ trường trong các trường hợp sau :

a) Khi từ trường đủ mạnh bỏ qua được tương tác giữa $\widehat{M}_L$ và $\widehat{M}_s$ (bỏ qua liên kết $\widehat{L} - \widehat{S}$).

b) Khi từ trường yếu có tính đến tương tác giữa $\widehat{M}_L$ và $\widehat{M}_s$ (tính đến liên kết $\widehat{L} - \widehat{S}$).

99. Theo lý thuyết nhiễu loạn hãy tính đến phép gần đúng bậc nhất năng lượng của nguyên tử hoặc ion có hai electron và có điện tích hạt nhân Ze . Coi tương tác giữa hai electron với nhau là nhiễu loạn.

100. Gọi E_0 là năng lượng trạng thái cơ bản của hệ lượng tử, $\hat{H}$ là toán tử Haminton của hệ. Chứng minh rằng

$$E_0 \leq \int \psi^*(\xi) \hat{H}(\xi) \psi(\xi) d\xi$$

trong đó $\psi(\xi)$ là hàm tùy ý thoả mãn điều kiện chuẩn hoá

$$\int \psi^*(\xi) \psi(\xi) d\xi = 1.$$

101. Dùng phương pháp biến phân tìm năng lượng ở trạng thái cơ bản của hạt trong các trường hợp sau :

a) Thế năng $U(x) = U_0 x^4$ ($U_0 = \text{const}$). Chọn hàm thử

$$\psi(x) = A e^{-\frac{x^2}{2\beta^2}}$$

b) Thế năng $U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$. Chọn hàm thử

$$\psi(x) = A e^{-\frac{x^2}{2\beta^2}}.$$

102. Tính năng lượng và hàm sóng ở trạng thái cơ bản của nguyên tử hiđrô. Chọn hàm thử $\psi(x) = A e^{-\beta r}$.

103. Hàm sóng của hạt ở trong trường thế một chiều $U(x)$ được biểu diễn dưới dạng :

$$\psi(x, t) = A(x, t) e^{\frac{i}{\hbar} S(x, t)}$$

trong đó $S(x, t)$ là hàm tác dụng của hạt và A, S là những hàm không phụ thuộc vào $\hbar$.

Chúng tỏ rằng phương trình Srôđingơ của hạt được viết dưới dạng :

$$A \left\{ \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2}{2m} + U(x) \right\} - i\hbar \left\{ \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{A \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial x}}{2m} \right\} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} = 0.$$

b) Chứng tỏ rằng trong gần đúng bậc không đối với $\hbar$ thì phương trình Schrödinger của hạt chuyển về phương trình Hamilton – Jacobi trong cơ học cổ điển.

c) Trong gần đúng bậc nhất đối với $\hbar$ của phương trình Schrödinger tìm hàm sóng của hạt ở trong trường thế $U = U(x)$ khi $x_1 \leq x \leq x_2$ và $U = \infty$ khi $x \geq x_2$ và $x \leq x_1$. Gần đúng coi $\psi(x_1) = \psi(x_2) = 0$ tìm điều kiện lượng tử hoá của hạt.

d) Tìm điều kiện áp dụng gần đúng giả cổ điển.

§7. LÝ THUYẾT TÁN XẠ

104. Cho hàm sóng $\phi(r) = \frac{e^{ikr}}{r}$ và biểu diễn hàm này dưới dạng :

$$\phi(r) = \frac{e^{ikr}}{r} = \int_{-\infty}^{\infty} C(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{r}} d\vec{q}$$

trong đó k là hằng số và $d\vec{q} = dq_x dq_y dq_z$. Xác định hệ số phân tích $C(\vec{q})$.

105. Hàm sóng của hạt có khối lượng m tán xạ trong trường xuyên tâm $U(r)$ được biểu diễn dưới dạng :

$$\psi(\vec{r}) = \psi^0(\vec{r}) + \phi(\vec{r})$$

Các hàm $\psi^n(\vec{r})$ thoả mãn các phương trình

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_k^0(\vec{r}) = 0$$

$$(\nabla^2 + k^2) \varphi(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} U(r) \psi(\vec{r})$$

trong đó $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ là năng lượng của hạt. Chứng tỏ rằng hàm $\varphi(\vec{r})$ được biểu diễn dưới dạng

$$\varphi(\vec{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\vec{r}'-\vec{r}|}}{|\vec{r}'-\vec{r}|} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\vec{r}'.$$

106. Chứng minh rằng khi $r \rightarrow \infty$ thì hàm sóng phẳng e^{ikz} có thể được viết dưới dạng :

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} \approx \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} e^{\frac{i\pi l}{2}} (2l+1) P_l(\cos \theta) \times \sin(kr - \frac{\pi l}{2}).$$

107. Chứng tỏ rằng biên độ tán xạ $f(\theta)$ có thể được viết dưới dạng :

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta) \text{ trong đó } \delta_l \text{ là độ dịch}$$

chuyển pha.

108. Cho biên độ tán xạ riêng phần

$$f_l(\theta) = \frac{2l+1}{2ik} \{ e^{2i\delta_l} - 1 \} P_l(\cos \theta)$$

a) Chứng tỏ rằng tiết diện tán xạ toàn phần σ được viết dưới dạng :

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l.$$

b) Khi $\theta = 0$, chứng minh rằng ta có định lý quang học sau :

$$\sigma_f = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f_1(0).$$

109. Xét sự tán xạ đàn tính của hệ hai hạt có khối lượng m_1 và m_2 . Trong hệ phòng thí nghiệm hạt có khối lượng m_2 đứng yên. Gọi θ_0 và θ là góc tán xạ của hạt thứ nhất có khối lượng m_1 trong hệ quy chiếu phòng thí nghiệm và hệ khối tâm tương ứng.

a) Chứng tỏ rằng ta có :

$$\text{tg} \theta_0 = \frac{\sin \theta}{\gamma + \cos \theta}, \quad \gamma = \frac{m_1}{m_2}$$

b) Tìm mối liên hệ giữa tiết diện hiệu dụng vi phân của tán xạ đàn tính trong hệ quy chiếu phòng thí nghiệm và hệ quy chiếu khối tâm.

110. Trong gần đúng Boocơ (Born) tính tiết diện tán xạ của hạt với thế năng có dạng sau :

a) $U(r) = U_0 \delta(r).$

b) $U(r) = \begin{cases} -U_0 & \text{ khi } 0 \leq r \leq R \\ 0 & \text{ khi } r > R. \end{cases}$

c) $U(r) = -U_0 e^{-\frac{r}{r_0}}$

d) $U(r) = \frac{A}{r} e^{-\lambda r}$

e) $U(r) = U_0 e^{-\frac{r^2}{a^2}}$

trong đó U_0 , r_0 , A , λ , a và R là những hằng số.

111. Trong gần đúng Boocơ tính tiết diện tán xạ đàn tính vì phân của hạt có điện tích e_1 tán xạ lên điện tích hạt nhân Ze và có mật độ đám mây điện tích âm bao quanh hạt nhân là $-e\rho(\vec{r})$. Tính

$$d\sigma = |f(0, \varphi)|^2 d\Omega \text{ khi } \rho = \rho_0 e^{-\frac{r}{a}}.$$

B – LỜI GIẢI

1. Năng lượng, khối lượng và xung lượng của photon được xác định bằng các công thức sau :

$$\varepsilon = h\nu = \frac{hc}{\lambda}, \quad m = \frac{\varepsilon}{c^2} = \frac{h}{\lambda c}, \quad p = \frac{h}{\lambda}$$

$$0 \leq r \leq R \quad h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}, \quad c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

$$1 \mu\text{m} = 10^{-6} \text{ m}, \quad 1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}.$$

$$\text{a) } \lambda = 0,7 \mu\text{m} = 7 \cdot 10^{-7} \text{ m}$$

$$\varepsilon = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{7 \cdot 10^{-7} \text{ m}} = 2,839 \cdot 10^{-19} \text{ J}.$$

$$m = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}}{7 \cdot 10^{-7} \text{ m} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}} = 3,16 \cdot 10^{-36} \text{ kg}.$$

$$p = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}}{7 \cdot 10^{-7} \text{ m}} = 9,466 \cdot 10^{-28} \text{ kg} \frac{\text{m}}{\text{s}}.$$

$$\text{b) } \lambda = 0,25 \text{ \AA} = 2,5 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

$$\varepsilon = 7,95 \cdot 10^{-15} \text{ J}; \quad m = 8,84 \cdot 10^{-32} \text{ kg};$$

$$p = 2,65.10^{-23} \text{ kg } \frac{\text{m}}{\text{s}}.$$

$$c) \lambda = 0,016 \text{ Å} = 1,6.10^{-12} \text{ m}$$

$$\varepsilon = 1,24.10^{-13} \text{ J}; m = 1,38.10^{-30} \text{ kg}, p = 4,14.10^{-22} \text{ kg } \frac{\text{m}}{\text{s}}.$$

2. Vận tốc cực đại v của electron bay ra từ mặt kim loại kali được xác định từ phương trình :

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = A + \frac{m_0 v^2}{2}$$

hay

$$v = \sqrt{\frac{2 \left(\frac{hc}{\lambda} - A \right)}{m_0}}$$

trong đó A là công thoát và m_0 là khối lượng tĩnh của electron.

Đặt $h = 6,62.10^{-34} \text{ Js}$, $c = 3.10^8 \text{ m/s}$, $\lambda = 4,2.10^{-7} \text{ m}$.

$A = 3,2.10^{-19} \text{ J}$, $m_0 = 9.10^{-31} \text{ kg}$, vào biểu thức của v ta tìm được $v \approx 5,75.10^5 \text{ m/s}$.

3. Theo thuyết tương đối, năng lượng toàn phần E của hạt biểu diễn qua năng lượng tĩnh $m_0 c^2$ và xung lượng p của nó bằng công thức :

$$E^2 = m_0^2 c^4 + p^2 c^2$$

Gọi T là động năng của hạt, ta có :

$$E = m_0 c^2 + T$$

Từ các hệ thức trên, ta suy ra :

$$p = \frac{T}{c} \sqrt{1 + \frac{2m_0 c^2}{T}}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{T \sqrt{1 + \frac{2m_0 c^2}{T}}}$$

Trong biểu thức của λ nếu chia cả tử số và mẫu số cho $\sqrt{\frac{2m_0 c^2}{T}}$ ta tìm được công thức tính bước sóng Đơ Broi cho hạt tương đối tính :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 T}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{T}{2m_0 c^2}}}$$

Khi $T \ll m_0 c^2$ thì ta được công thức tính bước sóng Đơ Broi cho hạt trong trường hợp phi tương đối tính

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 T}}$$

Đối với electron có điện tích e và được tăng tốc bởi hiệu điện thế U thì ta có $T = eU$.

4. Gọi e là trị của điện tích, m_0 là khối lượng tĩnh và $E_0 = m_0 c^2$ là năng lượng tĩnh của electron, ta có :

$$e = 1,6.10^{-19} \text{C}, m_0 = 9,1.10^{-31} \text{kg}$$

$$1\text{eV} = 1,6.10^{-19} \text{C} \cdot 1\text{V} = 1,6.10^{-19} \text{J}.$$

$$1\text{MeV} = 10^6 \text{eV} = 1,6.10^{-13} \text{J}$$

$$E_0 = m_0 c^2 = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg } (3 \cdot 10^8 \text{ m/s})^2 = 8,19 \cdot 10^{-14} \text{ kg } \frac{\text{m}^2}{\text{s}^2}$$

$$= 8,19 \cdot 10^{-14} \text{ J} = 0,51 \text{ MeV}$$

a) Bởi vì $T = eU = 1000 \text{ eV}$ rất bé so với $E_0 = 0,51 \text{ MeV}$ nên bước sóng Đơ Broi của electron trong câu a được xác định bằng công thức :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 eU}}$$

trong đó $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js} = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ kg } \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$. Khi $U = 1 \text{ V}$ thì

$\lambda = 12,25 \cdot 10^{-10} \text{ m}$; khi $U = 100 \text{ V}$ thì $\lambda = 1,225 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ và khi $U = 1000 \text{ V}$ thì $\lambda = 0,387 \cdot 10^{-10} \text{ m}$.

b) Vận tốc của electron $v = 10^8 \text{ cm/s} = 10^6 \text{ m/s}$ rất bé so với vận tốc của ánh sáng $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$. Trong trường hợp này động năng T của electron rất bé so với năng lượng tĩnh $E_0 = m_0 c^2$ của nó và bước sóng Đơ Broi của electron được xác định bằng công thức :

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{h}{\sqrt{2m_0 T}} = \frac{h}{\sqrt{2m_0 \frac{m_0 v^2}{2}}} = \frac{h}{m_0 v} \\ &= \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \text{ kg}(\text{m}^2/\text{s}^2).\text{s}}{9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot 10^6 \text{ m/s}} = 7,27 \cdot 10^{-10} \text{ m}. \end{aligned}$$

c) Trong trường hợp $T = 1 \text{ MeV}$ ta phải dùng công thức tính bước sóng Đơ Broi của electron tương đối tính :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0T}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{T}{2m_0c^2}}}$$

Đặt $T = 1\text{MeV} = 1,6 \cdot 10^{-13}\text{J}$, $m_0c^2 = 8,19 \cdot 10^{-14}\text{J} = 0,51\text{MeV}$
vào biểu thức của λ ta tìm được : $\lambda = 8,7 \cdot 10^{-13}\text{m}$.

d) Vận tốc của quả cầu $v = 1\text{m/s}$ rất bé so với vận tốc của ánh sáng trong chân không $c = 3 \cdot 10^8\text{ m/s}$. Vì vậy bước sóng Đơ Broi của quả cầu được xác định bằng công thức :

$$\lambda = \frac{h}{m_0v} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}\text{Js}}{10^{-3}\text{kg} \cdot 1\text{m/s}} = 6,626 \cdot 10^{-31}\text{m}$$

So sánh với bước sóng Đơ Broi của electron ta thấy bước sóng của quả cầu là vô cùng bé đến mức không cần chú ý khi nghiên cứu chuyển động của nó. Trong thực tế chỉ đối với hạt vi mô mới thể hiện lưỡng tính sóng – hạt mà thôi.

5. Trong nguyên tử hiđrô, electron chuyển động tròn. Trong tọa độ cực r, φ hàm Lagrănggiơ có dạng :

$$L = T - U = \frac{mv^2}{2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{m\dot{\varphi}^2 r^2}{2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Các phương trình Lagrănggiơ mô tả chuyển động electron sẽ là :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} - \frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0 ; \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} - \frac{\partial L}{\partial r} = 0$$

$$\text{hay} \quad \frac{d}{dt} p_{\varphi} = 0, \quad -m\dot{\varphi}^2 r + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = 0$$

trong đó $p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = m\dot{\phi}r^2 = \text{const}$

điều kiện lượng tử hoá Bo :

$$\oint p_\phi d\phi = p_\phi \oint d\phi = 2\pi p_\phi = 2\pi m \dot{\phi} r^2 = nh$$

Từ đây suy ra :

$$\dot{\phi} = \frac{n\hbar}{mr^2}, r = r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{me^2}, \left(\hbar = \frac{h}{2\pi} \right).$$

$$v = \dot{\phi}r, v_n = \frac{n\hbar}{mr_n}, n = 1, 2, 3$$

a) Xác định r_n và v_n khi $n = 1, 2$. Đặt $\hbar = 1,054.10^{-34}\text{Js}$, $m = m_e = 9,11.10^{-31}\text{kg}$, $\epsilon_0 = 8,85.10^{-12}$ đơn vị SI, $e = 1,602.10^{-19}\text{C}$ vào các biểu thức của r_n và v_n ta tìm được $r_1 = \frac{4\pi\epsilon_0}{me^2} \hbar^2 = 0,528.10^{-10}\text{m}$, $v_1 = 2,19.10^6\text{m/s}$, $r_2 = 4r_1 = 2,212.10^{-10}\text{m}$, $v_2 = 1,09.10^6\text{m/s}$.

b) Năng lượng toàn phần E của electron trong nguyên tử hiđrô được tính bằng công thức :

$$E = T + U = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

thay $v = v_n$ và $r = r_n$ ta tìm được :

$$E_n = \frac{mv_n^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2 n^2}, n = 1, 2, 3...$$

Năng lượng của electron trên quỹ đạo Bo thứ nhất ($n = 1$) bằng :

$$E_1 = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} = -21,9.10^{-19}\text{J} = -13,68\text{eV}.$$

c) Bước sóng λ_{mn} của vạch quang phổ khi electron chuyển từ mức E_m về mức E_n được xác định bằng công thức :

$$h\nu_{mn} = h \frac{c}{\lambda_{mn}} = E_m - E_n = E_1 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Khi $m = 4, n = 2$ ta tìm được $\lambda = \lambda_{42} = \frac{32\pi\hbar c}{3E_1} = 4,8.10^{-7} \text{ m.}$

6. Hàm Lagrănggiơ của dao động tử điều hoà một chiều có dạng:

$$L = T - U = \frac{m\dot{x}^2}{2} - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Phương trình chuyển động của dao động tử điều hoà một chiều sẽ là :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \text{ hay } \ddot{x} + \omega^2 x = 0.$$

Nghiệm của phương trình vi phân này được tìm dưới dạng :

$$x = A \cos(\omega t + \alpha)$$

trong đó A và α là những hằng số.

Năng lượng của dao động tử điều hoà một chiều được xác định bằng công thức :

$$E = T + U = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2.$$

Để tìm E ta cần xác định A . Đặt $\varphi = \omega t + \alpha$ ta có :

$$p = m \dot{x} = -mA\omega \sin\varphi, \quad dx = -A \sin\varphi d\varphi,$$

$$\oint p dx = mA^2 \omega \int_0^{2\pi} \sin^2 \varphi d\varphi = mA^2 \omega \int_0^{2\pi} \frac{(1 - \cos 2\varphi)}{2} d\varphi$$

$$= m\omega A^2 \pi = nh = 2\pi n\hbar$$

Từ đây suy ra :

$$A^2 = \frac{2n\hbar}{m\omega} \text{ và } E_n = \frac{m\omega^2 A^2}{2} = n\hbar\omega, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

7. Từ điều kiện

$$\int_0^d |\psi_n(x)|^2 dx = A^2 \int_0^d \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{d} \right) dx = \frac{1}{2} A^2 \int_0^d \left[1 - \cos \left(\frac{2n\pi x}{d} \right) \right] dx =$$

$$= \frac{1}{2} A^2 d = 1 \text{ ta tìm được } A = \sqrt{\frac{2}{d}}$$

8. a) Từ điều kiện

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx = A^2 \sqrt{\pi a^2} = 1 \text{ ta tìm được}$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}$$

b) Miền định xứ của hạt là miền mà mật độ xác suất $\rho(x)$ của hạt có giá trị cực đại.

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = A^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}}$$

Giá trị x để $\rho(x)$ có cực đại được tìm từ phương trình :

$$\frac{dp}{dx} = -\frac{2x}{a^2} A^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}} = 0 \rightarrow x = 0$$

Để thấy rằng $\left(\frac{d^2\rho}{dx^2}\right)_{x=0} = -\frac{2A^2}{a^2} < 0$. Vậy $\rho(x)$ có cực đại tại

$x = 0$ và giảm rất nhanh khi $|x| > a$.

c) Xác suất để hạt nằm trong khoảng từ $-a$ đến $+a$ trên trục x được xác định từ công thức :

$$W = \int_{-a}^a |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_{-a}^a e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx$$

Đặt $x = a\xi$ ta có :

$$W = a A^2 \int_{-1}^1 e^{-\xi^2} d\xi = 2a A^2 \int_0^1 e^{-\xi^2} d\xi = 2a A^2 \cdot 0,84 \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$W = 0,84$$

9. a) Điều kiện chuẩn hoá của hàm sóng :

$$\begin{aligned} \int |\psi(r)|^2 dV &= \int_0^\infty |\psi(r)|^2 r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\ &= 4\pi A^2 \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}} r^2 dr = 1 \end{aligned}$$

Đặt $\alpha = \frac{2}{a}$ và chú ý rằng :

$$I(\alpha) = \int_0^\infty e^{-\alpha r} dr = \frac{1}{\alpha}$$

$$\frac{dI}{d\alpha} = - \int_0^{\infty} e^{-\alpha r} r dr = - \frac{1}{\alpha^2}$$

$$\frac{d^2 I}{d\alpha^2} = \int_0^{\infty} r^2 e^{-\alpha r} dr = \frac{2}{\alpha^3} = \frac{2a^3}{2^3} = \frac{a^3}{4}$$

ta tìm được $A = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$.

b) Xác suất tìm thấy electron ở trong thể tích dV bao quanh điểm r, θ, φ

$$\begin{aligned} dW(r, \theta, \varphi) &= |\psi(r)|^2 dV = |\psi|^2 r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi \\ &= A^2 e^{-\frac{2r}{a}} r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi \end{aligned}$$

Xác suất tìm electron nằm giữa r và $r + dr$ được xác định bằng công thức :

$$\begin{aligned} dW(r) &= A^2 e^{-\frac{2r}{a}} r^2 dr \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\ &= 4\pi A^2 e^{-\frac{2r}{a}} r^2 dr = \rho(r) dr \text{ trong đó} \\ \rho(r) &= 4\pi A^2 e^{-\frac{2r}{a}} r^2 = \frac{4}{a^3} e^{-\frac{2r}{a}} r^2 \end{aligned}$$

là mật độ xác suất theo bán kính r .

Giá trị của r để cho $\rho(r)$ cực đại được xác định từ phương trình :

$$\frac{d\rho}{dr} = \frac{8r}{a^4} e^{-\frac{2r}{a}} |a - r| = 0$$

Từ đây suy ra $r = a$.

10. Để chứng minh các hệ thức toán tử ở trên ta tác dụng các toán tử ở vế phải lên hàm $\psi(x)$:

$$\begin{aligned} \text{a) } \frac{d^2}{dx^2}(x^2\psi(x)) &= \frac{d}{dx} \frac{d}{dx}(x^2\psi) = \frac{d}{dx} \left(x^2 \frac{d\psi}{dx} + 2x\psi \right) \\ &= x^2 \frac{d^2\psi}{dx^2} + 2x \frac{d\psi}{dx} + 2x \frac{d\psi}{dx} + 2\psi \\ &= \left(x^2 \frac{d^2}{dx^2} + 4x \frac{d}{dx} + 2 \right) \psi \end{aligned}$$

Vậy ta có :

$$\frac{d^2}{dx^2}x^2 = x^2 \frac{d^2}{dx^2} + 4x \frac{d}{dx} + 2.$$

$$\begin{aligned} \text{b) } \left(\frac{d}{dx}x \right)^2 \psi &= \left(\frac{d}{dx}x \right) \frac{d}{dx}(x\psi) = \left(\frac{d}{dx}x \right) \left(\psi + x \frac{d\psi}{dx} \right) \\ &= \frac{d}{dx}(x\psi) + \frac{d}{dx} \left(x^2 \frac{d\psi}{dx} \right) \\ &= \psi + x \frac{d\psi}{dx} + 2x \frac{d\psi}{dx} + x^2 \frac{d^2\psi}{dx^2} \\ &= \left(x^2 \frac{d^2}{dx^2} + 3x \frac{d}{dx} + 1 \right) \psi \end{aligned}$$

Từ đây suy ra :

$$\left(\frac{d}{dx}x \right)^2 = x^2 \frac{d^2}{dx^2} + 3x \frac{d}{dx} + 1$$

11. a) Các toán tử $\hat{A}$ và $\hat{B}$ là những toán tử tuyến tính nên ta có :

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1 \hat{A}\psi_1 + c_2 \hat{A}\psi_2$$

$$\hat{B}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{B}\psi_1 + c_2\hat{B}\psi_2$$

trong đó c_1, c_2 là những số phức hoặc số thực bất kì, ψ_1 và ψ_2 là những hàm mà các toán tử $\hat{A}$ và $\hat{B}$ tác dụng lên chúng. Cộng hai phương trình trên về theo về ta tìm được :

$$(\hat{A} + \hat{B})(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(\hat{A} + \hat{B})\psi_1 + c_2(\hat{A} + \hat{B})\psi_2$$

Từ đây suy ra toán tử $(\hat{A} + \hat{B})$ là toán tử tuyến tính.

$$b) \hat{A}\hat{B}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = \hat{A}[c_1\hat{B}\psi_1 + c_2\hat{B}\psi_2]$$

$$= c_1\hat{A}\hat{B}\psi_1 + c_2\hat{A}\hat{B}\psi_2$$

Vậy khi $\hat{A}, \hat{B}$ là những toán tử tuyến tính thì $\hat{A}\hat{B}$ cũng là toán tử tuyến tính.

12. Các toán tử $\hat{A}$ và $\hat{B}$ là những toán tử ecmit nên ta có :

$$\int \psi_1^* \hat{A} \psi_2 dV = \int \psi_2 (\hat{A} \psi_1)^* dV$$

$$\int \psi_1^* \hat{B} \psi_2 dV = \int \psi_2 (\hat{B} \psi_1)^* dV$$

– Cộng hai đẳng thức trên theo từng về ta tìm được :

$$\int \psi_1^* (\hat{A} + \hat{B}) \psi_2 dV = \int \psi_2 [(\hat{A} + \hat{B}) \psi_1]^* dV$$

Từ đây suy ra $(\hat{A} + \hat{B})$ là toán tử ecmit.

$$\begin{aligned} \int \psi_1^* (\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}) \psi_2 dV &= \int \psi_1^* \hat{A}\hat{B} \psi_2 dV + \int \psi_1^* \hat{B}\hat{A} \psi_2 dV = \\ &= \int (\hat{B} \psi_2) (\hat{A} \psi_1)^* dV + \int (\hat{A} \psi_2) (\hat{B} \psi_1)^* dV = \\ &= \int (\hat{A} \psi_1)^* \hat{B} \psi_2 dV + \int (\hat{B} \psi_1)^* \hat{A} \psi_2 dV \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int \psi_2 (\hat{B} \hat{A} \psi_1)^* dV + \int \psi_2 (\hat{A} \hat{B} \psi_1)^* dV = \\
&= \int \psi_2 [(\hat{B} \hat{A} + \hat{A} \hat{B}) \psi_1]^* dV = \int \psi_2 [(\hat{A} \hat{B} + \hat{B} \hat{A}) \psi_1]^* dV
\end{aligned}$$

Vậy toán tử $(\hat{A} \hat{B} + \hat{B} \hat{A})$ là toán tử ecmit.

$$\begin{aligned}
\int \psi_1^* \hat{A} \hat{B} \psi_2 dV &= \int (\hat{B} \psi_2) (\hat{A} \psi_1)^* dV = \int (\hat{A} \psi_1)^* \hat{B} \psi_2 dV = \\
&= \int \psi_2 (\hat{B} \hat{A} \psi_1)^* dV.
\end{aligned}$$

Nếu $\hat{B} \hat{A} = \hat{A} \hat{B}$ thì ta có :

$$\int \psi_1^* (\hat{A} \hat{B}) \psi_2 dV = \int \psi_2 [(\hat{A} \hat{B}) \psi_1]^* dV$$

nghĩa là $\hat{A} \hat{B}$ là toán tử ecmit. Vậy nếu các toán tử $\hat{A}, \hat{B}$ là những toán tử ecmit và $\hat{A} \hat{B} = \hat{B} \hat{A}$ thì toán tử $\hat{A} \hat{B}$ là ecmit. Từ đây suy ra nếu toán tử $\hat{A}$ là ecmit thì A^n ($n = 2, 3, 4 \dots$) cũng là toán tử ecmit.

13. a) + Vì x là thực ($x^* = x$) và $\hat{x} = x$ nên ta có :

$$\begin{aligned}
\int \psi_1^* (x) \hat{x} \psi_2 (x) dx &= \int \psi_1^* (x) x \psi_2 (x) dx = \\
&= \int \psi_2 (x) (x \psi_1)^* dx = \int \psi_2 (x) (\hat{x} \psi_1)^* dx
\end{aligned}$$

Vậy $\hat{x} = x$ là toán tử ecmit. Chứng minh tương tự ta được các toán tử $\hat{y} = y$, $\hat{z} = z$ cũng là những toán tử ecmit.

$$\begin{aligned}
\int \psi_1^* (x) \hat{p}_x \psi_2 (x) dx &= -i\hbar \int \psi_1^* \frac{d\psi_2}{dx} dx = \\
&= -i\hbar \int \psi_1^* (x) d\psi_2 (x) = -i\hbar \psi_1^* (x) \psi_2 (x) \Big|_{-\infty}^{\infty} +
\end{aligned}$$

$$+ \int \psi_2 i\hbar \frac{d\psi_1^*}{dx} dx = -i\hbar \psi_1^*(x) \psi_2(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int \psi_2(x) (\widehat{p}_x \psi_1)^* dx$$

Nếu $\psi_1(x)$ và $\psi_2(x)$ khi $x = \pm\infty$ bằng không (vì mật độ xác suất tìm thấy hạt ở xa vô cùng bằng không) thì ta có :

$$\int \psi_1^*(x) \widehat{p}_x \psi_2(x) dx = \int \psi_2(x) (\widehat{p}_x \psi_1)^* dx$$

Vậy $\widehat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$ là toán tử ecmit. Chứng minh tương tự ta có các toán tử $\widehat{p}_y, \widehat{p}_z$ là những toán tử ecmit.

b) Vì các toán tử $\widehat{p}_x, \widehat{p}_y$ và $\widehat{p}_z$ là những toán tử ecmit nên các toán tử $\widehat{p}_x^2, \widehat{p}_y^2, \widehat{p}_z^2$ và $(\widehat{p}_x^2 + \widehat{p}_y^2 + \widehat{p}_z^2)$ cũng là những toán tử ecmit.

Thế năng $U(x, y, z)$ là hàm thực của các biến x, y, z nên ta có :

$$\begin{aligned} \int \psi_1^*(x, y, z) U \psi_2(x, y, z) dx dy dz &= \\ &= \int \psi_2(x, y, z) (U \psi_1(x, y, z))^* dx dy dz \end{aligned}$$

Từ đây suy ra $U(x, y, z)$ là toán tử ecmit. Vậy toán tử

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}_x^2 + \widehat{p}_y^2 + \widehat{p}_z^2}{2m} + U(x, y, z)$$

là toán tử ecmit. Các toán tử $\widehat{p}_x, \widehat{p}_y, \widehat{p}_z$ là các toán tử thành phần xung lượng, toán tử $\widehat{p} = i\widehat{p}_x + j\widehat{p}_y + k\widehat{p}_z$ là toán tử xung lượng và $\widehat{H}$ là toán tử Haminton.

c) Các toán tử $\widehat{x}, \widehat{y}, \widehat{z}, \widehat{p}_x, \widehat{p}_y, \widehat{p}_z$ là những toán tử ecmit. Vì

$\hat{x}\hat{p}_y = \hat{p}_y\hat{x}$, $\hat{y}\hat{p}_x = \hat{p}_x\hat{y}$, $\hat{z}\hat{p}_x = \hat{p}_x\hat{z}$, $\hat{x}\hat{p}_z = \hat{p}_z\hat{x}$, $\hat{y}\hat{p}_z = \hat{p}_z\hat{y}$, $\hat{z}\hat{p}_y = \hat{p}_y\hat{z}$
 nên các toán tử $\hat{x}\hat{p}_y$, $\hat{y}\hat{p}_x$, $\hat{z}\hat{p}_x$, $\hat{x}\hat{p}_z$, $\hat{y}\hat{p}_z$, $\hat{z}\hat{p}_y$ cũng là những
 toán tử ecmit. Từ đây suy ra $\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$, $\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z$,
 và $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$ là những toán tử ecmit. Các toán tử $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$
 và $\hat{L}_z$ gọi là những toán tử hình chiếu mômen xung lượng trên các
 trục x, y và z. Vì $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ và $\hat{L}_z$ là những toán tử ecmit nên các
 toán tử $\hat{L}_x^2$, $\hat{L}_y^2$, $\hat{L}_z^2$ và $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ là những toán tử ecmit.
 Toán tử $\hat{L}^2$ gọi là toán tử bình phương mômen xung lượng.
 $\hat{L} = i\hat{L}_x + j\hat{L}_y + k\hat{L}_z$ gọi là toán tử mômen xung lượng, $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ và
 $\hat{L}_z$ là những toán tử thành phần mômen xung lượng.

14. Nếu $\hat{A}$ và $\hat{B}$ là những toán tử ecmit thì ta có :

$$\int \psi_1^* \hat{A} \hat{B} \psi_2 dV = \int \psi_2 (\hat{B} \hat{A} \psi_1)^* dV$$

Dùng đẳng thức này ta có :

$$\begin{aligned}
 \int \psi_1^* [\hat{A}, \hat{B}] \psi_2 dV &= \int \psi_1^* (\hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}) \psi_2 dV = \\
 &= \int \psi_1^* \hat{A} \hat{B} \psi_2 dV - \int \psi_1^* \hat{B} \hat{A} \psi_2 dV = \int \psi_2 (\hat{B} \hat{A} \psi_1)^* dV - \\
 &- \int \psi_2 (\hat{A} \hat{B} \psi_1)^* dV = \int \psi_2 [(\hat{B} \hat{A} - \hat{A} \hat{B}) \psi_1]^* dV = \\
 &- \int \psi_2 [(\hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}) \psi_1]^* dV
 \end{aligned}$$

Thay $\hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} = i\hat{C}$ ta tìm được :

$$\int \psi_1^* i\hat{C} \psi_2 dV = - \int \psi_2 [i\hat{C} \psi_1]^* dV = i \int \psi_2 (\hat{C} \psi_1)^* dV$$

hay
$$\int \psi_1^* \hat{C} \psi_2 dV = \int \psi_2 (\hat{C} \psi_1)^* dV$$

Từ đây ta thấy $\hat{C}$ là toán tử ecmit

15.

$$\begin{aligned} \int |(\alpha \hat{A} - i\hat{B})\psi(x)|^2 dx &= \int (\alpha \hat{A}^* + i\hat{B}^*) \psi^* (\alpha \hat{A} - i\hat{B}) \psi dx \\ &= \alpha \int \hat{A}^* \psi^* (\alpha \hat{A} - i\hat{B}) \psi dx + i \int \hat{B}^* \psi^* (\alpha \hat{A} - i\hat{B}) \psi dx \\ &= \alpha \int (\alpha \hat{A} - i\hat{B}) \psi (\hat{A} \psi)^* dx + i \int (\alpha \hat{A} - i\hat{B}) \psi (\hat{B} \psi)^* dx \\ &= \alpha \int \psi^* \hat{A} (\alpha \hat{A} - i\hat{B}) \psi dx + i \int \psi^* \hat{B} (\alpha \hat{A} - i\hat{B}) \psi dx \\ &= \int \psi^* (\alpha \hat{A} + i\hat{B}) (\alpha \hat{A} - i\hat{B}) \psi dx \\ &= \int \psi^* [\alpha^2 \hat{A}^2 - i\alpha(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) + \hat{B}^2] \psi dx \\ &= \int \psi^* [\alpha^2 \hat{A}^2 - i\alpha.i\hat{C} + \hat{B}^2] \psi dx \\ &= \int \psi^* [\alpha^2 \hat{A}^2 + \alpha \hat{C} + \hat{B}^2] \psi dx \end{aligned}$$

16. Theo định nghĩa :

$$\hat{T}_{\vec{a}} \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{a})$$

Khai triển hàm $\psi(\vec{r} + \vec{a})$ xung quanh điểm $\vec{r}$, ta có :

$$\psi(\vec{r} + \vec{a}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\vec{a} \vec{\nabla})^n}{n!} \psi(\vec{r}) = \hat{T}_{\vec{a}} \psi(\vec{r})$$

Từ đây suy ra :
$$\hat{T}_{\vec{a}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\vec{a} \vec{\nabla})^n}{n!} = e^{\vec{a} \vec{\nabla}} = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{a} \hat{p}}$$

Vì $\vec{a}$ vô cùng bé nên ta có :

$$\hat{T}_{\vec{a}} \approx 1 + \frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}$$

17. Ta biết :

$$\hat{R}(\delta\vec{\phi})\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \delta\vec{r})$$

Khai triển hàm $\psi(\vec{r} + \delta\vec{r})$ theo $\delta\vec{r}$ quanh điểm $\vec{r}$:

$$\psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\delta\vec{r}\vec{\nabla})^n}{n!} \psi(\vec{r}) = \hat{R}(\delta\vec{\phi})\psi(\vec{r})$$

Từ đây suy ra :

$$\hat{R}(\delta\vec{\phi}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\delta\vec{r}\vec{\nabla})^n}{n!} = e^{\delta\vec{r}\vec{\nabla}}$$

Chú ý rằng

$$\begin{aligned} \delta\vec{r}\vec{\nabla} &= [\delta\vec{\phi} \wedge \vec{r}]\vec{\nabla} = [\vec{r} \wedge \vec{\nabla}] = \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi}[\vec{r} \wedge \hat{\vec{p}}] \\ &= \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \hat{\vec{L}} \end{aligned}$$

ta tìm được :

$$\hat{R}(\delta\vec{\phi}) = e^{\frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \hat{\vec{L}}}$$

Vì $\delta\vec{\phi}$ rất bé nên ta có :

$$\hat{R}(\delta\vec{\phi}) = 1 + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \hat{\vec{L}}$$

18. a) Ta biết :

$$\int \psi(x)(\widehat{A^+} \varphi(x))^* dx = \int \varphi^*(x) \widehat{A} \psi(x) dx$$

Nếu $\widehat{A^+} = \widehat{A}$ thì ta có :

$$\int \psi(x)(\widehat{A} \varphi(x))^* dx = \int \varphi^*(x) \widehat{A} \psi(x) dx$$

Toán tử $\widehat{A}$ thoả mãn điều kiện này là toán tử ecmit.

b) Theo định nghĩa, ta có :

$$\int \psi(x)[\widehat{AB}^+ \varphi(x)]^* dx = \int \varphi^*(x)(\widehat{AB}) \psi(x) dx$$

Đặt $\widehat{B} \psi(x) = \Phi(x)$ ta tìm được :

$$\begin{aligned} \int \psi(x)[(\widehat{AB})^+ \varphi(x)]^* dx &= \int \varphi^*(x) \widehat{A} \Phi(x) dx = \\ &= \int \Phi(x)(\widehat{A^+} \varphi(x))^* dx = \int (\widehat{A^+} \varphi(x))^* \widehat{B} \psi(x) dx \\ &= \int \psi(x)(\widehat{B^+} \widehat{A^+} \varphi(x))^* dx \end{aligned}$$

Từ đây suy ra :

$$(\widehat{AB})^+ = \widehat{B^+} \widehat{A^+}$$

$$\begin{aligned} \text{c) } [\widehat{A}, \widehat{B}]^+ &= (\widehat{AB} - \widehat{BA})^+ = (\widehat{AB})^+ - (\widehat{BA})^+ = \\ &= \widehat{B^+} \widehat{A^+} - \widehat{A^+} \widehat{B^+} = [\widehat{B^+}, \widehat{A^+}] \end{aligned}$$

19. Cho các toán tử vectơ tác dụng lên hàm $\psi(x, y, z)$ ta tìm được :

$$\text{a) } (y\widehat{p_x} - \widehat{p_x}y) \psi = -i\hbar \left[y \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (y\psi) \right]$$

$$= -i\hbar \left(y \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) = 0$$

Vậy $\widehat{y p_x} - \widehat{p_x y} = 0$. Bằng cách chứng minh tương tự, ta có $\widehat{z p_x} - \widehat{p_x z} = 0$.

$$\begin{aligned} (x \widehat{p_x} - \widehat{p_x} x) \psi &= -i\hbar \left[x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (x \psi) \right] \\ &= -i\hbar \left[x \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \right] = i\hbar \psi \end{aligned}$$

Từ đây suy ra $x \widehat{p_x} - \widehat{p_x} x = i\hbar$. Bằng cách chứng minh tương tự ta tìm được $y \widehat{p_y} - \widehat{p_y} y = i\hbar$, $z \widehat{p_z} - \widehat{p_z} z = i\hbar$

$$b) (x \widehat{L_x} - \widehat{L_x} x) \psi = -i\hbar \left\{ xy \frac{\partial \psi}{\partial z} - xz \frac{\partial \psi}{\partial y} - yx \frac{\partial \psi}{\partial z} + xz \frac{\partial \psi}{\partial y} \right\} = 0$$

$$\text{Vậy } x \widehat{L_x} - \widehat{L_x} x = 0$$

$$\begin{aligned} (y \widehat{L_x} - \widehat{L_x} y) \psi &= -i\hbar \left\{ y^2 \frac{\partial \psi}{\partial z} - zy \frac{\partial \psi}{\partial y} - y^2 \frac{\partial \psi}{\partial z} + z \frac{\partial}{\partial y} (y \psi) \right\} = \\ &= -i\hbar \left\{ -zy \frac{\partial \psi}{\partial y} + zy \frac{\partial \psi}{\partial y} + z \psi \right\} = -i\hbar z \psi \end{aligned}$$

$$\text{Từ đây suy ra } y \widehat{L_x} - \widehat{L_x} y = -i\hbar z$$

$$\begin{aligned} (z \widehat{L_x} - \widehat{L_x} z) \psi &= -i\hbar \left\{ zy \frac{\partial \psi}{\partial z} - z^2 \frac{\partial \psi}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} (z \psi) + z \frac{\partial}{\partial y} (z \psi) \right\} = \\ &= -i\hbar \left\{ zy \frac{\partial \psi}{\partial z} - z^2 \frac{\partial \psi}{\partial y} - yz \frac{\partial \psi}{\partial z} - y \psi + z^2 \frac{\partial \psi}{\partial y} \right\} = i\hbar y \psi \end{aligned}$$

Vậy $z \widehat{L}_x - \widehat{L}_x z = i\hbar y$

$$20. a) \widehat{L}_z \widehat{L}_+ - \widehat{L}_+ \widehat{L}_z = \widehat{L}_z (\widehat{L}_x + i\widehat{L}_y) - (\widehat{L}_x + i\widehat{L}_y) \times$$

$$\begin{aligned} \widehat{L}_z &= \widehat{L}_z \widehat{L}_x - \widehat{L}_x \widehat{L}_z + i(\widehat{L}_z \widehat{L}_y - \widehat{L}_y \widehat{L}_z) = i\hbar \widehat{L}_y + i \times (-i\hbar \widehat{L}_x) \\ &= i\hbar \widehat{L}_y + \hbar \widehat{L}_x = \hbar(\widehat{L}_x + i\widehat{L}_y) = \hbar \widehat{L}_+ \end{aligned}$$

$$b) \widehat{L}_z \widehat{L}_- - \widehat{L}_- \widehat{L}_z = \widehat{L}_z (\widehat{L}_x - i\widehat{L}_y) - (\widehat{L}_x - i\widehat{L}_y) \widehat{L}_z =$$

$$\begin{aligned} &= \widehat{L}_z \widehat{L}_x - \widehat{L}_x \widehat{L}_z - i(\widehat{L}_z \widehat{L}_y - \widehat{L}_y \widehat{L}_z) = i\hbar \widehat{L}_y - i(-i\hbar \times \widehat{L}_x) = \\ &= i\hbar \widehat{L}_y - \hbar \widehat{L}_x = -\hbar(\widehat{L}_x - i\widehat{L}_y) = -\hbar \widehat{L}_- \end{aligned}$$

$$c) \widehat{L}_z \widehat{L}_- \widehat{L}_+ - \widehat{L}_- \widehat{L}_+ \widehat{L}_z = (\widehat{L}_- \widehat{L}_z - \hbar \widehat{L}_-) \widehat{L}_+ -$$

$$\begin{aligned} \widehat{L}_- \widehat{L}_+ \widehat{L}_z &= \widehat{L}_- \widehat{L}_z \widehat{L}_+ - \hbar \widehat{L}_- \widehat{L}_+ - \widehat{L}_- \widehat{L}_+ \widehat{L}_z = \widehat{L}_- (\widehat{L}_+ \widehat{L}_z + \hbar \widehat{L}_+) - \\ - \hbar \widehat{L}_- \widehat{L}_+ - \widehat{L}_- \widehat{L}_+ \widehat{L}_z &= \widehat{L}_- \widehat{L}_+ \widehat{L}_z + \hbar \widehat{L}_- \widehat{L}_+ - \hbar \widehat{L}_- \widehat{L}_+ - \widehat{L}_- \widehat{L}_+ \widehat{L}_z = 0 \end{aligned}$$

$$d) \widehat{L}_- \widehat{L}_+ = (\widehat{L}_x - i\widehat{L}_y)(\widehat{L}_x + i\widehat{L}_y) = \widehat{L}_x^2 + \widehat{L}_y^2 - i\widehat{L}_y \widehat{L}_x + i\widehat{L}_x \widehat{L}_y =$$

$$= \widehat{L}_x^2 + \widehat{L}_y^2 + i(\widehat{L}_x \widehat{L}_y - \widehat{L}_y \widehat{L}_x)$$

$$= \widehat{L}_x^2 + \widehat{L}_y^2 + i\hbar \widehat{L}_z = \widehat{L}_x^2 + \widehat{L}_y^2 - \hbar \widehat{L}_z$$

$$= \widehat{L}_x^2 + \widehat{L}_y^2 + \widehat{L}_z^2 - \widehat{L}_z^2 - \hbar \widehat{L}_z = \widehat{L}^2 - \widehat{L}_z^2 - \hbar \widehat{L}_z$$

Từ đây suy ra :

$$\widehat{L}^2 = \widehat{L}_- \widehat{L}_+ + \widehat{L}_z^2 + \hbar \widehat{L}_z$$

$$\begin{aligned}
\text{e) } \widehat{L_z} \widehat{L^2} - \widehat{L^2} \widehat{L_z} &= \widehat{L_z} (\widehat{L_-} \widehat{L_+} + \widehat{L_z^2} + \hbar \widehat{L_z}) - \\
&- (\widehat{L_-} \widehat{L_+} + \widehat{L_z^2} + \hbar \widehat{L_z}) \widehat{L_z} = \widehat{L_z} \widehat{L_-} \widehat{L_+} - \widehat{L_-} \widehat{L_+} \widehat{L_z} + \\
&+ \widehat{L_z^3} + \hbar \widehat{L_z^2} - \widehat{L_z^3} - \hbar \widehat{L_z^2} = \widehat{L_z} \widehat{L_-} \widehat{L_+} - \widehat{L_-} \widehat{L_+} \widehat{L_z} = 0
\end{aligned}$$

Nhân về phía phải và nhân về phía trái $\widehat{L_x}$ lên
 $(\widehat{L_x} \widehat{L_y} - \widehat{L_y} \widehat{L_x}) = i \hbar \widehat{L_z}$ rồi cộng hai phương trình vừa nhận được
lại, ta có :

$$\widehat{L_x^2} \widehat{L_y} - \widehat{L_y} \widehat{L_x^2} = i \hbar (\widehat{L_x} \widehat{L_z} + \widehat{L_z} \widehat{L_x})$$

nhân về phía phải và nhân về phía trái $\widehat{L_z}$ lên
 $\widehat{L_z} \widehat{L_y} - \widehat{L_y} \widehat{L_z} = -i \hbar \widehat{L_x}$ rồi cộng hai phương trình vừa nhận được lại,
ta có :

$$\widehat{L_z^2} \widehat{L_y} - \widehat{L_y} \widehat{L_z^2} = -i \hbar (\widehat{L_z} \widehat{L_x} + \widehat{L_x} \widehat{L_z})$$

Chú ý rằng $\widehat{L_y^2} \widehat{L_y} - \widehat{L_y} \widehat{L_y^2} = 0$, ta tìm được :

$$\begin{aligned}
&(\widehat{L_x^2} \widehat{L_y} - \widehat{L_y} \widehat{L_x^2}) + (\widehat{L_z^2} \widehat{L_y} - \widehat{L_y} \widehat{L_z^2}) + \widehat{L_y^2} \widehat{L_y} - \widehat{L_y} \widehat{L_y^2} = \\
&= (\widehat{L_x^2} + \widehat{L_y^2} + \widehat{L_z^2}) \widehat{L_y} - \widehat{L_y} (\widehat{L_x^2} + \widehat{L_y^2} + \widehat{L_z^2}) = \\
&= \widehat{L^2} \widehat{L_y} - \widehat{L_y} \widehat{L^2} = 0
\end{aligned}$$

Bằng cách chứng minh tương tự ta có $\widehat{L^2} \widehat{L_x} - \widehat{L_x} \widehat{L^2} = 0$

21. a) $(\widehat{p_x} f(x) - f(x) \widehat{p_x}) \psi(x) = \widehat{p_x} (f(x) \psi(x)) -$

$$- f(x) \widehat{p_x} \psi(x) = -i \hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial x} (f(x) \psi(x)) - f(x) \frac{\partial \psi}{\partial x} \right\} =$$

$$-i\hbar \left\{ \frac{\partial f}{\partial x} \psi(x) + f \frac{\partial \psi}{\partial x} - f \frac{\partial \psi}{\partial x} \right\} = -i\hbar \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) \psi(x)$$

Từ đây ta có :

$$\widehat{p}_x f(x) - f(x) \widehat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial f}{\partial x}$$

$$\begin{aligned} \text{b) } \widehat{p} \vec{A} - \vec{A} \widehat{p} &= \widehat{p}_x A_x + \widehat{p}_y A_y + \widehat{p}_z A_z - A_x \widehat{p}_x - A_y \widehat{p}_y - A_z \widehat{p}_z = \\ &= \widehat{p}_x A_x - A_x \widehat{p}_x + \widehat{p}_y A_y - A_y \widehat{p}_y + \widehat{p}_z A_z - A_z \widehat{p}_z = \\ &= -i\hbar \frac{\partial A_x}{\partial x} - i\hbar \frac{\partial A_y}{\partial y} - i\hbar \frac{\partial A_z}{\partial z} \\ &= -i\hbar \left(\frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z} \right) = -i\hbar \operatorname{div} \vec{A} \end{aligned}$$

$$\text{c) } (\hat{E}t - t\hat{E})\psi(t) = i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial t}(t\psi(t)) - t \frac{\partial}{\partial t} \psi \right] = i\hbar \psi \quad (1).$$

Từ đây suy ra : $\hat{E}t - t\hat{E} = i\hbar$

$$22. \text{ a) } \widehat{K}.\psi(x) = -i \left(\frac{x}{a^2} + \frac{d}{dx} \right) \psi(x) = k\psi(x)$$

$$\left(\frac{x}{a^2} + \frac{d}{dx} \right) \psi(x) = ik\psi(x)$$

$$\frac{d\psi}{dx} = \left(ik - \frac{x}{a^2} \right) \psi(x)$$

$$\frac{d\psi}{\psi} = \left(ik - \frac{x}{a^2} \right) dx$$

$$\ln \psi(x) = ikx - \frac{x^2}{2a^2} + \ln A, \quad A = \text{const}$$

$$\psi(x) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2} + ikx}$$

k nhận với mọi giá trị thực bất kì.

$$b) \quad \hat{L}_z \psi(\varphi) = -i\hbar \frac{d\psi(\varphi)}{d\varphi} = L_z \psi(\varphi)$$

L_z là trị riêng của $\hat{L}_z$ và $\psi(\varphi)$ là hàm riêng của $\hat{L}_z$.

$$\frac{d\psi}{\psi} = \frac{iL_z}{\hbar} d\varphi$$

$$\ln \psi(\varphi) = \frac{iL_z}{\hbar} \varphi + \ln A, \quad A = \text{const}$$

$$\psi(\varphi) = A e^{\frac{iL_z}{\hbar} \varphi}$$

Để hàm $\psi(\varphi)$ đơn giá nghĩa là $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$, ta có :

$$e^{\frac{iL_z}{\hbar} 2\pi} = 1 \text{ hay } L_z = \hbar m \text{ với } m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$$

Vậy hàm riêng và trị riêng của $\hat{L}_z$ có dạng

$$\psi(\varphi) = A e^{im\varphi}, \quad L_z = \hbar m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$c) \quad \hat{p}_x \psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x) = p_x \psi(x)$$

ở đây $\psi(x)$ là hàm riêng và p_x là trị riêng của toán tử $\hat{p}_x$

$$\frac{d\psi(x)}{\psi(x)} = \frac{ip_x}{\hbar} dx, \quad \ln \psi(x) = \frac{ip_x}{\hbar} x + \ln A, \quad A = \text{const}$$

$$\psi(x) = A e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}$$

Từ điều kiện $\psi(x) = \psi(x + a)$ suy ra :

$$e^{\frac{i p_x a}{\hbar}} = 1 \text{ hay } \frac{p_x a}{\hbar} = m \cdot 2\pi, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Vậy

$$\psi(x) = A e^{\frac{i 2\pi m x}{a}}, \quad p_x = \hbar \frac{2\pi m}{a}$$

$$d) \quad \hat{T}\psi(\varphi) = -\frac{\hbar^2 d^2}{2I d\varphi^2} \psi(\varphi) = E\psi(\varphi)$$

trong đó $\psi(\varphi)$ là hàm riêng và E là trị riêng của $\hat{T}$.

$$\text{Đặt } k^2 = \frac{2IE}{\hbar^2}, \text{ ta có :}$$

$$\frac{d^2 \psi(\varphi)}{d\varphi^2} + k^2 \psi(\varphi) = 0$$

nghiệm $\psi(\varphi)$ có dạng :

$$\psi(\varphi) = A e^{ik\varphi}$$

Từ điều kiện đơn giá $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$, ta có :

$$e^{ik2\pi} = 1 \text{ hay } k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

vậy

$$\psi(\varphi) = A e^{ik\varphi}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2I}, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$23. \hat{H} \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \psi(x) \text{ khi } 0 \leq x \leq d$$

Ở đây $\psi(x)$ là hàm riêng và E là trị riêng của toán tử $\hat{H}$.

Đặt $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ ta có :

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + k^2 \psi(x) = 0$$

Nghiệm tổng quát của phương trình vi phân này có dạng :

$$\psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} = A_1 \cos kx + A_2 \sin kx$$

trong đó $A_1 = C_1 + C_2$, $A_2 = i(C_1 - C_2)$. Đặt $A_1 = A \sin \alpha$ và $A_2 = A \cos \alpha$ thì ta có thể viết hàm $\psi(x)$ dưới dạng :

$$\psi(x) = A \sin(kx + \alpha)$$

Ngoài giếng thế xác suất tìm thấy hạt bằng không nên $\psi(x) = 0$ khi $x < 0$ và khi $x > d$. Từ điều kiện liên tục của hàm sóng ta có $\psi(0) = 0$ và $\psi(d) = 0$. Từ điều kiện $\psi(0) = A \sin \alpha = 0$ suy ra $\alpha = 0$ và điều kiện

$\psi(d) = A \sin kd = 0$ ta tìm được $kd = n\pi$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) hay $k = \frac{n\pi}{d}$. Khi

$n = 0$ thì hàm $\psi(x) = 0$ trong khoảng $0 \leq x \leq d$ nghĩa là xác suất tìm thấy hạt ở mọi điểm trong giếng thế bằng không. Điều này mâu thuẫn với đầu bài toán là hạt ở trong giếng thế. Vậy giá trị

ứng với $n = 0$ bị loại trừ. Hai hàm sóng $\psi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right)$ và

$\psi(x) = -A \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right)$ cùng mô tả một trạng thái của hạt.

Vậy chỉ cần lấy các giá trị dương của n là đủ. Cuối cùng ta có :

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right), E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2md^2}, n = 1, 2, 3, \dots$$

24. a) Vì $\widehat{L^2} \widehat{L_z} - \widehat{L_z} \widehat{L^2} = 0$ nên toán tử $\widehat{L^2}$ và $\widehat{L_z}$ có chung hàm riêng ψ :

$$\widehat{L^2} \psi = L^2 \psi, \widehat{L_z} \psi = L_z \psi$$

$$\begin{aligned} (L^2 - L_z^2) &= \int \psi^* (\widehat{L^2} - \widehat{L_z^2}) \psi dV = \int \psi^* (\widehat{L_x^2} + \widehat{L_y^2}) \psi dV \\ &= \int \psi^* \widehat{L_x^2} \psi dV + \int \psi^* \widehat{L_y^2} \psi dV \\ &= \int (\widehat{L_x} \psi)^* \widehat{L_x} \psi dV + \int (\widehat{L_y} \psi)^* \widehat{L_y} \psi dV \\ &= \int |\widehat{L_x} \psi|^2 dV + \int |\widehat{L_y} \psi|^2 dV \geq 0 \end{aligned}$$

$$\text{Vậy } L^2 - L_z^2 \geq 0 \text{ hay } -\sqrt{L^2} \leq L_z \leq \sqrt{L^2}$$

Các đại lượng vật lý có giá trị hữu hạn nên L^2 có giá trị hữu hạn. Gọi $L_{z\max} = \hbar l$ là giá trị lớn nhất của L_z , ta có :

$$-L_{z\max} \leq L_z \leq L_{z\max} \text{ hay } -l \leq m \leq l.$$

$$\text{b) } \widehat{L_z} \psi_m = L_z \psi_m = \hbar m \psi_m, L_z = \hbar m.$$

$$(\widehat{L_z} \widehat{L_+} - \widehat{L_+} \widehat{L_z}) \psi_m = \hbar \widehat{L_+} \psi_m$$

$$\widehat{L_z} \widehat{L_+} \psi_m - \widehat{L_+} \widehat{L_z} \psi_m = \hbar \widehat{L_+} \psi_m$$

$$\widehat{L_z} \widehat{L_+} \psi_m - \widehat{L_+} \hbar m \psi_m = \hbar \widehat{L_+} \psi_m$$

$$\widehat{L_z} (\widehat{L_+} \psi_m) = (m+1) \hbar (\widehat{L_+} \psi_m)$$

Từ đây suy ra $\widehat{L}_+ \psi_m$ là hàm riêng của toán tử $\widehat{L}_z$ tương ứng với trị riêng $(m+1)\hbar$.

$$(\widehat{L}_z \widehat{L}_+ - \widehat{L}_+ \widehat{L}_z) \psi_m = \hbar \widehat{L}_+ \psi_m$$

$$\widehat{L}_z \widehat{L}_+ \psi_m - \widehat{L}_+ \widehat{L}_z \psi_m = \hbar \widehat{L}_+ \psi_m$$

$$\widehat{L}_z (\widehat{L}_+ \psi_m) - \widehat{L}_+ \hbar m \psi_m = \hbar \widehat{L}_+ \psi_m$$

$$\widehat{L}_z (\widehat{L}_+ \psi_m) = (m+1)\hbar (\widehat{L}_+ \psi_m)$$

Phương trình này chỉ rằng $(\widehat{L}_+ \psi_m)$ là hàm riêng của toán tử $\widehat{L}_z$ tương ứng với trị riêng $(m+1)\hbar$. Có thể viết :

$$\widehat{L}_+ \psi_m = \text{const} \psi_{m+1}, \quad \widehat{L}_- \psi_m = \text{const} \psi_{m-1}$$

c) Gọi l là giá trị lớn nhất của m thì $\widehat{L}_+ \psi_l = \text{const} \psi_{l+1} = 0$. Nếu không thế thì l chưa phải là giá trị lớn nhất. Nói khác đi không tồn tại trạng thái ứng với m bằng $l+1$.

$$\begin{aligned} \widehat{L}^2 \psi_l &= (\widehat{L}_- \widehat{L}_+ + \widehat{L}_z^2 + \hbar \widehat{L}_z) \psi_l = \widehat{L}^2 \psi_l \\ &= \widehat{L}_- \widehat{L}_+ \psi_l + \widehat{L}_z^2 \psi_l + \hbar \widehat{L}_z \psi_l \end{aligned}$$

Chú ý $\widehat{L}_+ \psi_l = 0$, $\widehat{L}_z \psi_l = \hbar l \psi_l$, $\widehat{L}_z^2 \psi_l = \hbar^2 l^2 \psi_l$ ta tìm được :

$$\widehat{L}^2 \psi_l = (\hbar^2 l^2 + \hbar^2 l) \psi_l = \hbar^2 l(l+1) \psi_l = \widehat{L}^2 \psi_l$$

Từ đây ta có : $\widehat{L}^2 = \hbar^2 l(l+1)$

$$25. \widehat{L}^2 Y(\theta, \varphi) = -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2 Y}{\partial \theta^2} + \text{ctg} \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \right\} = \widehat{L}^2 Y(\theta, \varphi)$$

Cho $Y(\theta, \varphi) = A \{ \cos \theta + 2 \sin \theta \cos \varphi \}$ cần xác định $\widehat{L}^2$.

Chú ý :

$$\frac{\partial Y}{\partial \theta} = A \{-\sin \theta + 2 \cos \theta \cos \varphi\}$$

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial \theta^2} = A \{-\cos \theta - 2 \sin \theta \cos \varphi\}, \quad \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} = -2A \sin \theta \cos \varphi$$

Ta tìm được :

$$\widehat{L^2} Y(\theta, \varphi) = 2 \hbar^2 Y(\theta, \varphi) = L^2 Y(\theta, \varphi)$$

Từ đây ta có $L^2 = 2 \hbar^2$ (ứng với $l = 1$)

26. Điều kiện chuẩn hoá hàm sóng :

$$\int |Y_m(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = N_{lm}^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi P_l^m(\cos \theta) \times$$

$$P_l^m(\cos \theta) \sin \theta d\theta = 1 = 2\pi N_{lm}^2 I_l^m = 1$$

Ở đây

$$I_l^m = \int_0^\pi P_l^m(\cos \theta) P_l^m(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_l^m(x) dx$$

$$x = \cos \theta; \quad P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x),$$

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l$$

Tính được tích phân I_l^m ta xác định được N_{lm} .

$$I_l^m = \int_{-1}^1 (1-x^2)^{|m|} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l \cdot \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l dx =$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{-1}^1 (1-x^2)^{|m|} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l d\left(\frac{d^{|m|-1}}{dx^{|m|-1}} P_l\right) = \\
&= (1-x^2)^{|m|} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l \cdot \frac{d^{|m|-1}}{dx^{|m|-1}} P_l \Big|_{-1}^1 - \\
&\quad - \int_{-1}^1 \frac{d^{|m|-1}}{dx^{|m|-1}} P_l \frac{d}{dx} \left\{ (1-x^2)^{|m|} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l \right\} dx = \\
&= 0 - \int_{-1}^1 \frac{d^{|m|-1}}{dx^{|m|-1}} (P_l(x)) \cdot \frac{d}{dx} \left\{ (1-x^2)^{|m|} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} (P_l(x)) \right\} dx
\end{aligned}$$

Ta biết hàm $y(x) = \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x)$ thỏa mãn phương trình

$$\begin{aligned}
(1-x^2) \frac{d^{|m|+2}}{dx^{|m|+2}} P_l - 2x(|m|+1) \frac{d^{|m|+1}}{dx^{|m|+1}} P_l + \\
+ [l(l+1) - |m|(|m|+1)] \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l = 0
\end{aligned}$$

Thay $|m|$ bằng $|m| - 1$ thì phương trình này chuyển thành :

$$\begin{aligned}
(1-x^2) \frac{d^{|m|+1}}{dx^{|m|+1}} P_l - 2x|m| \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l + \\
+ [l(l+1) - (|m|-1)|m|] \frac{d^{|m|-1}}{dx^{|m|-1}} P_l = 0
\end{aligned}$$

Nhân cả hai vế của phương trình này với $(1-x^2)^{|m|-1}$ và chú ý

$l(l+1) - |m|(|m|-1) = (l+|m|)(l-|m|+1)$ ta có :

$$(1-x^2)^{|m|} \frac{d^{|m|+1}}{dx^{|m|+1}} P_l - 2x|m|(1-x^2)^{|m|-1} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l + \\ + (l+|m|)(l-|m|+1)(1-x^2)^{|m|-1} \frac{d^{|m|-1}}{dx^{|m|-1}} P_l = 0$$

hay

$$\frac{d}{dx} \left\{ (1-x^2)^{|m|} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} (P_l(x)) \right\} = \\ = - (l+|m|)(l-|m|+1) \times \\ \times (1-x^2)^{|m|-1} \frac{d^{|m|-1}}{dx^{|m|-1}} (P_l).$$

Dùng phương trình này ta viết lại tích phân I_l^m như sau :

$$I_l^m = (l+|m|)(l-|m|+1) \int_{-1}^1 (1-x^2)^{|m|-1} \frac{d^{|m|-1}}{dx^{|m|-1}} \times \\ \times P_l \frac{d^{|m|-1}}{dx^{|m|-1}} P_l dx = (l+|m|)(l-|m|+1) I_l^{m-1} \\ I_l^{m-1} = (l+|m|-1)(l-(|m|-1)+1) I_l^{m-2} \\ = (l+|m|-1)(l-|m|+2) I_l^{m-2} \\ I_l^{m-2} = (l+|m|-2)(l-(|m|-2)+1) I_l^{m-3} \\ = (l+|m|-2)(l-|m|+3) I_l^{m-3} \\ \dots\dots\dots$$

$$I_l^1 = (l+1) \int_{-1}^1 P_l(x)P_l(x)dx = (l+1)lI_l^0$$

Vậy

$$I_l^m = (l+|m|)(l-|m|+1)(l+|m|-1)(l-|m|+2) \times \\ (l+|m|-2)(l-|m|+3) \times \dots \times (l+1)lI_l^0$$

Chú ý rằng :

$$(l+|m|)(l+|m|-1)(l+|m|-2) \times \dots \times (l+1) = \\ = \frac{(l+|m|)!}{l!} (l-|m|+1)(l-|m|+2)(l-|m|+3) \\ \times \dots \times \\ \times l = \frac{l!}{(l-|m|)!}$$

$$\text{ta có : } I_l^m = \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} I_l^0$$

$$I_l^0 = \int_{-1}^1 P_l(x)P_l(x)dx = \frac{1}{(2^l l!)^2} \int_{-1}^1 \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l dx = \\ = \frac{1}{(2^l l!)^2} \int_{-1}^1 \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l d \left[\frac{d^{l-1}}{dx^{l-1}} (x^2-1)^l \right]$$

Tích tích phân từng phần l lần ta tìm được :

$$I_l^0 = \frac{(-1)^l}{(2^l l!)^2} \int_{-1}^1 (x^2-1)^l - \frac{d^{2l}}{dx^{2l}} (x^2-1)^l dx$$

Số hạng có số mũ cao nhất trong $(x^2 - 1)^l$ là x^{2l} . Khi đạo hàm $2l$ lần theo x của $(x^2 - 1)^l$ thì những số hạng có số mũ của x bé hơn $2l$ đều bằng không còn số hạng x^{2l} cho kết quả $2l(2l - 1)(2l - 2) \dots 1 = (2l)!$ Vậy ta có :

$$I_l^0 = \frac{(-1)^l (2l)!}{(2^l l!)^2} \int_{-1}^1 (x^2 - 1)^l dx$$

Chú ý $(x^2 - 1)^l = (-1)^l (1 - x)^l (1 + x)^l$ và $(-1)^{2l} = 1$ ta viết lại I_l^0 như sau :

$$\begin{aligned} I_l^0 &= \frac{(2l)!}{(2^l l!)^2} \int_{-1}^1 (1 - x)^l (1 + x)^l dx = \frac{(2l)!}{(2^l l!)^2} \int_{-1}^1 (1 - x)^l \times \\ &\quad \times \frac{d(1 + x)^{l+1}}{l + 1} = \frac{(2l)!}{(2^l l!)^2} \\ I &= \int_{-1}^1 (1 - x)^l (1 + x)^l dx = \int_{-1}^1 (1 - x)^l \frac{d(1 + x)^{l+1}}{l + 1} = \\ &= (1 - x)^l \frac{(1 + x)^{l+1}}{l + 1} \Big|_{-1}^1 - \int_{-1}^1 \frac{(1 + x)^{l+1}}{l + 1} d(1 - x) = \\ &= \frac{l}{l + 1} \int_{-1}^1 (1 - x)^{l-1} (1 + x)^{l+1} dx \end{aligned}$$

Tiếp tục tích phân từng phần $(l - 1)$ lần, ta được :

$$I = \frac{l}{(l + 1)} \cdot \frac{(l - 1)}{(l + 2)} \cdot \frac{(l - 2)}{(l + 3)} \times \dots \times \frac{1}{2l} \int_{-1}^1 (1 + x)^{2l} dx =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{l}{((2l)!/l!)} \int_{-1}^1 (1+x)^{2l} dx = \frac{(l!)^2}{(2l)!} \int_{-1}^1 (1+x)^{2l} dx = \\
&= \frac{(l!)^2}{(2l)!} \int_0^2 \xi^{2l} d\xi, \quad \xi = 1+x = \\
&= \frac{(l!)^2}{(2l)!} \cdot \frac{2^{2l+1}}{2l+1} \\
I_l^0 &= \frac{(2l)!}{(2^l l!)^2} \mathbf{I} = \frac{(2l)!}{(2^l l!)^2} \cdot \frac{(l!)^2}{(2l)!} \cdot \frac{2^{2l+1}}{2l+1} = \frac{2}{2l+1} \\
I_l^m &= \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} I_l^0 = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} \\
N_{lm} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi I_l^m}} = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}
\end{aligned}$$

Hàm riêng của $\widehat{L}^2$ có thể viết :

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = f_{lm}(\theta) e^{im\varphi}, \quad f_{lm}(\theta) = N_{lm} P_l^m(\cos\theta)$$

Phương trình đối với $f_{l(m)}(\theta)$ phụ thuộc vào m^2 . Vì vậy nếu $f_{l,(-m)}(\theta)$, là một nghiệm thì $f_{l(m)}(\theta)$ cũng là một nghiệm và do đó $f_{l,(-m)}(\theta)$ và $f_{l(m)}(\theta)$ chỉ khác nhau một thừa số nhân :

$$f_{l(-m)}(\theta) = A f_{l(m)}(\theta)$$

Thay m bằng $-m$ ta có :

$$f_{l(m)}(\theta) = A f_{l(-m)}(\theta) = A^2 f_{l(m)}(\theta)$$

Từ đây suy ra $A^2 = 1$ hay $A = \pm 1$. Vậy

$$f_{l(m)}(\theta) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} f_{l|m|}(\theta)$$

$$\text{và} \quad Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} N_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

27. Gọi $\hat{F}$ là toán tử ecmit. Theo định nghĩa ta có :

$$\overline{F^2} = \frac{\int \psi^* \hat{F}^2 \psi dV}{\int |\psi|^2 dV} = \frac{\int \psi^* \hat{F}(\hat{F}\psi) dV}{\int |\psi|^2 dV}$$

Vì $\hat{F}$ là toán tử ecmit nên

$$\int \psi^* \hat{F}(\hat{F}\psi) dV = \int (\hat{F}\psi)^* (\hat{F}\psi) dV = \int |\hat{F}\psi|^2 dV.$$

Do ý nghĩa của hàm sóng mà $\int |\psi|^2 dV > 0$ và vì

$$\int |\hat{F}\psi|^2 dV \geq 0 \text{ nên ta được } \overline{F^2} \geq 0$$

28.

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{x} \psi(x) dx$$

$$\overline{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx$$

$$\overline{p_x} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{p}_x \psi(x) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{d}{dx} \psi(x) dx$$

$$\overline{p_x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{p}_x^2 \psi(x) dx = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) dx$$

Đặt $\psi(x) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2} + ikx}$ và $\psi^*(x) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2} - ikx}$ vào các biểu thức nằm dưới dấu tích phân nói trên và chú ý rằng

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \quad -\frac{\partial I}{\partial \alpha} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} x^2 dx, \quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} x dx = 0$$

Ta tìm được :

$$\bar{x} = 0, \quad \overline{x^2} = \frac{a^2}{2}, \quad \overline{\Delta x^2} = \overline{x^2} - (\bar{x})^2 = \frac{a^2}{2}$$

$$\bar{p}_x = \hbar k, \quad \overline{p_x^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2} + \hbar^2 k^2, \quad \overline{\Delta p_x^2} = \overline{p_x^2} - (\bar{p}_x)^2 = \frac{\hbar^2}{2a^2}$$

$$\sqrt{\overline{\Delta x^2} \overline{\Delta p_x^2}} = \frac{\hbar}{2}$$

29. a) Ở trong giếng thế có thế năng $U(x) = 0$ nên

$$\bar{E} = \frac{\overline{p_x^2}}{2m} = \frac{\overline{\Delta p_x^2} + (\bar{p}_x)^2}{2m}$$

$$\text{Từ đây suy ra : } \bar{E} \geq \frac{\overline{\Delta p_x^2}}{2m}$$

Theo hệ thức bất định

$$\overline{\Delta p_x^2} \overline{\Delta x^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad \text{hay} \quad \overline{\Delta p_x^2} \geq \frac{\hbar^2}{4\overline{\Delta x^2}}$$

$$\text{ta có :} \quad \bar{E} \geq \frac{\hbar^2}{8m\overline{\Delta x^2}}$$

Giá trị bé nhất của năng lượng ($E_{\min}$) được ước tính theo hệ thức:

$$E_{\min} = \frac{\hbar^2}{8m\Delta x_{\max}^2}$$

$$\Delta x = x - \bar{x}, \Delta x_{\max} = d - \bar{x}$$

$$\bar{x} = \int_0^d \psi_n^*(x)x\psi_n(x)dx = \frac{2}{d} \int_0^d x \sin^2\left(\frac{n\pi x}{d}\right) dx$$

$$= \frac{2}{d} \int_0^d x \frac{\left\{1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{d}\right)\right\}}{2} dx$$

$$= \frac{1}{d} \int_0^d x dx - \frac{1}{d} \int_0^d x \cos\left(\frac{2n\pi x}{d}\right) dx = \frac{d}{2} - 0$$

$$\overline{\Delta x_{\max}^2} = \left(d - \frac{d}{2}\right)^2 = \frac{d^2}{4}, E_{\min} = \frac{\hbar^2}{2md^2}$$

$$\text{Thực ra } E_{\min} = \frac{\hbar^2}{2md^2}$$

$$\text{b) } \bar{x} = \frac{d}{2}, \overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2} - (\bar{x})^2$$

$$\overline{x^2} = \int_0^d \psi_n^*(x)x^2\psi_n(x)dx,$$

$$\overline{x^2} = \frac{2}{d} \int_0^d x^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{d}\right) dx = \frac{1}{d} \int_0^d x^2 \left(1 - \cos\frac{2n\pi x}{d}\right) dx$$

$$= \frac{d^2}{3} - \frac{1}{2\pi n} \int_0^d x^2 d\left(\sin\left(\frac{2\pi n x}{d}\right)\right)$$

Thực hiện phép tính tích phân từng phần ta tìm được :

$$\overline{x^2} = \frac{d^2}{3} - \frac{d^2}{2\pi^2 n^2},$$

$$\overline{\Delta x^2} = \overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2} - (\bar{x})^2 = \frac{d^2}{12} \left(1 - \frac{6}{\pi^2 n^2} \right)$$

$$\begin{aligned} \bar{T} &= \int_0^d \psi_n^*(x) \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \psi_n(x) dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^d \psi_n^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) dx = \\ &= \frac{2}{d} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{d} \right)^2 \int_0^d \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{d} \right) dx \\ &= \frac{1}{d} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{d} \right)^2 \int_0^d \left(1 - \cos \frac{2n\pi x}{d} \right) dx = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{d} \right)^2 \end{aligned}$$

c) Gọi $\psi_p(x)$ là hàm riêng và p là trị riêng của toán tử xung lượng $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$, ta có :

$$\hat{p}\psi_p(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \psi_p(x) = p\psi_p(x)$$

$$\psi_p(x) = A e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

Từ điều kiện chuẩn hoá $\int \psi_p^*(x) \psi_p(x) dx = \delta(p' - p)$ suy ra

$$A = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}. \text{ Phân tích hàm } \psi_n(x) \text{ theo hệ hàm riêng } \psi_p(x) \text{ của}$$

toán tử $\hat{p}$:

$$\psi_n(x) = \int C_n(p) \psi_p(x) dp$$

Hệ số phân tích $C_n(p)$ được xác định như sau :

$$C_n(p) = \int_0^d \psi_n(x) \psi_p^*(x) dx = \int_0^d \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) \frac{e^{-i\frac{px}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{1/2}} dx$$

Biểu diễn

$$\sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) = \frac{e^{\frac{in\pi x}{d}} - e^{-\frac{in\pi x}{d}}}{2i}$$

rồi thực hiện phép tính tích phân với sự chú ý $e^{\pm in\pi} = 1$ khi n là số chẵn và $e^{\pm in\pi} = -1$ khi n là số lẻ ta tìm được

$$C_n(p) = \frac{n\hbar^{3/2} \sqrt{\pi d}}{(n\hbar\pi)^2 - p^2 d^2} \left(1 - e^{-i\frac{pd}{\hbar}} \right) \text{ khi } n \text{ chẵn.}$$

$$C_n(p) = \frac{n\hbar^{3/2} \sqrt{\pi d}}{(n\hbar\pi)^2 - p^2 d^2} \left(1 + e^{-i\frac{pd}{\hbar}} \right) \text{ khi } n \text{ lẻ.}$$

Chú ý rằng $\cos\left(\frac{pd}{\hbar}\right) = 1 - 2\sin^2\left(\frac{pd}{\hbar}\right)$, ta có :

$$W_n(p) = |C_n(p)|^2 = \frac{4\pi d \hbar^3 n^2}{(p^2 d^2 - n^2 \hbar^2 \pi^2)^2} \sin^2\left(\frac{pd}{2\hbar}\right) \text{ khi } n \text{ chẵn,}$$

$$W_n(p) = |C_n(p)|^2 = \frac{4\pi d \hbar^3 n^2}{(p^2 d^2 - n^2 \hbar^2 \pi^2)^2} \cos^2\left(\frac{pd}{2\hbar}\right) \text{ khi } n \text{ lẻ.}$$

xác suất tìm thấy hạt có xung lượng nằm trong khoảng từ p đến $p + dp$ bằng $W_n(p)dp$.

Đối với trạng thái cơ bản ($n = 1$) ta có :

$$w_1(p)dp = \frac{4\pi d\hbar^3}{(p^2d^2 - \hbar^2\pi^2)^2} \cos^2\left(\frac{pd}{2\hbar}\right) dp.$$

30. a) Năng lượng trung bình của dao động tử điều hoà một chiều được xác định bằng công thức :

$$\bar{E} = \int \psi^*(x) \left(\frac{\widehat{p_x^2}}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi(x) dx = \overline{\frac{p_x^2}{2m}} + \frac{m\omega^2}{2} \overline{x^2}$$

Chú ý rằng $\overline{p_x^2} = (\overline{p_x})^2 + \Delta p_x^2$, $\overline{x^2} = (\overline{x})^2 + \Delta x^2$

Ta nhận được :

$$\bar{E} \geq \frac{\Delta p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \Delta x^2$$

Dùng hệ thức bất định $\Delta p_x^2 \geq \frac{\hbar^2}{4\Delta x^2}$ ta có :

$$\bar{E} \geq \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2} + \frac{m\omega^2}{2} \Delta x^2$$

$$\text{Đặt } \xi = \Delta x^2, \varepsilon = \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2} + \frac{m\omega^2}{2} \Delta x^2 = \frac{\hbar^2}{8m\xi} + \frac{m\omega^2}{2} \xi$$

Tìm giá trị cực tiểu của ε ta xác định giá trị bé nhất của $\bar{E}$.

$$\frac{d\varepsilon}{d\xi} = -\frac{\hbar^2}{8m\xi^2} + \frac{m\omega^2}{2} = 0 \rightarrow \xi = \xi_0 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\xi^2} = \frac{\hbar^2}{4m\xi^3}, \left. \frac{d^2\varepsilon}{d\xi^2} \right|_{\xi=\xi_0} = \frac{2m^2\omega^3}{\hbar} > 0$$

Vậy ε có cực tiểu tại điểm $\xi = \xi_0 = \frac{\hbar}{2m\omega}$

$$\varepsilon_{\min} = \frac{\hbar^2}{8m\xi_0} + \frac{m\omega^2}{2}\xi_0 = \frac{\hbar^2}{8m} \frac{2m\omega}{\hbar} + \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$\bar{E} \geq \varepsilon_{\min} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Vậy mức năng lượng thấp nhất có thể có của dao động tử điều hoà một chiều là $E_{\min} = \frac{\hbar\omega}{2}$.

$$b) \overline{x^n} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) x^n \psi_0(x) dx \quad n = 1, 2, 3, 4.$$

Dùng các tích phân :

$$I_0(a) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad I_2(a) = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = -\frac{\partial I_0}{\partial a}$$

$$I_4(a) = \int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-ax^2} dx = -\frac{\partial I_2}{\partial a}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} x dx = 0$$

Ta tìm được :

$$\bar{x} = 0, \quad \overline{x^2} = \frac{1}{2a} = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad \overline{x^3} = 0, \quad \overline{x^4} = \frac{3}{4a^2} = \frac{3}{4} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2$$

$$c) \text{ Dễ thấy rằng } \overline{x^2} \neq (\bar{x})^2 \text{ và } \overline{x^4} \neq (\overline{x^2})^2$$

$$31. a) \bar{r} = \int \psi^*(r) r \psi(r) dV, \quad dV = r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi$$

$$\bar{r} = \frac{1}{\pi a^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{\infty} r^3 e^{-\frac{2r}{a}} dr = \frac{4}{a^3} \int_0^{\infty} r^3 e^{-\frac{2r}{a}} dr$$

Chú ý rằng

$$I_0(\alpha) = \int_0^{\infty} e^{-\alpha r} dr = \frac{1}{\alpha},$$

$$I_1(\alpha) = \int_0^{\infty} e^{-\alpha r} r dr = -\frac{\partial I_0}{\partial \alpha} = \frac{1}{\alpha^2},$$

$$I_2(\alpha) = \int_0^{\infty} e^{-\alpha r} r^2 dr = -\frac{\partial I_1}{\partial \alpha} = \frac{2}{\alpha^3},$$

$$I_3(\alpha) = \int_0^{\infty} r^3 e^{-\alpha r} dr = -\frac{\partial I_2}{\partial \alpha} = \frac{6}{\alpha^4},$$

$$I_4(\alpha) = \int_0^{\infty} r^4 e^{-\alpha r} dr = -\frac{\partial I_3}{\partial \alpha} = \frac{24}{\alpha^5} \text{ với } \alpha = \frac{2}{a}$$

Ta tìm được :

$$\bar{r} = \frac{3}{2}a, \quad \bar{r}^2 = \frac{4}{a^3} \int_0^{\infty} r^4 e^{-\frac{2r}{a}} dr = 3a^2.$$

b) Phân tích hàm $\psi(r)$ theo hệ hàm riêng $\psi_{\vec{p}}(\vec{r})$ của toán tử xung lượng $\hat{p} = -i\hbar\nabla$

$$\psi(r) = \int C(\vec{p}) \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) d\vec{p}, \quad d\vec{p} = dp_x dp_y dp_z$$

trong đó

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}$$

Xác suất để electron ở trạng thái cơ bản có xung lượng nằm

trong khoảng $p_x \rightarrow p_x + dp_x$, $p_y \rightarrow p_y + dp_y$, $p_z \rightarrow p_z + dp_z$
 hay $p \rightarrow p + d\vec{p}$ bằng $dW(\vec{p})$:

$$dW(\vec{p}) = |C(\vec{p})|^2 d\vec{p}$$

Hệ số phân tích $C(\vec{p})$ được xác định từ công thức :

$$\begin{aligned} C(\vec{p}) &= \int \psi(\vec{r}) \psi_{\vec{p}}^*(\vec{r}) dV = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3} (2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{-\frac{r}{a}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} dV \end{aligned}$$

Chọn trục Oz theo phương $\vec{p}$ thì trong toạ độ cầu ta có :

$$\begin{aligned} \vec{p} \cdot \vec{r} &= pr \cos \theta, dV = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi \\ C(\vec{p}) &= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3} (2\pi\hbar)^{3/2}} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi e^{-\frac{r}{a}} r^2 dr \times \\ &\times \int_0^\pi e^{-\frac{i}{\hbar} pr \cos \theta} \sin \theta d\theta = \frac{2\pi}{\sqrt{\pi a^3} (2\pi\hbar)^{3/2}} \times \\ &\times \int_0^\infty e^{-\frac{r}{a}} r^2 dr \int_0^\pi e^{-\frac{i}{\hbar} pr \cos \theta} d(\cos \theta) \\ &= \frac{2\pi i \hbar}{\rho \sqrt{\pi a^3} (2\pi\hbar)^{3/2}} \int_0^\infty r \left\{ e^{-\frac{r}{a} - \frac{i pr}{\hbar}} - e^{-\frac{r}{a} + \frac{i pr}{\hbar}} \right\} dr \end{aligned}$$

Chú ý rằng

$$\int_0^\infty r e^{-\alpha r} dr = \frac{1}{\alpha^2}$$

ta có :

$$C(\vec{p}) = \frac{8\pi\hbar^4 a^3}{\sqrt{\pi a^3} (2\pi\hbar)^{3/2} (\hbar^2 + a^2 p^2)^2}$$

Trong toạ độ cầu của không gian xung lượng p_x, p_y, p_z thì $dp_x dp_y dp_z \rightarrow 4\pi p^2 dp$. Xác suất tìm electron có độ lớn xung lượng nằm trong khoảng $p \rightarrow p + dp$ bằng $dW(p)$

$$dW(p) = |C(p)|^2 4\pi p^2 dp = \frac{32a^3 \hbar^5}{\pi(\hbar^2 + a^2 p^2)^4} p^2 dp.$$

$$32. \widehat{L}_z \psi(\varphi) = -i\hbar \frac{\partial \psi(\varphi)}{\partial \varphi} = L_z \psi(\varphi)$$

$$\psi_m(\varphi) = A e^{im\varphi}, L_z = m\hbar, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng

$$\int_0^{2\pi} |\psi(\varphi)|^2 d\varphi = 1$$

$$\text{ta xác định được } A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Ta biết

$$\widehat{L}_x = \frac{1}{i\hbar} \{ \widehat{L}_y \widehat{L}_z - \widehat{L}_z \widehat{L}_y \}$$

$$\widehat{L}_y = \frac{1}{i\hbar} \{ \widehat{L}_z \widehat{L}_x - \widehat{L}_x \widehat{L}_z \}$$

$$\overline{L}_x = \int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi) \widehat{L}_x \psi_m(\varphi) d\varphi$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{i\hbar} \int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi) \{ \hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y \} \psi_m(\varphi) d\varphi \\
&= \frac{1}{i\hbar} \left\{ \int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi) \hat{L}_y \hat{L}_z \psi_m(\varphi) d\varphi - \right. \\
&\quad \left. - \int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi) \hat{L}_z \hat{L}_y \psi_m(\varphi) d\varphi \right\} = \\
&= \frac{1}{i\hbar} \left\{ m\hbar \times \int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi) \hat{L}_y \psi_m(\varphi) d\varphi - \int_0^{2\pi} (\hat{L}_z \psi_m)^* \hat{L}_y \psi_m(\varphi) d\varphi \right\} \\
&= \frac{m}{i} \left\{ \int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi) \hat{L}_y \psi_m(\varphi) d\varphi - \int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi) \hat{L}_y \psi_m(\varphi) d\varphi \right\} = 0
\end{aligned}$$

Bằng cách chứng minh tương tự ta có $\overline{L_y} = 0$.

Chú ý rằng có thể tính $\overline{L_x}$ và $\overline{L_y}$ một cách trực tiếp như sau :

$$\begin{aligned}
\overline{L_x} &= \int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi) \hat{L}_x \psi_m(\varphi) d\varphi = \\
&= \frac{i\hbar}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} \left\{ \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\varphi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right\} e^{im\varphi} d\varphi \\
&= -\frac{\hbar m}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cot\theta \cos\varphi d\varphi = 0
\end{aligned}$$

33. Trạng thái của rô-ta-tô phẳng được mô tả bằng hàm sóng

$$\psi(\varphi) = A \cos^2 \varphi$$

Từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng

$$\int_0^{2\pi} |\psi(\varphi)|^2 d\varphi = A^2 \int_0^{2\pi} \cos^4 \varphi d\varphi = 1$$

ta xác định hệ số chuẩn hoá A.

$$\cos \varphi = \frac{1}{2}(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}), \quad \cos^2 \varphi = \frac{1}{4}(e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi} + 2)$$

$$\cos^4 \varphi = (\cos^2 \varphi)^2 = \frac{3}{8} + (e^{4i\varphi} + e^{-4i\varphi} + 4e^{-2i\varphi} + 4e^{2i\varphi})$$

$$\int_0^{2\pi} \cos^4 \varphi d\varphi = \frac{3}{8} \cdot 2\pi + \int_0^{2\pi} (e^{4i\varphi} + e^{-4i\varphi} + 4e^{-2i\varphi} + 4e^{2i\varphi}) d\varphi$$

Chú ý rằng

$$\int_0^{2\pi} e^{\pm ik\varphi} d\varphi = \begin{cases} 2\pi & \text{ khi } k = 0 \\ 0 & \text{ khi } k \neq 0 \end{cases}$$

ta có :

$$\int_0^{2\pi} \cos^4 \varphi d\varphi = \frac{3\pi}{4} \quad \text{và} \quad A = \frac{2}{\sqrt{3\pi}}$$

Các giá trị có thể có của mômen L_z được xác định bằng các số hạng khai triển khác không của hàm sóng đã cho $\psi(\varphi)$ theo các hàm riêng $\psi_m(\varphi)$ của toán tử $\widehat{L_z}$.

$$\psi(\varphi) = A \cos^2 \varphi = \sum_m C_m \psi_m(\varphi)$$

trong đó $\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$. Hệ số phân tích C_m được xác định từ công thức :

$$\begin{aligned}
C_m &= \int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi) \psi(\varphi) d\varphi = \int_0^{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im\varphi} A \cos^2 \varphi d\varphi \\
&= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} \frac{1}{4} (e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi} + 2) d\varphi \\
&= \frac{1}{2\pi\sqrt{6}} \int_0^{2\pi} \left\{ e^{i(2-m)\varphi} + e^{-i(2+m)\varphi} + 2e^{-im\varphi} \right\} d\varphi \\
&= \frac{1}{2\pi\sqrt{6}} \{ 2\pi\delta_{m,2} + 2\pi\delta_{m,-2} + 2.2\pi\delta_{m,0} \} \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}} \{ \delta_{m,2} + \delta_{m,-2} + 2\delta_{m,0} \}
\end{aligned}$$

Từ đây ta có :

$$C_2 = \frac{1}{\sqrt{6}}, C_{-2} = \frac{1}{\sqrt{6}}, C_0 = \frac{2}{\sqrt{6}}$$

$W(m) = |C_m|^2$ là xác suất tìm thấy hạt có $L_z = m\hbar$.

$$\psi(\varphi) = C_2\psi_2(\varphi) + C_{-2}\psi_{-2}(\varphi) + C_0\psi_0(\varphi)$$

Các giá trị của $L_z = m\hbar$ có thể có ứng với $m = 2$, $m = -2$ và $m = 0$,
tức là : $L_z = 2\hbar$, $L_z = -2\hbar$ và $L_z = 0$.

Các xác suất tương ứng :

$$W(2) = |C_2|^2 = \frac{1}{6}, W(-2) = |C_{-2}|^2 = \frac{1}{6}$$

$$W(0) = |C_0|^2 = \frac{4}{6} = \frac{2}{3}$$

Trị trung bình của L_z

$$\begin{aligned}\overline{L_z} &= \sum_m m \hbar W(m) = 2\hbar W(2) - 2\hbar W(-2) + 0 \cdot \hbar W(0) \\ &= 2\hbar \cdot \frac{1}{6} - 2\hbar \cdot \frac{1}{6} + 0 = 0\end{aligned}$$

Có thể tính trực tiếp $\overline{L_x}$ bằng cách như sau :

$$\begin{aligned}\overline{L_z} &= \int_0^{2\pi} \psi^*(\varphi) \widehat{L_z} \psi(\varphi) d\varphi = -i\hbar A^2 \int_0^{2\pi} \cos^2 \varphi \frac{d}{d\varphi} (\cos^2 \varphi) d\varphi = \\ &= -2i\hbar A^2 \int_0^{2\pi} \cos^3 \varphi d(\cos \varphi) = -\frac{i\hbar A^2}{2} \cos^4 \varphi \Big|_0^{2\pi} = 0\end{aligned}$$

34. a) Ở trạng thái $\psi(x) = Ax(d - x)$ năng lượng của hạt không có giá trị xác định. Ta biết hàm sóng ở trạng thái dừng của hạt trong giếng thế là $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{d}} \times \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right)$ ($n = 1, 2, 3, \dots$)

tương ứng với mức năng lượng $E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\pi^2 n^2}{d^2}$. Khai triển hàm

$\psi(x)$ theo $\psi_n(x)$

$$\psi(x) = \sum_n C_n \psi_n(x).$$

xác suất tìm hạt ở trạng thái $\psi_n(x)$ với năng lượng E_n bằng

$W_n = |C_n|^2$, trong đó :

$$C_n = \int_0^d \psi_n^*(x) \psi(x) dx$$

$$= \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot A \int_0^d x(d-x) \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) dx$$

Từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng $\psi(x)$ ta xác định được

$$A = 1/\left(\int_0^d x^2(d-x)^2 dx\right)^{1/2} = (30d^{-5})^{1/2}$$

Thực hiện các phép tính tích phân từng phần với sự chú ý

$$\sin kx dx = -\frac{1}{k} d(\cos kx), \quad \cos kx dx = \frac{1}{k} d(\sin kx) \quad \text{và} \quad \cos n\pi = (-1)^n,$$

$\sin n\pi = 0$ ta tìm được :

$$\int_0^d x^2 \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) dx = -\frac{d^3}{n\pi} (-1)^n + \frac{2d^3}{(n\pi)^3} [(-1)^n - 1],$$

$$\int_0^d x \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) dx = -\frac{d^2}{n\pi} (-1)^n,$$

$$C_n = \frac{2\sqrt{60}}{\pi^3} \frac{[-(-1)^n]}{n^3}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$C_n = \begin{cases} \frac{4}{3} \sqrt{10} \frac{1}{n^3} & \text{khi } n \text{ lẻ} \\ 0 & \text{khi } n \text{ chẵn} \end{cases}$$

$$W_n = |C_n|^2 = \begin{cases} \frac{960}{\pi^6 n^6} & \text{khi } n \text{ lẻ} \\ 0 & \text{khi } n \text{ chẵn} \end{cases}$$

$$b) \quad \bar{E} = \sum_{n=1}^{\infty} E_n W_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} \frac{960}{\pi^6} \sum_{n=1,3,5}^{\infty} \frac{1}{n^4}$$

$$= \frac{h^2 \pi^2}{2md^2} \frac{960}{\pi^6} \frac{\pi^4}{96} = \frac{5h^2}{md^2}$$

$$\overline{E^2} = \sum_{n=1}^{\infty} E_n^2 W_n = \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \left(\frac{\pi^2 h^2 n^2}{2md^2} \right)^2 \frac{960}{\pi^6 n^6} =$$

$$\left(\frac{\pi^2 h^2}{2md^2} \right)^2 \frac{960}{\pi^6} \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \left(\frac{\pi^2 h^2}{2md^2} \right)^2 \frac{960}{\pi^6} \frac{\pi^2}{8} = \frac{30h^4}{m^2 d^4}$$

$$\Delta E = \sqrt{(E - (\overline{E}))^2} = \sqrt{E^2 - (\overline{E})^2} = \frac{h^2 \sqrt{5}}{md^2}$$

có thể tính trực tiếp từ các công thức :

$$\begin{aligned} \overline{E} &= \int_0^d \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) dx, \quad \overline{E^2} = \int_0^d \psi^*(x) \hat{H}^2 \psi(x) dx = \\ &= \int_0^d |\hat{H} \psi(x)|^2 dx \end{aligned}$$

trong đó $\hat{H} = -\frac{h^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$

35. Ta biết :

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}]$$

$$\frac{d\hat{B}}{dt} = \frac{\partial \hat{B}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}\hat{B} - \hat{B}\hat{H}]$$

Đặt $\hat{F} = \hat{A}\hat{B}$ và chú ý $\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}\hat{F} - \hat{F}\hat{H}]$ ta có :

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}(\hat{A}\hat{B}) &= \frac{\partial(\hat{A}\hat{B})}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\hat{B}\hat{H}] \\
&= \frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\hat{B} + \hat{A}\frac{\partial\hat{B}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\hat{B}\hat{H} + \hat{A}\hat{H}\hat{B} - \hat{A}\hat{H}\hat{B}] \\
&= \frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\hat{B} + \hat{A}\frac{\partial\hat{B}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}]\hat{B} + \frac{i}{\hbar}\hat{A}[\hat{H}\hat{B} - \hat{B}\hat{H}] \\
&= \left(\frac{\partial\hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}] \right) \hat{B} + \hat{A} \left(\frac{\partial\hat{B}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \times \right. \\
&\quad \left. \times [\hat{H}\hat{B} - \hat{B}\hat{H}] \right) = \frac{d\hat{A}}{dt}\hat{B} + \hat{A}\frac{d\hat{B}}{dt}
\end{aligned}$$

Vậy $\frac{d}{dt}(\hat{A}\hat{B}) = \frac{d\hat{A}}{dt}\hat{B} + \hat{A}\frac{d\hat{B}}{dt}$

36. $\bar{\hat{p}} = \int \psi^*(\vec{r}) \hat{p} \psi(\vec{r}) dV$

$$\hat{p} = m \frac{d\vec{r}}{dt} = m\vec{v} = \frac{mi}{\hbar} [\hat{H}\vec{r} - \vec{r}\hat{H}]$$

$$\bar{\hat{p}} = \int \frac{mi}{\hbar} \psi^*(\vec{r}) [\hat{H}\vec{r} - \vec{r}\hat{H}] \psi(\vec{r}) dV$$

Ở trạng thái dừng ta có : $\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$

Toán tử $\hat{H}$ là ecmit nên $\int \psi^* \hat{H} \vec{r} \psi dV = \int (\hat{H}\psi)^* \vec{r} \psi dV$

Vậy

$$\bar{\hat{p}} = \frac{im}{\hbar} \left\{ \int (\hat{H}\psi(\vec{r}))^* \vec{r} \psi(\vec{r}) dV - \int \psi^*(\vec{r}) \vec{r} \hat{H} \psi(\vec{r}) dV \right\}$$

$$= \frac{i\hbar}{h} E \left\{ \int \psi^*(\vec{r}) \hat{r} \psi(\vec{r}) dV - \int \psi^*(\vec{r}) \hat{r} \psi(\vec{r}) dV \right\} = 0$$

$$\bar{\vec{p}} = 0$$

37. Điều kiện chuẩn hoá hàm sóng $\psi(\vec{r}, t)$ đúng cho mọi thời điểm nên ta có :

$$\int \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) dV = \int \psi^*(\vec{r}, 0) \psi(\vec{r}, 0) dV = 1$$

$$\begin{aligned} & \int [\hat{S}(t) \psi(\vec{r}, 0)]^* \hat{S}(t) \psi(\vec{r}, 0) dV = \\ &= \int [\hat{S}^*(t) \hat{S}(t) \psi(\vec{r}, 0)]^* \psi(\vec{r}, 0) dV = \\ &= \int \psi^*(\vec{r}, 0) \psi(\vec{r}, 0) dV = 1 \end{aligned}$$

Từ đây suy ra $\hat{S}^*(t) \hat{S}(t) = 1$ hay $\hat{S} = \hat{S}^{-1}$

$$\begin{aligned} \text{a) } \bar{L} &= \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{L} \psi(\vec{r}, t) dV = \\ &= \int (\hat{S}(t) \psi(\vec{r}, 0))^* \hat{L} \hat{S}(t) \psi(\vec{r}, 0) dV \\ &= \int (\hat{S}(t) \psi(\vec{r}, 0))^* \hat{S} \hat{S}^{-1} \hat{L} \hat{S} \psi(\vec{r}, 0) dV \\ &= \int (\hat{S}^* \hat{S} \psi(\vec{r}, 0))^* \hat{S}^{-1} \hat{L} \hat{S} \psi(\vec{r}, 0) dV \\ &= \int \psi^*(\vec{r}, 0) \hat{S}^{-1}(t) \hat{L} \hat{S}(t) \psi(\vec{r}, 0) dV = \\ &= \int \psi^*(\vec{r}, 0) \hat{\mathcal{L}}(t) \psi(\vec{r}, 0) dV \end{aligned}$$

trong đó $\hat{\mathcal{L}}(t) = \hat{S}^{-1}(t) \hat{L} \hat{S}(t)$.

$$\begin{aligned}
b) \quad \frac{d(\bar{L})}{dt} &= \int \psi^*(\vec{r}, t) \frac{d\hat{L}}{dt} \psi(\vec{r}, t) dV \\
\frac{d(\bar{L})}{dt} &= \int (\hat{S}\psi(\vec{r}, 0))^* \widehat{S S^{-1}} \frac{d\hat{L}}{dt} \hat{S}\psi(\vec{r}, 0) dV \\
&= \int (\widehat{S^+} \hat{S}\psi(\vec{r}, 0))^* \widehat{S^{-1}} \frac{d\hat{L}}{dt} \hat{S}\psi(\vec{r}, 0) dV \\
&= \int \psi^*(\vec{r}, 0) \widehat{S^{-1}} \frac{d\hat{L}}{dt} \hat{S}\psi(\vec{r}, 0) dV \\
\bar{L} &= \int \psi^*(\vec{r}, 0) \hat{\mathcal{P}}(t) \psi(\vec{r}, 0) dV \\
\frac{d(\bar{L})}{dt} &= \int \psi^*(\vec{r}, 0) \frac{d\hat{\mathcal{P}}(t)}{dt} \psi(\vec{r}, 0) dV
\end{aligned}$$

Dễ dàng thấy rằng :

$$\begin{aligned}
\frac{d\hat{\mathcal{P}}(t)}{dt} &= \widehat{S^{-1}}(t) \frac{d(\hat{L})}{dt} \hat{S}(t) = \widehat{S^{-1}} \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{L} - \hat{L}\hat{H}) \hat{S} \\
&= \frac{i}{\hbar} \left\{ \widehat{S^{-1}} \hat{H} \hat{S} \widehat{S^{-1}} \hat{L} \hat{S} - \widehat{S^{-1}} \hat{L} \hat{S} \widehat{S^{-1}} \hat{H} \hat{S} \right\} \\
&= \frac{i}{\hbar} \left\{ \widehat{\mathcal{H}} \widehat{\mathcal{P}} - \widehat{\mathcal{P}} \widehat{\mathcal{H}} \right\}
\end{aligned}$$

trong đó $\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{S^{-1}} \hat{H} \hat{S}$, $\widehat{\mathcal{P}} = \widehat{S^{-1}} \hat{L} \hat{S}$

$$c) \quad \hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = i\hat{N}$$

$$\widehat{S^{-1}}(\hat{L}\hat{M})\hat{S} - \widehat{S^{-1}}(\hat{M}\hat{L})\hat{S} = i\widehat{S^{-1}}\hat{N}\hat{S}$$

$$\widehat{S^{-1}}\hat{L}\hat{S}\widehat{S^{-1}}\hat{M}\hat{S} - \widehat{S^{-1}}\hat{M}\hat{S}\widehat{S^{-1}}\hat{L}\hat{S} = i\widehat{S^{-1}}\hat{N}\hat{S}$$

$$\widehat{\mathcal{P}} \cdot \widehat{\mathcal{M}} - \widehat{\mathcal{M}} \widehat{\mathcal{P}} = i \cdot \widehat{\mathcal{N}}$$

$$\widehat{U} = \widehat{S}^{-1} \widehat{M} \widehat{S}, \quad \widehat{V} = \widehat{S}^{-1} \widehat{N} \widehat{S}$$

$$38. a) \quad \hat{v} = \frac{d\hat{r}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{r} - \hat{r}\hat{H})$$

$$= \frac{i}{2m\hbar} \left[\left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \hat{r} - \hat{r} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \right]$$

$$\left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 = \widehat{p^2} - \frac{e}{c} \hat{p} \vec{A} - \frac{e}{c} \vec{A} \hat{p} + \frac{e^2}{c^2} \vec{A}^2$$

$$\hat{p} \vec{A} - \vec{A} \hat{p} = -i\hbar \nabla \vec{A} = -i\hbar \text{div} \vec{A}$$

$$\hat{p} \vec{A} = \vec{A} \hat{p} - i\hbar \text{div} \vec{A}$$

$$\left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 = \widehat{p^2} - \frac{2e\vec{A}\hat{p}}{c} + i\hbar \frac{e}{c} \text{div} \vec{A} + \frac{e^2}{c^2} (\vec{A})^2$$

$$\widehat{p^2} \hat{r} - \hat{r} \widehat{p^2} = (\widehat{p_x^2} + \widehat{p_y^2} + \widehat{p_z^2})(i\vec{x} + j\vec{y} + k\vec{z}) -$$

$$- (i\vec{x} + j\vec{y} + k\vec{z})(\widehat{p_x^2} + \widehat{p_y^2} + \widehat{p_z^2}) = i(\widehat{p_x^2} x -$$

$$x\widehat{p_x^2}) + j(\widehat{p_y^2} y - y\widehat{p_y^2}) + k(\widehat{p_z^2} z - z\widehat{p_z^2}) =$$

$$- 2i\hbar(i\widehat{p_x} + j\widehat{p_y} + k\widehat{p_z}) = -2i\hbar \hat{p}$$

$$(\vec{A}\hat{p})\hat{r} - \hat{r}(\vec{A}\hat{p}) = (A_x \widehat{p_x} + A_y \widehat{p_y} + A_z \widehat{p_z})(i\vec{x} +$$

$$j\vec{y} + k\vec{z}) - (i\vec{x} + j\vec{y} + k\vec{z})(A_x \widehat{p_x} + A_y \widehat{p_y} + A_z \widehat{p_z}) =$$

$$- i(A_x \widehat{p_x} x - x A_x \widehat{p_x}) + j(A_y \widehat{p_y} y - y A_y \widehat{p_y}) + k(A_z \widehat{p_z} z - z A_z \widehat{p_z}) =$$

$$= i\vec{A}_x (\widehat{p_x} x - x\widehat{p_x}) + j\vec{A}_y (\widehat{p_y} y - y\widehat{p_y}) + k\vec{A}_z (\widehat{p_z} z - z\widehat{p_z}) =$$

$$= i\hbar i\bar{A}_x - i\hbar j\bar{A}_y - i\hbar k\bar{A}_z = -i\hbar\bar{A}.$$

$$\begin{aligned}\hat{v} &= \frac{i}{2\hbar m} \left\{ \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \bar{\vec{A}} \right)^2 \vec{r} - \vec{r} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \bar{\vec{A}} \right)^2 \right\} = \\ &= \frac{i}{2\hbar m} \left\{ (\hat{p}^2 \vec{r} - \vec{r} \hat{p}^2) - \frac{2e}{c} [(\bar{\vec{A}} \hat{\vec{p}}) \vec{r} - \vec{r} (\bar{\vec{A}} \hat{\vec{p}})] \right\} \\ &= \frac{i}{2\hbar m} \left\{ -2i\hbar \hat{\vec{p}} - \frac{2e}{c} [-i\hbar \bar{\vec{A}}] \right\} = \frac{1}{m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \bar{\vec{A}} \right) \\ \hat{v} &= \frac{1}{m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \bar{\vec{A}} \right).\end{aligned}$$

$$b) \quad \hat{v}_x = \frac{1}{m} \left(\hat{p}_x - \frac{e}{c} A_x \right), \quad \hat{v}_y = \frac{1}{m} \left(\hat{p}_y - \frac{e}{c} A_y \right),$$

$$\hat{v}_z = \frac{1}{m} \left(\hat{p}_z - \frac{e}{c} A_z \right)$$

$$\begin{aligned}\hat{v}_x \hat{v}_y - \hat{v}_y \hat{v}_x &= \frac{1}{m^2} \left\{ \left(\hat{p}_x - \frac{e}{c} A_x \right) \left(\hat{p}_y - \frac{e}{c} A_y \right) - \right. \\ &\quad \left. - \left(\hat{p}_y - \frac{e}{c} A_y \right) \left(\hat{p}_x - \frac{e}{c} A_x \right) \right\} = \frac{e}{m^2 c} [\hat{p}_y A_x - A_x \hat{p}_y] - \\ &\quad - \frac{e}{m^2 c} [\hat{p}_x A_y - A_y \hat{p}_x] = \frac{e}{m^2 c} \left[-i\hbar \frac{\partial A_x}{\partial y} - \frac{e}{m^2 c} \times \right. \\ &\quad \left. \times -i\hbar \frac{\partial A_y}{\partial x} \right] = \frac{i\hbar e}{m^2 c} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) = \frac{i\hbar e}{m^2 c} B_z\end{aligned}$$

$$\text{trong đó } B_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}$$

Đưa vào vectơ $\vec{B} = i\vec{B}_x + j\vec{B}_y + k\vec{B}_z = \text{rot}\vec{A}$ với

$$B_x = \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}, B_y = \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}, B_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}$$

ta tìm được : $\widehat{v}_x \widehat{v}_y - \widehat{v}_y \widehat{v}_x = \frac{i\hbar e}{m^2 c} B_z$

$$\widehat{v}_y \widehat{v}_z - \widehat{v}_z \widehat{v}_y = \frac{i\hbar e}{m^2 c} B_x$$

$$\widehat{v}_z \widehat{v}_x - \widehat{v}_x \widehat{v}_z = \frac{i\hbar e}{m^2 c} B_y$$

hay $[\hat{\vec{v}} \wedge \hat{\vec{v}}] = \frac{ie\hbar}{m^2 c} \vec{B}$

$\vec{B} = \text{rot}\vec{A}$ là vectơ cảm ứng từ.

c) $m \frac{d\hat{\vec{v}}}{dt} = m \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{\vec{v}} - \hat{\vec{v}}\hat{H}) + m \frac{\partial \hat{\vec{v}}}{\partial t}$

$$\hat{H} = \frac{m\widehat{v}^2}{2} + e\varphi = \frac{m}{2}(\widehat{v}_x^2 + \widehat{v}_y^2 + \widehat{v}_z^2) + e\varphi$$

$$m \frac{d\hat{\vec{v}}}{dt} = \frac{m^2 i}{2\hbar} (\widehat{v}^2 \hat{\vec{v}} - \hat{\vec{v}} \widehat{v}^2) + \frac{me}{\hbar} (\varphi \hat{\vec{v}} - \hat{\vec{v}} \varphi) + m \frac{\partial \hat{\vec{v}}}{\partial t}$$

$$\begin{aligned} \widehat{v}^2 - \hat{\vec{v}} \widehat{v}^2 &= (\widehat{v}_x^2 + \widehat{v}_y^2 + \widehat{v}_z^2)(i\widehat{v}_x + j\widehat{v}_y + k\widehat{v}_z) - \\ &\quad - (i\widehat{v}_x + j\widehat{v}_y + k\widehat{v}_z)(\widehat{v}_x^2 + \widehat{v}_y^2 + \widehat{v}_z^2) = \\ &= i \left\{ (\widehat{v}_y^2 \widehat{v}_x - \widehat{v}_x \widehat{v}_y^2) + (\widehat{v}_z^2 \widehat{v}_x - \widehat{v}_x \widehat{v}_z^2) \right\} + \end{aligned}$$

$$+ j \left\{ (\widehat{v_x^2} \widehat{v_y} - \widehat{v_y} \widehat{v_x^2}) + (\widehat{v_z^2} \widehat{v_y} - \widehat{v_y} \widehat{v_z^2}) \right\} +$$

$$+ k \left\{ (\widehat{v_x^2} \widehat{v_z} - \widehat{v_z} \widehat{v_x^2}) + (\widehat{v_y^2} \widehat{v_z} - \widehat{v_z} \widehat{v_y^2}) \right\}.$$

$$\widehat{v_y^2} \widehat{v_x} - \widehat{v_x} \widehat{v_y^2} = \widehat{v_y^2} \widehat{v_x} - \left(\widehat{v_y} \widehat{v_x} + \frac{i\hbar e}{m^2 c} B_z \right) \widehat{v_y} =$$

$$= \widehat{v_y^2} \widehat{v_x} - \widehat{v_y} \widehat{v_x} \widehat{v_y} - \frac{i\hbar e}{m^2 c} \widehat{v_y} B_z =$$

$$= \widehat{v_y^2} \widehat{v_z} - \widehat{v_y} (\widehat{v_y} \widehat{v_x} + \frac{i\hbar e}{m^2 c} B_z) - \frac{-i\hbar e}{m^2 c} \widehat{v_y} B_z =$$

$$= -\frac{2i\hbar e}{m^2 c} \widehat{v_y} B_z.$$

$$\widehat{v_x} \widehat{v_y^2} - \widehat{v_y^2} \widehat{v_x} = \frac{2i\hbar e}{m^2 c} \widehat{v_y} B_z,$$

$$\widehat{v_y} \widehat{v_z^2} - \widehat{v_z^2} \widehat{v_y} = \frac{2i\hbar e}{m^2 c} \widehat{v_z} B_x,$$

$$\widehat{v_z} \widehat{v_x^2} - \widehat{v_x^2} \widehat{v_z} = \frac{2i\hbar e}{m^2 c} \widehat{v_x} B_y,$$

$$\widehat{v_x^2} \widehat{v_y} - \widehat{v_y} \widehat{v_x^2} = \frac{2i\hbar e}{m^2 c} \widehat{v_x} B_z,$$

$$\widehat{v_y^2} \widehat{v_z} - \widehat{v_z} \widehat{v_y^2} = \frac{2i\hbar e}{m^2 c} \widehat{v_y} B_x,$$

$$\widehat{v_z^2} \widehat{v_x} - \widehat{v_x} \widehat{v_z^2} = \frac{2i\hbar e}{m^2 c} \widehat{v_z} B_y$$

$$\frac{im^2}{2\hbar}(\hat{\mathbf{v}}^2\hat{\mathbf{v}} - \hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{v}}^2) = \frac{e}{c} \left\{ j(\hat{v}_y B_z - \hat{v}_z B_y) + i(\hat{v}_z B_x - \hat{v}_x B_z) + \right. \\ \left. + k(\hat{v}_x B_y - \hat{v}_y B_x) \right\} = \frac{e}{c} [\hat{\mathbf{v}} \wedge \vec{B}]$$

$$\varphi(\vec{r})\hat{\mathbf{v}} - \hat{\mathbf{v}}\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{m} \left\{ (\varphi\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}\varphi) - \frac{e}{c}(\varphi\vec{A} - \vec{A}\varphi) \right\} = \\ = \frac{1}{m}(\varphi\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}\varphi) = \frac{i\hbar}{m} \nabla\varphi(\vec{r}) ;$$

$$\frac{me}{\hbar}(\varphi\hat{\mathbf{v}} - \hat{\mathbf{v}}\varphi) = -\nabla e\varphi.$$

$$m\frac{\partial\vec{v}}{\partial t} = m\frac{1}{m} \left(\frac{\partial\hat{\mathbf{p}}}{\partial t} - \frac{e\partial\vec{A}}{c\partial t} \right) = -\frac{e}{c} \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} ; \quad \frac{\partial\hat{\mathbf{p}}}{\partial t} = 0$$

$$\vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} \text{ là điện trường.}$$

Phương trình chuyển động của hạt

$$m\frac{d\hat{\mathbf{v}}}{dt} = e\vec{E} + \frac{e}{c}[\hat{\mathbf{v}} \wedge \vec{B}]$$

39. Toán tử Haminton của hạt tự do có dạng

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$$

Toán tử $\hat{H}$ và $\hat{\mathbf{p}}$ không phụ thuộc rõ vào thời gian $\frac{\partial\hat{H}}{\partial t} = 0,$

$(\partial\hat{\mathbf{p}}/\partial t) = 0$ nên ta có :

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{H} - \hat{H}\hat{H}) = 0$$

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{p} - \hat{p}\hat{H}) = \frac{i}{2m\hbar} (\hat{p}^2\hat{p} - \hat{p}\hat{p}^2) = 0$$

Từ các phương trình này ta thấy rằng năng lượng và xung lượng của hạt tự do là những đại lượng bảo toàn.

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{L}_x}{dt} &= \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{H}) = \frac{i}{2\hbar m} \left\{ (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2)(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) - \right. \\ &\quad \left. - (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \right\} = \\ &= \frac{i}{2\hbar m} \left\{ \hat{p}_z(\hat{p}_y^2 y - y\hat{p}_y^2) - \hat{p}_y(\hat{p}_z^2 z - z\hat{p}_z^2) \right\} = \\ &= \frac{i}{2\hbar m} \left\{ \hat{p}_z(-2i\hbar\hat{p}_y) - \hat{p}_y(-2i\hbar\hat{p}_z) \right\} = 0. \end{aligned}$$

Bằng cách chứng minh tương tự ta tìm được $\frac{d\hat{L}_y}{dt} = \frac{d\hat{L}_z}{dt} = 0$.

Vậy các hình chiếu mômen xung lượng của hạt tự do là các đại lượng bảo toàn.

Nhân $\hat{L}_x$ về phía phải và về phía trái lên phương trình $\hat{H}\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{H} = 0$ ta tìm được :

$$\hat{H}\hat{L}_x^2 - \hat{L}_x\hat{H}\hat{L}_x = 0$$

$$\hat{L}_x\hat{H}\hat{L}_x - \hat{L}_x^2\hat{H} = 0$$

Cộng các phương trình này lại ta có :

$$\hat{H}\hat{L}_x^2 - \hat{L}_x^2\hat{H} = 0$$

Bằng cách chứng minh tương tự ta được :

$$\widehat{H}\widehat{L}_y^2 - \widehat{L}_y^2\widehat{H} = 0, \widehat{H}\widehat{L}_z^2 - \widehat{L}_z^2\widehat{H} = 0$$

Dễ dàng thấy rằng :

$$(\widehat{L}_x^2 + \widehat{L}_y^2 + \widehat{L}_z^2)\widehat{H} - \widehat{H}(\widehat{L}_x^2 + \widehat{L}_y^2 + \widehat{L}_z^2) = 0$$

hay $\widehat{L}^2\widehat{H} - \widehat{H}\widehat{L}^2 = 0$

Từ đây suy ra bình phương mômen xung lượng của hạt tự do là đại lượng bảo toàn.

40. Ta biết khi $\frac{\partial \widehat{F}}{\partial t} = 0$ và $\widehat{H}\widehat{F} - \widehat{F}\widehat{H} = 0$ thì $\widehat{F}$ là tích phân của chuyển động. Các toán tử $\widehat{L}_z$ và $\widehat{L}^2$ không phụ thuộc rõ vào thời gian nên $\frac{\partial \widehat{L}_z}{\partial t} = 0$ và $\frac{\partial (\widehat{L}^2)}{\partial t} = 0$.

Để có $\widehat{L}_x$ và $\widehat{L}^2$ là những tích phân của chuyển động chỉ cần tìm điều kiện sao cho $\widehat{H}\widehat{L}_z - \widehat{L}_z\widehat{H} = 0$ và $\widehat{H}\widehat{L}^2 - \widehat{L}^2\widehat{H} = 0$ là đủ.

Trong toạ độ cầu r, θ, φ ta có :

$$\widehat{H} = \widehat{T}(r, \theta, \varphi) + U(r, \theta, \varphi)$$

$$\widehat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\nabla_{\theta,\varphi}^2\right\}$$

$$\nabla_{\theta,\varphi}^2 = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$\widehat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}, \widehat{L}^2 = -\hbar^2\nabla_{\theta,\varphi}^2.$$

Dễ dàng thấy rằng :

$$\widehat{H}\widehat{L}_z - \widehat{L}_z\widehat{H} = \widehat{T}\widehat{L}_z - \widehat{L}_z\widehat{T} + U\widehat{L}_z - \widehat{L}_zU = U\widehat{L}_z - \widehat{L}_zU$$

$$\begin{aligned}\widehat{H}\widehat{L}^2 - \widehat{L}^2\widehat{H} &= \widehat{T}\widehat{L}^2 - \widehat{L}^2\widehat{T} + U\widehat{L}^2 - \widehat{L}^2U = \\ &= U\widehat{L}^2 - \widehat{L}^2U\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(\widehat{H}\widehat{L}_z - \widehat{L}_z\widehat{H})\psi &= (U\widehat{L}_z - \widehat{L}_zU)\psi = -i\hbar\left[U\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} - \frac{\partial}{\partial\varphi}(U\psi)\right] \\ &= i\hbar\left(\frac{\partial U}{\partial\varphi}\right).\psi\end{aligned}$$

khi $\frac{\partial U}{\partial\varphi} = 0$ hay $U(r, \theta)$ không phụ thuộc vào φ thì $\widehat{H}\widehat{L}_z - \widehat{L}_z\widehat{H} = 0$

vậy $\widehat{L}_z$ là tích phân của chuyển động khi thế năng U không phụ thuộc vào φ nghĩa là $U(r, \theta)$ hay $U = \text{const}$ $(\widehat{H}\widehat{L}^2 - \widehat{L}^2\widehat{H})\psi = (U\widehat{L}^2 - \widehat{L}^2U)\psi = U\widehat{L}^2\psi - \widehat{L}^2(U\psi)$. Nếu U không phụ thuộc vào θ và φ thì $\widehat{L}^2(U\psi) = U\widehat{L}^2\psi$. Khi đó ta có :

$$(\widehat{H}\widehat{L}^2 - \widehat{L}^2\widehat{H})\psi = 0 \text{ hay } \widehat{H}\widehat{L}^2 - \widehat{L}^2\widehat{H} = 0$$

Vậy $\widehat{L}^2$ là tích phân của chuyển động khi thế năng U không phụ thuộc vào θ và φ nghĩa là $U = U(r)$ hay $U = \text{const}$. Trong trường xuyên tâm $U(r)$ thì $\widehat{L}_z$ và $\widehat{L}^2$ là những tích phân của chuyển động.

41. a) $U(z) = az, a = \text{const}$. Ta có :

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{P}_x^2 + \widehat{P}_y^2 + \widehat{P}_z^2}{2m} + az$$

$$\frac{\partial \hat{p}_x}{\partial t} = \frac{\partial \hat{p}_y}{\partial t} = \frac{\partial \hat{p}_z}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial \hat{L}_x}{\partial t} = \frac{\partial \hat{L}_y}{\partial t} = \frac{\partial \hat{L}_z}{\partial t} = 0,$$

$$\frac{\partial (\hat{L}^2)}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$$

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{H}) = 0, \quad \frac{d\hat{p}_y}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{H}) = 0$$

$$\frac{d\hat{p}_z}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{H}) = \frac{i}{\hbar} a(z\hat{p}_z - \hat{p}_z z) = \frac{i}{\hbar} a i \hbar = -a$$

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{L}_x}{dt} &= \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{H}) = \frac{i}{2\hbar m} [\hat{p}_z(\hat{p}_y^2 - y\hat{p}_y^2) + \\ &\quad + \hat{p}_y(z\hat{p}_z^2 - \hat{p}_z^2 z)] + \frac{i}{\hbar} ay(z\hat{p}_z - \hat{p}_z z) = \\ &= \frac{i}{2\hbar m} \{\hat{p}_z(-2i\hbar\hat{p}_y + \hat{p}_y(2i\hbar\hat{p}_z))\} + \frac{i}{\hbar} ay i \hbar = -ay. \end{aligned}$$

$$\frac{d\hat{L}_y}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{H}) = ax,$$

$$\frac{d\hat{L}_z}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{H}) = 0,$$

$$\frac{d\hat{L}^2}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{H}) = \frac{i}{\hbar} (U\hat{L}^2 - \hat{L}^2 U)$$

Vì $U = az = \arccos\theta$ không giao hoán với $\hat{L}^2$ nên $\frac{d\hat{L}^2}{dt} \neq 0$. Vậy

trung bình của năng lượng, của các hình chiếu xung lượng trên trục x và trục y của hình chiếu mômen xung lượng trên trục z là những tích phân của chuyển động.

$$b) U(t) = za(t).$$

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = z \frac{\partial a}{\partial t} \neq 0$$

Bằng cách chứng minh tương tự như câu a), ta có :

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = 0, \quad \frac{d\hat{p}_y}{dt} = 0, \quad \frac{d\hat{p}_z}{dt} = -a(t) \neq 0$$

$$\frac{d\hat{L}_x}{dt} = -a(t)y, \quad \frac{d\hat{L}_y}{dt} = a(t)x, \quad \frac{d\hat{L}_z}{dt} = 0$$

$$\frac{d(\hat{L}^2)}{dt} = \frac{i}{\hbar}(\hat{U}\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{U}) \neq 0$$

Vậy các đại lượng $\hat{p}_x, \hat{p}_y$ và $\hat{L}_z$ là những tích phân của chuyển động.

$$c) U = U(r), \quad r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$$

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$$

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{H}) = \frac{i}{\hbar}(\hat{U}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{U}) = -\frac{\partial U}{\partial x} \neq 0$$

$$\frac{d\hat{p}_y}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial y} \neq 0, \quad \frac{d\hat{p}_z}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial z} \neq 0$$

Trong toạ độ cầu :

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

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left[\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right]$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}, \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r).$$

$$\text{Chú ý rằng } \hat{L}^2 \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}^2 = 0, \quad \hat{L}^2 \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}^2 = 0$$

$$\text{và } \hat{L}^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^2 = 0 \text{ ta tìm được :}$$

$$\hat{H} \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{H} = 0, \quad \hat{H} \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{H} = 0, \quad \hat{H} \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{H} = 0 \text{ và } \hat{H} \hat{L}^2 - \hat{L}^2 \hat{H} = 0.$$

Vậy $\bar{L}_x, \bar{L}_y, \bar{L}_z, \bar{L}^2$ và $\bar{E}$ là những tích phân của chuyển động.

42. Phương trình Schrödinger một chiều đối với hạt tự do có dạng :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}(x) \psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x,t).$$

Nghiệm $\psi(x, t)$ được tìm dưới dạng $\psi(x, t) = \psi(x)f(t)$. Khi đó

$$\text{ta có :} \quad i\hbar \psi(x) \frac{df(t)}{dt} = \hat{H}(x) \psi(x) f(t)$$

hay

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = \frac{\hat{H}(x) \psi(x)}{\psi(x)} = E = \text{const}$$

Từ đây suy ra :

$$\hat{H}(x) \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x)$$

$$f(t) = \text{const } e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$$

Đặt $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ hay $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ thì nghiệm $\psi(x)$ có dạng

$\psi_k(x) = \text{const} e^{ikx}$. Nghiệm tổng quát của phương trình Schrödinger một chiều phụ thuộc vào thời gian của hạt tự do là tổ hợp tuyến tính các hàm $\psi_k(x, t) = \psi_k(x)f(t)$:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) e^{ikx - i \frac{\hbar k^2}{2m} t} dk$$

43. Phương trình Schrödinger của hạt tự do trong không gian ba chiều có dạng :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi(\vec{r}, t)$$

Đặt $\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) f(t)$ ta có :

$$\hat{H}(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

$$f(t) = \text{const} e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$$

Nghiệm $\psi(\vec{r})$ có dạng :

$$\psi(\vec{r}) = A e^{\pm i \vec{k} \cdot \vec{r}} = A e^{\pm i(k_x x + k_y y + k_z z)}$$

trong đó A là thừa số chuẩn hoá, $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ hay $E =$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \text{ với } \vec{p} = \hbar \vec{k}. \text{ Nếu chọn } k_x = i|k_x|, k_y = i|k_y|, k_z = i|k_z|$$

thì hàm sóng $\psi(x, y, z)$ sẽ không hữu hạn khi $x, y, z \rightarrow \pm\infty$. Hàm sóng $\psi(x, y, z)$ chỉ hữu hạn trong toàn bộ không gian khi k_x, k_y và

k_z nhận mọi giá trị thực bất kì. Khi đó năng lượng E của hạt tự do nhận mọi giá trị dương bất kì hoặc bằng không ($E \geq 0$). Phổ năng lượng của hạt tự do là liên tục và không âm.

44. a) Trong trạng thái dừng năng lượng E của hạt không phụ thuộc vào thời gian.

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

Phương trình Schrödinger có dạng :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(\vec{r}) \right\} \psi(\vec{r}, t)$$

Đặt $\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})f(t)$ và chú ý rằng

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right\} \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

ta có :

$$f(t) = \text{conste} e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$$

Vậy hàm sóng ở trạng thái dừng có dạng :

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

trong trường hợp một chiều ta có :

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

b) Hàm sóng $\psi_k(\vec{r}, t) = \psi_k(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t}$ là nghiệm dừng của phương trình Schrödinger.

$$i\hbar \frac{\partial \psi_k(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}(\vec{r}) \psi_k(\vec{r}, t)$$

Lấy tổng cả hai vế của phương trình này theo k ta tìm được :

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

trong đó $\psi(\vec{r}, t) = \sum_k \psi_k(\vec{r}, t) \sum_k \psi_k(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t}$

vậy hàm $\psi(\vec{r}, t) = \sum_k \psi_k(\vec{r}, t)$ là nghiệm tổng quát của phương trình

Srôđingơ. Nghiệm này sẽ không phải là nghiệm dừng nếu các giá trị của E_k khác nhau.

45. Hàm sóng của hạt tự do một chiều có dạng :

$$\psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$$

Đối với hạt tự do $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ nên ta có :

$$\psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{i\hbar k^2}{2m} t}$$

a) $\psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \sin(kx) e^{-\frac{i\hbar k^2}{2m} t}$

b) $\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ikx} e^{-\frac{i\hbar k^2}{2m} t}$

46. Hàm sóng ở trạng thái dừng của hạt ở trong giếng thế có dạng:

$$\psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

Đối với giếng thế một chiều có bề rộng d , có thành cao vô hạn ta có :

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$$

với

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x)$$

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{khi } 0 \leq x \leq d \\ \infty & \text{khi } x < 0 \text{ và } x > d \end{cases}$$

Nghiệm $\psi_n(x)$ đã chuẩn hoá có dạng :

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right), n = 1, 2, 3, \dots$$

Năng lượng E_n của hạt bằng :

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{d^2}; n = 1, 2, 3, \dots$$

Nghiệm tổng quát $\psi(x, t)$ là tổ hợp tuyến tính các nghiệm $\psi_n(x, t)$:

$$\psi(x, t) = \sum_n C_n \psi_n(x, t) = \sum_n C_n \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

$$\psi(x, 0) = \sum_n C_n \psi_n(x) = Ax(d-x)$$

$$C_n = \int_0^d \psi_n^*(x) \psi(x, 0) dx$$

$$= \int_0^d \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) A x(d-x) dx$$

Thực hiện phép tính tích phân và chú ý $A = (30d^{-5})^{1/2}$ ta tìm được :

$$C_n = \frac{2}{\pi^3} \sqrt{60} \frac{1}{n^3} [1 - (-1)^n]$$

Hàm sóng $\psi(x, t)$ của hạt ở trong giếng thế một chiều được viết lại như sau :

$$\psi(x, t) = \frac{4}{\pi^3} \sum_{n=1} \frac{1}{n^3} \sqrt{\frac{30}{d}} \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) e^{-\frac{i\hbar\pi^2}{2m} n^2 t} \times [1 - (-1)^n]$$

47. Toán tử Haminton của dao động tử dưới tác dụng của lực cưỡng bức $f(t)$ có dạng :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + U(x, t)$$

trong đó $U(x, t)$ là thế năng của lực $f(t)$:

$$U(x, t) = - \int f(t) dx = -f(t)x.$$

Phương trình Schrödinger của dao động tử dưới tác dụng của lực cưỡng bức $f(t)$ có dạng :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x, t)}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \psi(x, t) - f(t)x\psi(x, t)$$

Thay $x_1 = x - \xi(t)$ ta có :

$$\psi(x, t) = \psi(x_1(t), t)$$

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial \psi(x_1, t)}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial x_1}{\partial t} + \frac{\partial \psi(x_1, t)}{\partial t},$$

$$\frac{\partial x_1}{\partial t} = -\frac{\partial \xi}{\partial t} = -\dot{\xi}, \quad \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 \psi(x_1, t)}{\partial x_1^2}.$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x_1, t)}{\partial t} = i\hbar \dot{\xi} \frac{\partial \psi(x_1, t)}{\partial x_1} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x_1, t)}{\partial x_1^2} + \\ + \frac{1}{2} m \omega^2 (x_1 + \xi)^2 \psi(x_1, t) - f(t)(x_1 + \xi) \psi(x_1, t).$$

Đặt $\psi(x_1, t) = e^{\frac{im\dot{\xi}x_1}{\hbar}} \varphi(x_1, t)$ và chú ý :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = e^{\frac{im\dot{\xi}x_1}{\hbar}} \left\{ \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{im\dot{\xi}}{\hbar} x_1 \varphi \right\}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_1} = e^{\frac{im\dot{\xi}x_1}{\hbar}} \left\{ \frac{\partial \varphi}{\partial x_1} + \frac{im\dot{\xi}}{\hbar} \varphi \right\}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} = e^{\frac{im\dot{\xi}x_1}{\hbar}} \left\{ \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_1^2} + \frac{2im\dot{\xi}}{\hbar} \frac{\partial \varphi}{\partial x_1} - \frac{m^2 \dot{\xi}^2}{\hbar^2} \varphi \right\}$$

ta tìm được :

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x_1^2 \varphi + [m\ddot{\xi} + m\omega^2 \xi - f(t)] x_1 \varphi - \mathcal{V} \varphi$$

trong đó

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2 + f(t) \cdot \xi.$$

Chọn $\xi(t)$ thoả mãn phương trình cổ điển.

$$m\ddot{\xi} = f(t) - m\omega^2\xi$$

và đặt $\varphi(x_1, t) = \chi(x_1, t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{V}(t) dt}$

ta có :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{V}(t) dt} - \mathcal{V} \chi e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{V}(t) dt} = \\ &= i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{V}(t) dt} - \mathcal{V} \varphi; \text{ và} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_1^2} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial x_1^2}$$

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t}(x_1, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi(x_1, t)}{\partial x_1^2} + \frac{m\omega^2 x_1^2}{2} \chi(x_1, t)$$

Phương trình này là phương trình của dao động tử tự do. Biết được $\chi(x_1, t)$ ta tìm được $\psi(x, t)$.

Hàm sóng $\psi(x, t)$ có dạng :

$$\psi(x, t) = \chi[x - \xi(t), t] \exp \left\{ \frac{im}{\hbar} (x - \xi) \dot{\xi} + \frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{V}(t) dt \right\}.$$

48. Ở trạng thái dừng hàm sóng có dạng :

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

a) Mật độ xác suất $\rho = |\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi(\vec{r})|^2$ không phụ thuộc rõ vào thời gian t .

Mật độ dòng xác suất

$$\begin{aligned}\vec{j} &= -\frac{i\hbar}{2m} \left\{ \psi^*(\vec{r}, t) \nabla \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \nabla \psi^*(\vec{r}, t) \right\} = \\ &= -\frac{i\hbar}{m} \left\{ \psi^*(\vec{r}) \nabla \psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r}) \nabla \psi^*(\vec{r}) \right\} = \vec{j}(\vec{r})\end{aligned}$$

cũng vậy không phụ thuộc rõ vào t .

$$b) j_x = -\frac{i\hbar}{2m} \left\{ \psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} - \psi(x) \frac{d}{dx} \psi^*(x) \right\}$$

Đặt $\psi(x) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2} + ikx}$ và $\psi^*(x) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2} - ikx}$ vào biểu thức

của j_x ta tìm được : $j_x = \frac{\hbar k}{m} \rho(x)$ ở đây

$$\rho(x) = A^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}} = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{a^2}}$$

c) Đặt hàm sóng của hạt tự do $\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = A e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}$

($\vec{p} = \hbar \vec{k}$) vào biểu thức của $\vec{j}$ ta có :

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} \left[\psi_{\vec{p}}^* \nabla \psi_{\vec{p}} - \psi_{\vec{p}} \nabla \psi_{\vec{p}}^* \right] = \frac{\vec{p}}{m} A^2$$

Từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng bằng hàm $\delta(\vec{p}' - \vec{p})$ ta xác định được A .

$$A^2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(p'_x x + p'_y y + p'_z z)} e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)} dx dy dz =$$

$$= \delta(p'_x - p_x) \delta(p'_y - p_y) \delta(p'_z - p_z).$$

Chú ý rằng $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$ và

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x} dx = (k' - k) 2\pi$$

ta tìm được $A = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$ và $\vec{j} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\vec{p}}{m}$

$$49. a) \int_0^{2\pi} \psi^*(\phi) \psi(\phi) d\phi = A^2 \int_0^{2\pi} \sin^4 \phi d\phi = 1$$

Chú ý rằng

$$\sin^2 \phi = \frac{1}{2} - \frac{1}{4} \{ e^{-2i\phi} + e^{2i\phi} \}$$

$$\sin^4 \phi = \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{4} [e^{-2i\phi} + e^{2i\phi}] \right\}^2$$

$$\sin^4 \phi = \frac{3}{8} - \frac{1}{8} \{ e^{-2i\phi} + e^{2i\phi} \} + \frac{1}{16} \{ e^{-4i\phi} + e^{4i\phi} \}$$

$$\int_0^{2\pi} e^{\pm i k \phi} d\phi = \begin{cases} 2\pi & \text{khi } k = 0 \\ 0 & \text{khi } k \neq 0 \end{cases}$$

Ta tìm được $A = \frac{2}{\sqrt{3\pi}}$

b) Toán tử Haminton của rôtatô phẳng có dạng :

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}_z^2}{2I} = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

trong đó I là mômen quán tính của rôtatô đối với trục Oz . Phương trình Schrödinger của rôtatô phẳng :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\varphi, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\varphi, t) = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \psi(\varphi, t)$$

Đặt $\psi(\varphi, t) = \psi(\varphi)f(t)$ ta có :

$$i\hbar \psi(\varphi) \frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2I} f(t) \frac{\partial^2 \psi(\varphi)}{\partial \varphi^2}$$

hay

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2I\psi(\varphi)} \frac{d^2 \psi(\varphi)}{d\varphi^2} = E = \text{const}$$

Từ đây suy ra :

$$-\frac{\hbar^2}{2I} \frac{d^2 \psi(\varphi)}{d\varphi^2} = E\psi(\varphi), \quad i\hbar \frac{df}{dt} = Ef(t)$$

Đặt $m^2 = \frac{2IE}{\hbar^2}$ ta tìm được :

$$\psi_m(\varphi) = \text{conste}^{im\varphi}, \quad f_m(t) = \text{conste}^{-\frac{i}{\hbar}Et} = \text{conste}^{-\frac{i\hbar m^2}{2I}t}$$

$$\psi_m(\varphi, t) = \psi_m(\varphi)f_m(t) = B e^{im\varphi - \frac{i\hbar m^2}{2I}t}$$

Từ điều kiện chuẩn hoá của hàm sóng ta xác định được B :

$$\int_0^{2\pi} |\psi_m(\varphi, t)|^2 d\varphi = B^2 \cdot 2\pi = 1 \rightarrow B = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Từ điều kiện đơn giá của hàm sóng $\psi(\varphi, t) = \psi(\varphi + 2\pi, t)$ suy ra $e^{i2\pi m} = 1$ hay $m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$

Nghiệm dừng và năng lượng của rô-ta-tô phẳng được xác định như sau :

$$\psi_m(\varphi, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} e^{-\frac{i\hbar m^2}{2I}t}$$

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2I} m^2, m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$$

Nghiệm tổng quát của rô-ta-tô phẳng có dạng :

$$\psi(\varphi, t) = \sum_m C_m \psi_m(\varphi, t) = \sum_m C_m \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} e^{-\frac{i\hbar m^2}{2I}t}$$

Theo đầu bài toán :

$$\psi(\varphi, 0) = \sum_m C_m \psi_m(\varphi, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_m C_m e^{im\varphi} = A \sin^2 \varphi.$$

Các hệ số khai triển C_m được xác định bằng công thức :

$$C_m = \int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi, 0) \psi(\varphi, 0) d\varphi = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} \sin^2 \varphi d\varphi$$

$$\text{Chú ý } \sin^2 \varphi = \frac{1}{2} - \frac{1}{4} \{ e^{-2i\varphi} + e^{2i\varphi} \}$$

ta có :

$$C_m = \frac{A\sqrt{2\pi}}{2} \left\{ \delta_{m,0} - \frac{1}{2}\delta_{m,2} - \frac{1}{2}\delta_{m,-2} \right\}$$

$$C_m = \sqrt{\frac{2}{3}} \left\{ \delta_{m,0} - \frac{1}{2}\delta_{m,2} - \frac{1}{2}\delta_{m,-2} \right\}$$

Biết được C_m ta xác định được $\psi(\varphi, t)$.

$$\psi(\varphi, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ C_0 + C_2 e^{2i\varphi - \frac{2i\hbar t}{I}} + C_{-2} e^{-2i\varphi - \frac{2i\hbar t}{I}} \right\}$$

$$\psi(\varphi, t) = \frac{1}{\sqrt{3\pi}} \left\{ 1 - \cos(2\varphi) \cdot e^{-\frac{2i\hbar t}{I}} \right\}.$$

c) Hệ số $C_m \neq 0$ khi $m = 0$ và $m = \pm 2$. Những giá trị có thể có của $L_z = m\hbar$ là $0, \pm 2\hbar$.

Các xác suất tương ứng là $w_0 = |C_0|^2 = \frac{2}{3}$,

$$w_2 = |C_2|^2 = \frac{1}{6}, \quad w_{-2} = |C_{-2}|^2 = \frac{1}{6}$$

$$d) \bar{L}_z = \sum_m |C_m|^2 m\hbar \text{ với } m = 0, \pm 2.$$

$$= 0 + 2\hbar |C_2|^2 - 2\hbar |C_{-2}|^2 = \frac{1}{3}\hbar - \frac{1}{3}\hbar = 0$$

$$\bar{L}_z^2 = \sum_m |C_m|^2 m^2 \hbar^2$$

$$= 0 + 4\hbar^2 |C_2|^2 + 4\hbar^2 |C_{-2}|^2 = \frac{4}{3}\hbar^2.$$

50. Phương trình Schrödinger của hạt trong giếng thế có dạng :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

Đặt $\psi(x, y, z) = \psi(x)\psi(y)\psi(z)$ và phương trình Schrödinger của hạt sau đó chia cả hai vế cho $\psi(x)\psi(y)\psi(z)$ ta được :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{\psi(x)} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{\psi(y)} \frac{\partial^2 \psi(y)}{\partial y^2} + \frac{1}{\psi(z)} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} \right\} = E = \text{const}$$

Từ đây suy ra :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{\psi(x)} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} \right\} = E_1 = \text{const}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{\psi(y)} \frac{\partial^2 \psi(y)}{\partial y^2} \right\} = E_2 = \text{const}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{\psi(z)} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} \right\} = E_3 = \text{const}$$

$$E = E_1 + E_2 + E_3$$

hay

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E_1 \psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(y)}{dy^2} = E_2 \psi(y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} = E_3 \psi(z)$$

Dùng các điều kiện biên :

$$\psi(0, y, z) = \psi(x, 0, z) = \psi(x, y, 0) = 0$$

$$\psi(a, y, z) = \psi(x, b, z) = \psi(x, y, c) = 0$$

và thực hiện chuẩn hoá hàm sóng ta tìm được :

$$\psi_{n_1}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{a}\right), E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n_1^2 \pi^2}{a^2},$$

$$n_1 = 1, 2, 3 \dots$$

$$\psi_{n_2}(y) = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{b}\right), E_2 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n_2^2 \pi^2}{b^2},$$

$$n_2 = 1, 2, 3 \dots$$

$$\psi_{n_3}(z) = \sqrt{\frac{2}{c}} \sin\left(\frac{n_3 \pi z}{c}\right), E_3 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n_3^2 \pi^2}{c^2},$$

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{n_1 \pi x}{a} \sin \frac{n_2 \pi y}{b} \sin \frac{n_3 \pi z}{c}$$

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left\{ \frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right\}$$

$$n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3 \dots$$

Các giá trị $n_1 = 0$, $n_2 = 0$ và $n_3 = 0$ dẫn đến $\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = 0$ và do đó xác suất tìm thấy hạt tại mọi điểm trong giếng thế bằng không. Điều này mâu thuẫn với bài toán là cho hạt ở trong giếng thế. Vậy các giá trị $n_1 = 0$, $n_2 = 0$ và $n_3 = 0$ bị loại trừ. Khi thay $n_1 \rightarrow -n_1$, $n_2 \rightarrow -n_2$, $n_3 \rightarrow -n_3$ thì hàm sóng đổi dấu. Hai hàm sóng khác dấu cùng mô tả một trạng thái của hạt. Vì vậy chỉ cần lấy các giá trị dương và nguyên của n_1 , n_2 và n_3 là đủ.

51. Phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian có dạng :

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi(x) = 0$$

- Trong miền $x < 0$ (miền I)

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi_I(x) = 0$$

Vì $U_0 - E > 0$ nên đặt $k_I^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)$.

Khi đó ta có : $\frac{d^2\psi_I}{dx^2} - k_I^2\psi_I = 0$

Nghiệm $\psi_I(x)$ có dạng :

$$\psi_I(x) = A_1 e^{k_I x} + B_1 e^{-k_I x}$$

Để $\psi_I(x)$ hữu hạn khi $x \rightarrow -\infty$ ta đặt $B_1 = 0$. Vậy :

$$\psi_I(x) = A_1 e^{k_I x}$$

- Trong miền $0 \leq x \leq d$ (miền II)

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + k^2\psi_{II} = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Nghiệm $\psi_{II}(x)$ có dạng :

$$\psi_{II}(x) = A \sin(kx + \alpha)$$

trong đó A và α là những hằng số

- Trong miền $x > d$ (miền III)

$$\frac{d^2\psi_{III}(x)}{dx^2} - k_I^2\psi_{III}(x) = 0$$

Nghiệm $\psi_{III}(x)$ có dạng :

$$\psi_{III}(x) = A_2 e^{k_1 x} + B_2 e^{-k_1 x}$$

Để $\psi_{III}(x)$ hữu hạn khi $x \rightarrow +\infty$, ta đặt $A_2 = 0$.

Vậy hàm $\psi_{III}(x)$ có dạng :

$$\psi_{III}(x) = B_2 e^{-k_1 x}$$

Từ các điều kiện liên tục của hàm sóng và đạo hàm của hàm sóng tại điểm $x = 0$ và $x = d$, ta có :

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \rightarrow A_1 = A \sin \alpha$$

$$\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \rightarrow k_1 A_1 = k A \cos \alpha$$

$$\psi_{II}(d) = \psi_{III}(d) \rightarrow A \sin(kd + \alpha) = B_2 e^{-k_1 d}$$

$$\psi'_{II}(d) = \psi'_{III}(d) \rightarrow k A \cos(kd + \alpha) = -k_1 B_2 e^{-k_1 d}$$

Dễ dàng thấy rằng :

$$\cot \alpha = \frac{k_1}{k} > 0, \cot(kd + \alpha) = -\frac{k_1}{k},$$

$$\cot \alpha = -\cot(kd + \alpha).$$

Nếu lấy α nằm giữa 0 và $\frac{\pi}{2}$ thì $\sin \alpha \geq 0$ và

$$\sin \alpha = \frac{1}{\sqrt{1 + \cot^2 \alpha}} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{k_1}{k}\right)^2}} = \frac{1}{\sqrt{\frac{U_0}{E}}} = \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}$$

$$\text{Từ đây suy ra : } \alpha = \arcsin \left(\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}} \right)$$

Điều kiện $\cotg(kd + \alpha) = -\cotg\alpha$ với $0 \leq \alpha \leq \frac{\pi}{2}$ cho ta :

$$kd + \alpha = (\pi - \alpha) + q\pi \text{ với } q = 0, 1, 2, 3... \text{ hay}$$

$$kd = -2\alpha + n\pi, n = q + 1 = 1, 2, 3, 4...$$

Phương trình

$$kd = -2\text{arsin}\left(\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}\right) + n\pi, n = 1, 2, 3...$$

xác định năng lượng $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ của hạt. Vì k phụ thuộc vào số lượng tử n nên E phụ thuộc vào n . Vì $0 \leq \sin\alpha \leq 1$ nên ta có $0 \leq \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}} \leq 1$ hay $0 \leq k \leq k_{\max}$ với $k_{\max} = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}$. Giao điểm của

đường $y = dk$ và đường $y_n = n\pi - 2\text{arsin}\left(\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}\right)$ xác định

những nghiệm $k_1, k_2, k_3, \dots$ (h. 3.5). Những nghiệm này cho phổ

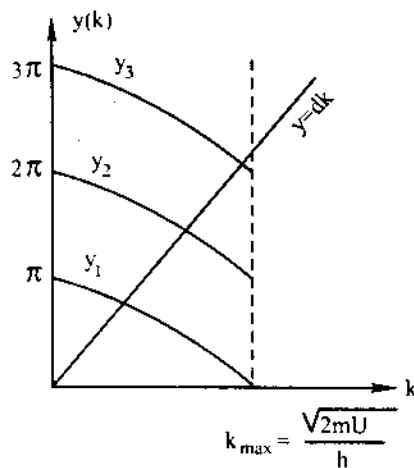
gián đoạn $E_n : E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, n = 1, 2, 3..$

52. Phương trình Schrödinger trong các miền I, II và III

$$\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} - k_1^2\psi_I(x) = 0 \text{ khi } x < 0$$

$$\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + k^2\psi_{II}(x) = 0 \text{ khi } 0 \leq x \leq d$$

$$\frac{d^2\psi_{III}(x)}{dx^2} - k_2^2\psi_{III}(x) = 0 \text{ khi } x > d$$



Hình 3.5

trong đó

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_1 - E), \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_2 - E)$$

Các nghiệm hữu hạn $\psi_I(x)$, $\psi_{II}(x)$ và $\psi_{III}(x)$ có dạng :

$$\psi_I(x) = A_1 e^{k_1 x}, \quad \psi_{II}(x) = A \sin(kx + \alpha), \quad \psi_{III}(x) = B_2 e^{-k_2 x}$$

Các điều kiện liên tục của hàm sóng và đạo hàm của chúng tại các điểm $x = 0$ và $x = d$ cho ta :

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \rightarrow A_1 = A \sin \alpha$$

$$\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \rightarrow A_1 k_1 = A k \cos \alpha$$

$$\psi_{II}(d) = \psi_{III}(d) \rightarrow A \sin(kd + \alpha) = B_2 e^{-k_2 d}$$

$$\psi'_{II}(d) = \psi'_{III}(d) \rightarrow A k \cos(kd + \alpha) = -B_2 k_2 e^{-k_2 d}$$

Dễ dàng thấy rằng :

$$\cotg \alpha = \frac{k_1}{k} > 0, \cotg(kd + \alpha) = -\frac{k_2}{k} < 0$$

Chọn α nằm giữa 0 và $\frac{\pi}{2}$ thì ta có :

$$\sin \alpha = \frac{1}{\sqrt{1 + \cotg^2 \alpha}} = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{k_1^2}{k^2}}} = \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_1}}$$

$$\alpha = \arcsin\left(\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_1}}\right), \cotg(kd + \alpha) = -\frac{k_2}{k} = -\cotg \beta$$

Vì $\cotg \beta = \frac{k_2}{k} > 0$ nên ta chọn β nằm giữa 0 và $\frac{\pi}{2}$ khi đó ta có :

$$kd + \alpha = (\pi - \beta) + q\pi, q = 0, 1, 2, 3, \dots$$

hay $kd = -\alpha - \beta + n\pi, n = q + 1 = 1, 2, 3, \dots$ ta có :

$$\sin \beta = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{k_2^2}{k^2}}} = \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_2}} \quad \beta = \arcsin\left(\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_2}}\right)$$

Phương trình xác định năng lượng của hạt có dạng :

$$kd = -\arcsin\left(\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_1}}\right) - \arcsin\left(\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_2}}\right) + n\pi,$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$$

Các trường hợp đặc biệt :

a) Khi $U_1 = U_2 = U_0$ ta có :

$$kd = -2\text{arsin}\left(\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}\right) + n\pi, n = 1, 2, 3, \dots$$

b) Khi $U_1 = U_2 = \infty$ thì $\alpha = \beta = 0$. Khi đó ta có :

$$kd = n\pi, n = 1, 2, 3, \dots, E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{d^2}$$

Đó là trường hợp hạt ở trong giếng thế một chiều có thành cao vô hạn.

c) Khi $U_2 = \infty$ thì $\beta = 0$. Khi đó ta tìm được :

$$kd = -\text{arsin}\left(\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_1}}\right) + n\pi$$

53. Các phương trình Schrödinger trong các vùng I, II và III có dạng:

$$\frac{d^2 \psi_I(x)}{dx^2} + k_1^2 \psi_I(x) = 0 \text{ khi } x < 0$$

$$\frac{d^2 \psi_{II}(x)}{dx^2} + k_2^2 \psi_{II}(x) = 0 \text{ khi } 0 \leq x \leq d$$

$$\frac{d^2 \psi_{III}(x)}{dx^2} + k_1^2 \psi_{III}(x) = 0 \text{ khi } x > d$$

trong đó $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E + U_0)$.

Các nghiệm ψ_I , ψ_{II} , ψ_{III} có dạng :

$$\psi_I(x) = e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$$

$$\psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}$$

$$\psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1 x} + B_3 e^{-ik_1 x}$$

Trong vùng III không có sóng phản xạ nên ta đặt $B_3 = 0$.

a) Từ điều kiện liên tục của ψ và ψ' tại các điểm $x = 0$ và $x = d$ ta xác định được các hệ số B_1 , A_2 , B_2 và A_3 tức là xác định được hàm sóng của hạt.

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \rightarrow 1 + B_1 = A_2 + B_2,$$

$$\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \rightarrow k_1(1 - B_1) = k_2(A_2 - B_2),$$

$$\psi_{II}(d) = \psi_{III}(d) \rightarrow A_2 e^{ik_2 d} + B_2 e^{-ik_2 d} = A_3 e^{ik_1 d},$$

$$\psi'_{II}(d) = \psi'_{III}(d) \rightarrow k_2(A_2 e^{ik_2 d} - B_2 e^{-ik_2 d}) = k_1 A_3 e^{ik_1 d},$$

hay

$$A_2 + B_2 = 1 + B_1$$

$$A_2 - B_2 = \frac{k_1}{k_2} (1 - B_1)$$

$$A_2 e^{ik_2 d} + B_2 e^{-ik_2 d} = A_3 e^{ik_1 d}$$

$$A_2 e^{ik_2 d} - B_2 e^{-ik_2 d} = \frac{k_1 A_3}{k_2} e^{ik_1 d}$$

Từ hai đẳng thức đầu ta có :

$$2A_2 = 1 + \frac{k_1}{k_2} + \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) B_1$$

$$2B_2 = 1 - \frac{k_1}{k_2} + \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) B_1$$

Từ hai đẳng thức cuối ta tìm được :

$$2 A_2 e^{ik_2 d} = A_3 e^{ik_1 d} \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right)$$

$$2B_2e^{-ik_2d} = A_3e^{ik_1d} \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right)$$

Dễ dàng thấy rằng :

$$\frac{2A_2}{2B_2} = \frac{\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) + \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right)B_1}{\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) + \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right)B_1} = e^{-2ik_2d} \frac{\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right)}{\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right)}$$

Từ đẳng thức này ta tìm được B_1 , biết được B_1 ta xác định được A_2 và B_2 , biết được A_2 (hay B_2) ta xác định được A_3 .

$$B_1 = \frac{(k_2^2 - k_1^2) \{e^{ik_2d} - e^{-ik_2d}\}}{(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2d} - (k_2 - k_1)^2 e^{ik_2d}}$$

$$A_2 = \frac{2k_1(k_1 + k_2)e^{-ik_2d}}{(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2d} - (k_2 - k_1)^2 e^{ik_2d}}$$

$$B_2 = \frac{2k_1(k_2 - k_1)e^{ik_2d}}{(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2d} - (k_2 - k_1)^2 e^{ik_2d}}$$

$$A_3 = \frac{4k_1k_2e^{-ik_1d}}{(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2d} - (k_2 - k_1)^2 e^{ik_2d}}$$

$$B_3 = 0$$

b) Các hàm sóng ψ_t , ψ_{px} , và ψ_q có dạng :

$$\psi_t(x) = e^{ik_1x}, \psi_{px}(x) = B_1e^{-ik_1x}, \psi_q(x) = A_3e^{ik_1x}$$

Các hệ số phản xạ R và hệ số truyền qua D được xác định từ các công thức :

$$R = \frac{|j_{px}|}{j_t} = |B_1|^2 = \frac{(k_2^2 - k_1^2)^2 \sin^2(k_2 d)}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 d)}$$

$$D = \frac{|j_q|}{|j_t|} = |A_3|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 d)}$$

Dễ dàng thấy rằng $R + D = 1$.

54. Phương trình Schrödinger trong các vùng I, II và III có dạng :

$$\frac{d^2 \psi_I(x)}{dx^2} + k_1^2 \psi_I(x) = 0 \text{ khi } x < 0$$

$$\frac{d^2 \psi_{II}(x)}{dx^2} + k_2^2 \psi_{II}(x) = 0 \text{ khi } 0 \leq x \leq d$$

$$\frac{d^2 \psi_{III}(x)}{dx^2} + k_1^2 \psi_{III}(x) = 0 \text{ khi } x > d$$

Trong đó $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $k_2^2 = \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}$

– Xét trường hợp $E > U_0$.

Các nghiệm ψ_I , ψ_{II} và ψ_{III} có dạng :

$$\psi_I(x) = e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$$

$$\psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}$$

$$\psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1 x} + B_3 e^{-ik_1 x}$$

Trong vùng III không có sóng phản xạ nên ta đặt $B_3 = 0$.

Sóng đi tới $\psi_t(x) = e^{ik_1 x}$, sóng phản xạ $\psi_{px}(x) = B_1 e^{-ik_1 x}$ và

sóng truyền qua $\psi_q(x) = A_3 e^{ik_1 x}$. Từ điều kiện liên tục của $\psi(x)$ và $\psi'(x)$ tại điểm $x = 0$ và $x = d$ ta xác định được B_1 , A_2 , B_2 và A_3 .

$$B_1 = \frac{(k_2^2 - k_1^2) \{ e^{ik_2 d} - e^{-ik_2 d} \}}{(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 d} - (k_2 - k_1)^2 e^{ik_2 d}}$$

$$A_2 = \frac{2k_1(k_2 + k_1)e^{-ik_2 d}}{(k_2 + k_1)^2 e^{-ik_2 d} - (k_2 - k_1)^2 e^{ik_2 d}}$$

$$B_2 = \frac{2k_1(k_2 - k_1)e^{ik_2 d}}{(k_2 + k_1)^2 e^{-ik_2 d} - (k_2 - k_1)^2 e^{ik_2 d}}$$

$$A_3 = \frac{4k_1 k_2 e^{-ik_1 d}}{(k_2 + k_1)^2 e^{-ik_2 d} - (k_2 - k_1)^2 e^{ik_2 d}}$$

Hệ số phản xạ R và hệ số truyền qua D được xác định bằng các công thức sau :

$$R = \frac{|j_{px}|}{j_t} = |B_1|^2 = \frac{(k_2^2 - k_1^2)^2 \sin^2(k_2 d)}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 d)}$$

$$D = \frac{|j_q|}{|j_t|} = |A_3|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 d)}$$

Dễ thấy rằng $R + D = 1$.

– Xét trường hợp khi $E < U_0$

Trong trường hợp này ta đặt $k_2 = ik$ trong đó $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(U_0 - E)}$.

Thay $k_2 = ik$ vào biểu thức của B_1 và A_3 ta được :

$$B_1 = \frac{-(k^2 + k_l^2) \{e^{-kd} - e^{kd}\}}{(k_l + ik)^2 e^{kd} - (k_l - ik)^2 e^{-kd}}$$

$$A_3 = \frac{4ik_l k e^{-ik_l d}}{(k_l + ik)^2 e^{kd} - (k_l - ik)^2 e^{-kd}}$$

$$R = |B_1|^2 = \frac{(k_l^2 + k^2)^2 \{e^{-kd} - e^{kd}\}^2}{|(k_l + ik)^2 e^{kd} - (k_l - ik)^2 e^{-kd}|^2}$$

$$D = |A_3|^2 = \frac{16k_l^2 k^2}{|(k_l + ik)^2 e^{kd} - (k_l - ik)^2 e^{-kd}|^2}$$

Chú ý rằng

$$\text{sh}^2(kd) = \left[\frac{e^{kd} - e^{-kd}}{2} \right]^2 = \frac{1}{4} \{e^{2kd} + e^{-2kd} - 2\}$$

hay $e^{2kd} + e^{-2kd} = 2 + 4\text{sh}^2(kd)$ ta tìm được :

$$R = \frac{(k_l^2 + k^2)^2 \text{sh}^2(kd)}{(k_l^2 + k^2)^2 \text{sh}^2(kd) + 4k_l^2 k^2}$$

$$D = \frac{4k_l^2 k^2}{(k_l^2 + k^2)^2 \text{sh}^2(kd) + 4k_l^2 k^2}$$

$$R + D = 1.$$

Khi $kd \gg 1$ thì $e^{-kd} \approx 0$, $\text{sh}(kd) \approx \frac{e^{kd}}{2}$ và ta có :

$$D \approx \frac{4}{\frac{1}{4} \left(\frac{k_l}{k} + \frac{k}{k_l} \right)^2 e^{2kd} + 4} = \frac{1}{\frac{1}{16} \left(\frac{k_l}{k} + \frac{k}{k_l} \right)^2 e^{2kd} + 1}$$

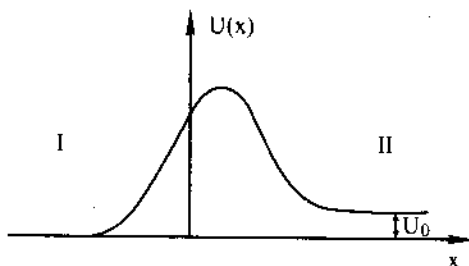
Vì $e^{2kd} \gg 1$ khi $kd \gg 1$ nên gần đúng ta có :

$$D \approx D_0 e^{-2kd}; \text{ trong đó } k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)} \text{ và}$$

$$D_0 = \frac{16}{\left(\frac{k_1}{k} + \frac{k}{k_1}\right)^2} = \frac{16k_1^2 k^2}{(k_1^2 + k^2)^2}$$

55. Giả sử hạt có năng

lượng $E > U_0$ tới hàng rào thế từ bên trái. Khi đó ở miền $x \rightarrow \infty$ với $U(\infty) = U_0$ (h.3.6) chỉ có sóng truyền qua ψ_q và ở miền $x \rightarrow -\infty$ với $U(-\infty) = 0$ có cả sóng



Hình 3.6

tới ψ_t và sóng phản xạ ψ_{px} .

Phương trình Schrödinger ở miền I (miền bên trái có sóng tới và sóng phản xạ) và ở miền II (miền bên phải có sóng truyền qua ψ_q) có dạng :

$$\frac{d^2 \psi_I(x)}{dx^2} + k_1^2 \psi_I(x) = 0, \quad \frac{d^2 \psi_{II}(x)}{dx^2} + k_2^2 \psi_{II}(x) = 0$$

trong đó $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$

$$k_2^2 = \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}.$$

Nghiệm $\psi_I(x)$ và $\psi_{II}(x)$ sẽ là :

$$\psi_I(x) = e^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, \psi_{II}(x) = Ae^{ik_2x}$$

Các sóng tới $\psi_I(x)$, sóng phản xạ $\psi_{px}(x)$ và sóng truyền qua $\psi_q(x)$ có dạng :

$$\psi_I(x) = e^{ik_1x}, \psi_{px}(x) = Be^{-ik_1x}, \psi_q(x) = Ae^{ik_2x}$$

Khi đó $j_t = \frac{\hbar k_1}{m}$, $j_{px} = -\frac{\hbar k_1}{m} |B|^2$ và $j_q = \frac{\hbar k_2}{m} |A|^2$. Các hệ số phản xạ R và hệ số truyền qua D được xác định như sau :

$$R = \frac{|j_{px}|}{|j_t|} = |B|^2, D = \frac{|j_q|}{|j_t|} = \frac{k_2}{k_1} |A|^2.$$

Muốn chứng minh hệ thức $R + D = 1$ ta sử dụng định luật bảo toàn số hạt nghĩa là dùng phương trình liên tục.

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0$$

Bài toán đang xét là dừng nên $|\psi|^2$ không phụ thuộc rõ vào thời gian t và do đó $\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = 0$ và $\text{div} \vec{j} = 0$. Trong trường hợp một chiều $\frac{\partial j_x}{\partial x} = 0$ hay $j_x = \text{const}$. Ta có :

$$j_{x=-\infty} = j_t + j_{px} = \frac{\hbar k_1}{m} - \frac{\hbar k_1}{m} |B|^2,$$

$$j_{x=\infty} = j_q = \frac{\hbar k_2}{m} |A|^2. \text{ Từ điều kiện } j_x = \text{const} \text{ hay}$$

$$j_{x=-\infty} = j_{x=\infty} \text{ suy ra } \frac{\hbar k_1}{m} - \frac{\hbar k_1}{m} |B|^2 = \frac{\hbar k_2}{m} |A|^2 \text{ hay } R + D = 1.$$

56. Phương trình Schrödinger của dao động tử một chiều có dạng :

$$\hat{H}(x)\psi(x) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right\} \psi(x) = E\psi(x)$$

trong đó m là khối lượng của hạt, ω là tần số dao động. Đặt

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \text{ và chú ý rằng } \frac{d^2}{dx^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2}{d\xi^2} \text{ ta có :}$$

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \xi^2 \right) \psi(\xi) = 0$$

Khi $\xi \rightarrow \pm \infty$ thì bỏ qua số hạng $\frac{2E}{\hbar\omega}$ bé hơn so với ξ^2 , ta được :

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2\psi(\xi) = 0$$

Nghiệm của phương trình này có dạng $e^{\pm \frac{\xi^2}{2}}$ khi $\xi \rightarrow \pm \infty$. Để

hàm sóng $\psi(\xi)$ hữu hạn khi $\xi \rightarrow \pm \infty$ ta chỉ lấy nghiệm $e^{-\frac{\xi^2}{2}}$.
Nghiệm $\psi(\xi)$ tổng quát đối với ξ bất kì được tìm dưới dạng :

$$\psi(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} H(\xi)$$

Đặt biểu thức của $\psi(\xi)$ này vào phương trình vi phân của dao động tử điều hoà ta tìm được phương trình vi phân đối với hàm $H(\xi)$.

$$\frac{d^2 H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + 2nH = 0$$

trong đó $2n = \frac{2E}{\hbar\omega} - 1$.

Nghiệm $H(\xi)$ được tìm dưới dạng chuỗi :

$$H(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k$$

Đặt biểu thức của $H(\xi)$ này vào phương trình vi phân đối với $H(\xi)$ ta có :

$$\sum_{k=2}^{\infty} a_k k(k-1) \xi^{k-2} - 2 \sum_{k=1}^{\infty} a_k k \xi^k + 2n \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k = 0$$

Trong tổng đầu thay chỉ số tổng $k \rightarrow k+2$, trong tổng thứ hai cho k chạy từ số 0 (số hạng ứng với $k=0$ không cho đóng góp trong tổng thứ hai), ta có :

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{(k+1)(k+2)a_{k+2} - 2(k-n)a_k\} \xi^k = 0$$

Từ phương trình này suy ra :

$$a_{k+2} = \frac{2(k-n)}{(k+1)(k+2)} a_k$$

Biết được a_k ta xác định được a_{k+2} hay ngược lại. Để hàm sóng $\psi(\xi)$ là hữu hạn thì k phải dừng ở một giá trị $k_{\max}$ nào đó. Khi đó $a_{k_{\max}} \neq 0$ còn $a_{k_{\max}+2} = a_{k_{\max}+4} = \dots = 0$.

Hệ số $a_{k_{\max}+2} = 0$ khi $k_{\max} = n$. Vì số k là số nguyên không âm nên n là số nguyên không âm. Khi đó ta có :

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \text{ với } n = 0, 1, 2, 3.$$

Hàm $H(\xi)$ trở thành một đa thức bậc n

$$H_n(\xi) = a_n \xi^n + a_{n-2} \xi^{n-2} + \dots + \begin{cases} a_0 & \text{khi } n \text{ chẵn} \\ a_1 \xi & \text{khi } n \text{ lẻ.} \end{cases}$$

Vì thừa số chuẩn hoá của hàm sóng $\psi(\xi)$ chưa xác định nên hệ số a_n còn tùy ý chọn. Đặt $a_n = 2^n$ thì từ hệ thức $a_k = -\frac{(k+1)(k+2)}{2(n-k)} a_k + 2$ nếu thay $k+2 = n$ ta tìm được a_{n-2} và thay $k+2 = n-2$ ta tìm được a_{n-4} , v.v... Khi đó ta có :

$$a_{n-2} = -2^{n-2} \frac{n(n-1)}{1!},$$

$$a_{n-4} = 2^{n-4} \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!}, \text{ v.v.}$$

Đa thức $H_n(\xi)$ bây giờ được viết lại như sau :

$$H_n(\xi) = (2\xi)^n - \frac{n(n-1)}{1!} (2\xi)^{n-2} + \\ + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} (2\xi)^{n-4} - \dots$$

hay viết dưới dạng vi phân :

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^2}{d\xi^n} (e^{-\xi^2})$$

$$H_0(\xi) = 1, H_1(\xi) = 2\xi, H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \dots$$

Hàm sóng $\psi_n(x)$ của dao động tử điều hoà có dạng :

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

xác định A_n từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = A_n^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = 1.$$

$$A_n = \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{I}}$$

trong đó tích phân I được xác định như sau :

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_n(\xi) d\xi = (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} H_n \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) d\xi \\ &= (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) d \left(\frac{d^{n-1}}{d\xi^{n-1}} e^{-\xi^2} \right) \end{aligned}$$

Tích phân từng phần tích phân này n lần ta có :

$$I = (-1)^n (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} H_n d\xi$$

Chú ý rằng $\frac{d^n}{d\xi^n} H_n = 2^n n!$, $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}$ ta tìm được

$I = 2^n n! \sqrt{\pi}$. Vậy

$$A_n = \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}}$$

Để tính $\overline{x}, \overline{x^2}$ ta dùng hệ thức của đa thức ecmi H_n

Đa thức $H_n(\xi)$ thoả mãn phương trình :

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0$$

Chú ý rằng :

$$\frac{dH_n}{d\xi} = 2n \left\{ (2\xi)^{n-1} - \frac{(n-1)(n-2)}{1!} (2\xi)^{n-2} + \dots \right\} =$$

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} = 2n \frac{dH_{n-1}}{d\xi} = 2n \cdot 2(n-1)H_{n-2}$$

ta có :

$$2n \cdot 2(n-1)H_{n-2} - 2n2\xi H_{n-1} + 2nH_n = 0$$

$$\text{hay } \xi H_{n-1} = (n-1)H_{n-2} + \frac{1}{2} H_n$$

Thay $n \rightarrow n+1$ và $n \rightarrow n+2$ ta được :

$$\xi H_n = nH_{n-1} + \frac{1}{2} H_{n+1},$$

$$\xi H_{n+1} = (n+1)H_n + \frac{1}{2} H_{n+2}$$

Dễ dàng thấy rằng :

$$\xi^2 H_n = n\xi H_{n-1} + \frac{1}{2} \xi H_{n+1}$$

$$= (n + \frac{1}{2})H_n + n(n-1)H_{n-2} + \frac{1}{4} H_{n+2}$$

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) x \psi_n(x) dx =$$

$$= \frac{\hbar}{m\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(\xi) \xi \psi_n(\xi) d\xi = \frac{\hbar}{m\omega} A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) \xi H_n(\xi) d\xi$$

$$= \frac{\hbar}{m\omega} A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) \left\{ nH_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi) \right\} d\xi$$

$$= \frac{\hbar}{m\omega} \frac{A_n}{A_{n-1}} \cdot n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(\xi) \psi_{n-1}(\xi) d\xi + \\ + \frac{\hbar}{2m\omega} \cdot \frac{A_n}{A_{n+1}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(\xi) \psi_{n+1}(\xi) d\xi = 0$$

(do tính chất trực giao của các hàm riêng ψ_n , ψ_{n-1} và ψ_{n+1})

$$\overline{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) x^2 \psi_n(x) dx = \\ = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(\xi) \xi^2 \times \psi_n(\xi) d\xi \\ = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{3/2} A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) \xi^2 H_n(\xi) d\xi \\ = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{3/2} A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) \left\{ \left(n + \frac{1}{2} \right) H_n(\xi) + \right. \\ \left. + n(n-1)H_{n-2} + \frac{1}{4}H_{n+2} \right\} d\xi$$

Chú ý rằng :

$$A_n^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_n(\xi) d\xi = 1, \\ \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(\xi) \psi_{n-2}(\xi) d\xi = 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(\xi) \psi_{n+2}(\xi) d\xi = 0$$

ta tìm được :

$$\overline{x^2} = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \bar{U}(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2} \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{\bar{E}_n}{2}$$

57. a) Phương trình Schrödinger của dao động tử điều hoà ba chiều có dạng :

$$\hat{H}\psi(x, y, z) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{m}{2} (\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2) \right\} \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z).$$

Đặt $\psi(x, y, z) = \psi(x)\psi(y)\psi(z)$ vào phương trình trên rồi chia cả hai vế của phương trình vừa nhận được cho $\psi(x)\psi(y)\psi(z)$ ta có :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\psi(x)} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega_1^2 x^2 \psi(x) \right\} + \\ & + \frac{1}{\psi(y)} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(y)}{\partial y^2} + \frac{1}{2} m\omega_2^2 y^2 \psi(y) \right\} + \\ & + \frac{1}{\psi(z)} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + \frac{1}{2} m\omega_3^2 z^2 \psi(z) \right\} = E = \text{const} \end{aligned}$$

Từ đây suy ra :

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega_1^2 x^2 \psi(x) = E_1 \psi(x) \\ & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(y)}{dy^2} + \frac{1}{2} m\omega_2^2 y^2 \psi(y) = E_2 \psi(y) \\ & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} + \frac{1}{2} m\omega_3^2 z^2 \psi(z) = E_3 \psi(z) \end{aligned}$$

với $E_1 = \text{const}$, $E_2 = \text{const}$, $E_3 = \text{const}$ và $E = E_1 + E_2 + E_3$. Các phương trình đối với các hàm sóng $\psi(x)$, $\psi(y)$ và $\psi(z)$ là những phương trình dao động tử điều hoà một chiều.

Đặt $X = \sqrt{\frac{m\omega_1}{\hbar}}x$, $Y = \sqrt{\frac{m\omega_2}{\hbar}}y$, $Z = \sqrt{\frac{m\omega_3}{\hbar}}z$ ta có :

$$\psi_{n_1}(X) = A_{n_1} e^{-\frac{X^2}{2}} H_{n_1}(X), \quad E_{n_1} = \hbar\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right)$$

$$\psi_{n_2}(Y) = A_{n_2} e^{-\frac{Y^2}{2}} H_{n_2}(Y), \quad E_{n_2} = \hbar\omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right)$$

$$\psi_{n_3}(Z) = A_{n_3} e^{-\frac{Z^2}{2}} H_{n_3}(Z), \quad E_{n_3} = \hbar\omega_3 \left(n_3 + \frac{1}{2} \right)$$

với $n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, 3, \dots$ và $A_{n_1}, A_{n_2}, A_{n_3}$ là các hệ số chuẩn hóa hàm sóng :

$$A_{n_1} = \left(\frac{m\omega_1}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^{n_1} n_1!}}$$

$$A_{n_2} = \left(\frac{m\omega_2}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^{n_2} n_2!}}$$

$$A_{n_3} = \left(\frac{m\omega_3}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^{n_3} n_3!}}$$

Hàm sóng và năng lượng của dao động tử điều hoà ba chiều được xác định như sau :

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \psi_{n_1}(x) \psi_{n_2}(y) \psi_{n_3}(z)$$

$$E_{n_1 n_2 n_3} = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3} = \hbar \left(\omega_1 n_1 + \omega_2 n_2 + \omega_3 n_3 + \frac{\omega_1 + \omega_2 + \omega_3}{2} \right),$$

$$n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, 3, \dots$$

b) Khi $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega$ ta có :

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar \omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) = \hbar \omega \left(n + \frac{3}{2} \right) = E_n,$$

với $n = n_1 + n_2 + n_3$. Ứng với một giá trị của n đã cho (tức là ứng với mức năng lượng E_n) ta có g_n hàm $\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z)$ với $n_1 + n_2 + n_3 = n$.

Số g_n là bội suy biến mức E_n . Ta xác định số g_n . Khi cố định n , n_1 và cho n_2 thay đổi thì n_3 thay đổi theo (n_3 trở nên phụ thuộc). Giá trị bé nhất của n_2 bằng không (khi $n_3 = n - n_1$) và giá trị lớn nhất của n_2 bằng $(n - n_1)$ (khi $n_3 = 0$). Các giá trị có thể có của n_2 là $0, 1, 2, \dots, (n - n_1)$. Số giá trị có thể có của n_2 khi cố định n và n_1 là $(n - n_1) + 1$. Số giá trị của n_2 có thể có ứng với mọi giá trị khác nhau của n_1 từ giá trị $n_1 = 0$ đến giá trị $n_1 = n$ cho ta bội suy biến g_n :

$$g^n = \sum_{n_1=0}^n (n - n_1 + 1) = (n + 1) + n + (n - 1) + (n - 2) + \dots + 2 + 1$$

Đây là một cấp số các số tự nhiên có số hạng đầu bằng 1 số hạng cuối bằng $n + 1$ và có số số hạng là $(n + 1)$:

$$g_n = \frac{1 + (n + 1)}{2} \cdot (n + 1) = \frac{1}{2} (n + 2)(n + 1)$$

Mức không suy biến duy nhất ứng với $n = 0$.

58. Chọn trục Oz hướng dọc theo chiều của vectơ cảm ứng từ $\vec{B}$. Khi đó ta có $B_x = B_y = 0$ và $B_z = B$. Ta biết rằng $\vec{B} = \text{rot } \vec{A}$, nếu

chọn $A_x = -B_y$, $A_y = A_z = 0$ thì điều kiện $B_x = B_y = 0$ và $B_z = B$ được thỏa mãn.

Phương trình Schrödinger của electron chuyển động trong từ trường có vectơ $\vec{B}$ hướng dọc theo trục Oz có dạng :

$$\hat{H}\psi(x, y, z) = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

Ta biết :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 = \frac{1}{2m} \left\{ \hat{p}^2 - \frac{e}{c} (\hat{p} \vec{A} + \vec{A} \hat{p}) + \frac{e^2}{c^2} (\vec{A})^2 \right\}$$

Chú ý rằng $A_x = -B_y$, $A_y = A_z = 0$, $B = \text{const}$,

$$\hat{p} \vec{A} - \vec{A} \hat{p} = -i\hbar \nabla \vec{A}$$

$$\nabla \vec{A} = \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z} = 0$$

ta có :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e}{mc} \vec{A} \hat{p} + \frac{e^2}{2mc^2} (\vec{A})^2$$

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} - \frac{e}{mc} (A_x \hat{p}_x + A_y \hat{p}_y + A_z \hat{p}_z) + \\ & + \frac{e^2}{2mc^2} (A_x^2 + A_y^2 + A_z^2) \end{aligned}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} - \frac{ie\hbar}{mc} B \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e^2}{2mc^2} B^2 y^2$$

Phương trình Schrödinger của electron bây giờ được viết lại như sau :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial z^2} \right\} - \frac{ie\hbar B}{mc} \frac{\partial \psi(x, y, z)}{\partial x} + \frac{e^2}{2mc^2} B^2 y^2 \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z).$$

Hàm sóng $\psi(x, y, z)$ được tìm dưới dạng :

$\psi(x, y, z) = e^{ik_x x} e^{ik_z z} \phi(y)$. Đặt biểu thức của $\psi(x, y, z) = e^{ik_x x} e^{ik_z z} \phi(y)$ vào phương trình Schrödinger và chú ý rằng

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial z^2} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \psi, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} \psi, \\ -\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = \hbar k_x \psi$$

ta tìm được phương trình đối với $\phi(y)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi}{dy^2} + \left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) \phi + \frac{\hbar k_x e B y}{mc} \phi + \frac{e^2 B^2 y^2}{2mc^2} \phi = E \phi$$

$$\text{hay } \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi}{dy^2} + \frac{m\omega^2}{2} \left(y + \frac{\hbar k_x}{m\omega} \right)^2 \phi(y) = E' \phi(y)$$

$$\text{trong đó } \omega = \frac{eB}{mc} \text{ và } E' = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

$$\text{Đặt } Y = y + \frac{\hbar k_x}{m\omega} \text{ và chú ý rằng } \frac{d^2}{dy^2} = \frac{d^2}{dY^2} \text{ ta có :}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi(y)}{dy^2} + \frac{m\omega^2}{2} Y^2 \phi(Y) = E' \phi(Y)$$

Đây là phương trình của dao động tử điều hoà một chiều với hàm sóng $\varphi(Y)$ và năng lượng E . Đặt $E = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} Y$ ta có :

$$\varphi_n(\xi) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} Y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(y + \frac{\hbar k_x}{m\omega}\right),$$

$$E'_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$A_n = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$$

Hàm sóng $\psi(x, y, z)$ và năng lượng E của electron được xác định như sau : $\psi_{n, k_x, k_z}(x, y, z) = e^{i(k_x x + k_z z)} \varphi_n(\xi)$

$$E_{n, k_z} = E'_n + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

$$n = 0, 1, 2, 3.$$

59. Thế năng của lực tĩnh điện :

$$\bar{U}_1(x) = -\int F dx = -\int e|\epsilon| dx = -e|\epsilon|x$$

Thế năng của dao động tử dưới tác dụng của điện trường không đổi ϵ đặt dọc theo trục Ox .

$$U(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2 - e|\epsilon|x$$

Phương trình Schrödinger của dao động tử một chiều dưới tác dụng của điện trường không đổi ϵ :

$$\hat{H}(x)\psi(x) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - e|\epsilon|x \right\} \psi(x) = E\psi(x)$$

Đặt $X = x - \frac{e|\varepsilon|}{m\omega^2}$ và chú ý $\frac{d^2}{dx^2} = \frac{d^2}{dX^2}$.

$$\frac{m\omega^2}{2}X^2 - \frac{e^2|\varepsilon|^2}{2m\omega^2} = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 - e|\varepsilon|x$$

ta có :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dX^2} + \frac{m\omega^2}{2} X^2 - \frac{e^2|\varepsilon|^2}{2m\omega^2} \right\} \psi(X) = E\psi(X)$$

hay

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dX^2} + \frac{m\omega^2}{2} X^2 \right\} \psi(X) = E'\psi(X)$$

trong đó $E' = E + \frac{e^2|\varepsilon|^2}{2m\omega^2}$

$$\text{Đặt } \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(x - \frac{e|\varepsilon|}{m\omega^2} \right)$$

ta tìm được :

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

$$E'_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{e^2|\varepsilon|^2}{2m\omega^2}, \quad n = 0, 1, 2.$$

60. Thế năng dao động của hệ hai hạt :

$$U(x_1, x_2) = \frac{\alpha}{2}x_1^2 + \frac{\alpha}{2}x_2^2 + \frac{\beta}{2}(x_2 - x_1)^2$$

Động năng của hệ hai hạt :

$$T = \frac{m\dot{x}_1^2}{2} + \frac{m\dot{x}_2^2}{2} = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m}.$$

Gọi X là toạ độ khối tâm và x là toạ độ tương đối của hai hạt ta có :

$$X = \frac{m_1x_1 + m_2x_2}{m_1 + m_2} = \frac{x_1 + x_2}{2} \quad (m_1 = m_2 = m)$$

$$x = x_2 - x_1$$

hay $x_1 = X - \frac{x}{2}, x_2 = X + \frac{x}{2}$

Kí hiệu $M = m_1 + m_2 = 2m$ là khối lượng của hệ hai hạt,

$\mu = \frac{m_1m_2}{m_1 + m_2} = \frac{m}{2}$ là khối lượng thu gọn của hệ hai hạt, ta có :

$$U(X, x) = \alpha X^2 + \frac{\alpha + 2\beta}{4}x^2$$

$$T = \frac{M\dot{X}^2}{2} + \frac{\mu\dot{x}^2}{2} = \frac{p^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu}$$

trong đó $P = M\dot{X}$, $p = \mu\dot{x}$. Đặt $\omega_1 = \sqrt{\frac{2\alpha}{M}} = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}$

$$\omega_2 = \sqrt{\frac{\alpha + 2\beta}{2\mu}} = \sqrt{\frac{\alpha + 2\beta}{m}}$$

ta viết được hàm Haminton của hệ hạt

$$H = T + U = \frac{p^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}M\omega_1^2 X^2 + \frac{1}{2}\mu\omega_2^2 x^2.$$

Toán tử Haminton của hệ hai hạt dao động có dạng :

$$\hat{H}(X, x) = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dX^2} + \frac{1}{2}M\omega_1^2 X^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\mu\omega_2^2 x^2$$

Phương trình Schrödinger của hệ hai hạt dao động sẽ là :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dX^2} + \frac{1}{2}M\omega_1^2 X^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\mu\omega_2^2 x^2 \right\} \psi(X, x) = E\psi(X, x)$$

Đặt $\psi(X, x) = \psi(X)\psi(x)$ ta tìm được :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dX^2} + \frac{1}{2}M\omega_1^2 X^2 \right\} \psi(X) = E_1 \psi(X)$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\mu\omega_2^2 x^2 \right\} \psi(x) = E_2 \psi(x)$$

trong đó $E_1 = \text{const}$, $E_2 = \text{const}$ và $E = E_1 + E_2$. Đó là hai phương trình Schrödinger của các dao động điều hoà một chiều. Đặt

$$\xi = \sqrt{\frac{M\omega_1}{\hbar}} X = \sqrt{\frac{2m\omega_1}{\hbar}} \left(\frac{x_1 + x_2}{2} \right)$$

$$\eta = \sqrt{\frac{m\omega_2}{2\hbar}} x = \sqrt{\frac{m\omega_2}{2\hbar}} (x_2 - x_1)$$

ta tìm được

$$\psi_{n_1}(\xi) = A_{n_1} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_{n_1}(\xi), \quad E_{n_1} = \hbar\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right)$$

$$\psi_{n_2}(\eta) = A_{n_2} e^{-\frac{\eta^2}{2}} H_{n_2}(\eta), \quad E_{n_2} = \hbar\omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right)$$

$$\psi_{n_1 n_2}(\eta, \xi) = A_{n_1} A_{n_2} e^{-\frac{\xi^2 + \eta^2}{2}} H_{n_1}(\xi) H_{n_2}(\eta)$$

$$E_{n_1 n_2} = E_{n_1} + E_{n_2} = \hbar\omega\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_2\left(n_2 + \frac{1}{2}\right)$$

$$n_1, n_2 = 0, 1, 2, 3, \dots$$

61. Ta biết rằng $\widehat{L}_x^2 + \widehat{L}_y^2 = \widehat{L}^2 - \widehat{L}_z^2$. Khi đó ta có :

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{L}^2}{2I_1} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{I_3} - \frac{1}{I_1}\right)\widehat{L}_z^2$$

Biểu diễn $\widehat{L}^2$ và $\widehat{L}_z^2$ qua tọa độ cầu ta tìm được :

$$\widehat{H}(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) = E_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

trong đó :

$$E_{lm} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I_1} + \frac{1}{2}\left\{\frac{1}{I_3} - \frac{1}{I_1}\right\} m^2 \hbar^2$$

$$l = 0, 1, 2, \dots; m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

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

$$\text{Khi } I_1 = I_2 = I_3 \text{ thì } E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I_1}$$

62. Phương trình Schrödinger của hạt có dạng :

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{|x|} \right) \psi(x) = 0$$

Xét trường hợp khi năng lượng $E < 0$. Đặt

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = -\gamma^2, \quad \frac{me^2}{\hbar^2\gamma} = \alpha, \quad \xi = 2\gamma x$$

và chú ý rằng $\frac{d^2\psi}{dx^2} = 4\gamma^2 \frac{d^2\psi}{d\xi^2}$ ta có :

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \left\{ -\frac{1}{4} + \frac{\alpha}{|\xi|} \right\} \psi(\xi) = 0$$

Xét miền $\xi > 0$. Khi $\xi \rightarrow +\infty$ thì phương trình ở dạng tiệm cận $\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \frac{1}{4}\psi = 0$ sẽ có nghiệm $\psi(\xi) = e^{\frac{\xi}{2}}$ (nghiệm $\psi = e^{\frac{\xi}{2}}$ không thoả mãn điều kiện tiêu chuẩn). Nghiệm $\psi(\xi)$ trong trường hợp tổng quát được tìm dưới dạng :

$$\psi(\xi) = e^{\frac{\xi}{2}} F(\xi)$$

Đặt biểu thức của $\psi(\xi)$ vào phương trình Schrödinger ta tìm được phương trình đối với hàm $F(\xi)$.

$$\xi \frac{d^2 F(\xi)}{d\xi^2} - \xi \frac{dF(\xi)}{d\xi} + \alpha F(\xi) = 0$$

Tìm hàm $F(\xi)$ dưới dạng chuỗi :

$$F(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k$$

khi đó ta có $\frac{dF}{d\xi} = \sum_{k=1}^{\infty} a_k k \xi^{k-1}$.

$$\frac{d^2 F}{d\xi^2} = \sum_{k=2}^{\infty} a_k (k-1) k \xi^{k-2}$$

$$\text{Suy ra } \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)a_k \xi^{k-1} - \sum_{k=1}^{\infty} k a_k \xi^k + \alpha \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k = 0$$

Trong tổng đầu thay chỉ số tổng $k \rightarrow k+1$, ta được :

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{(k+1)k a_{k+1} + (\alpha - k)a_k\} \xi^k = 0$$

Từ phương trình này suy ra :

$$(k+1)k a_{k+1} + (\alpha - k)a_k = 0$$

khi $k=0$ ta có $\alpha a_0 = 0$ hay $a_0 = 0$. Biết a_k ($k=1, 2, 3, \dots$) ta xác định được a_{k+1} nhờ hệ thức :

$$a_{k+1} = \frac{k-\alpha}{k(k+1)} a_k, \quad (k=1, 2, \dots)$$

Để hàm sóng $\psi(\xi)$ hữu hạn thì k phải dừng ở một giá trị $k_{\max} = n$ nào đó. Khi đó $a_n \neq 0$ còn các $a_{n+1} = a_{n+2} = \dots = 0$. Hệ số $a_{n+1} = a_{k_{\max}+1} = 0$ khi $k_{\max} = n$. Vì k là những số nguyên dương ($k=1, 2, \dots$) nên $k_{\max} = n$ cũng là số nguyên dương ($n=1, 2, \dots$). Hàm sóng $\psi(\xi)$ có dạng :

$$\psi_n(\xi) = e^{\frac{\xi}{2}} \sum_{k=0}^n a_k \xi^k \text{ với } a_{k+1} = \frac{k-n}{k(k+1)} a_k$$

Vì hàm $\psi_n(\xi)$ chưa chuẩn hoá thì ta có thể cho trước giá trị của một hệ số (ví dụ a_1 chẳng hạn) thì các hệ số a_k còn lại hoàn toàn xác định.

Chú ý rằng

$$n^2 = \alpha^2 = \left(\frac{me^2}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{\gamma^2} \quad \text{và} \quad -\gamma^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Ta tìm được $E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$

Muốn có nghiệm đối với miền $\xi < 0$ ta đưa vào biến $\eta = -\xi$.
Phương trình sẽ có cùng dạng như đối với $\xi > 0$.

$$\frac{d^2\psi(\eta)}{d\eta^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{\alpha}{\eta} \right) \psi(\eta) = 0, \quad \eta > 0.$$

Nghiệm $\Psi(\eta)$ có dạng giống như $\psi(\xi)$ với $\xi > 0$.

$$\psi(\eta) = e^{-\frac{\eta}{2}} \sum_{k=1}^n a_k \eta^k$$

63. Phương trình Schrödinger của hạt có dạng :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ E - U_0(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}) \right\} \psi(x) = 0$$

Đặt $y = e^{-\alpha x}$, $\beta^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2\alpha^2}$, $\varepsilon = \frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2}$ và chú ý rằng

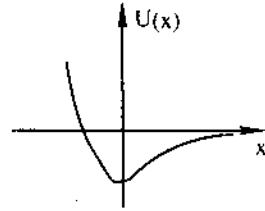
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \alpha^2 y \left\{ \frac{d\psi}{dy} + y \frac{d^2\psi}{dy^2} \right\} \quad \text{ta tìm được}$$

$$y^2 \frac{d^2\psi}{dy^2} + y \frac{d\psi}{dy} - \beta^2 (y^2 - 2y) \psi + \varepsilon \psi = 0$$

hay
$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{1}{y} \frac{d\psi}{dy} - \beta^2 \left(1 - \frac{2}{y} \right) \psi + \frac{\varepsilon}{y^2} \psi = 0$$

Khi $x \rightarrow -\infty$ thì $y \rightarrow \infty$ và phương trình ở dạng tiệm cận $\frac{d^2\psi_\infty}{dy^2} - \beta^2\psi_\infty = 0$

có nghiệm $\psi_\infty = e^{-\beta y}$ (nghiệm $e^{\beta y}$ không thoả mãn điều kiện hữu hạn). Khi $x \rightarrow +\infty$ thì $y \rightarrow 0$ và $\psi_0 = 0$ (h.3.7). Nghiệm ψ_0 được tìm dưới dạng $\psi_0 = y^k$. Đặt $\psi_0 = y^k$



Hình 3.7

vào phương trình vi phân đối với hàm $\psi(y)$ ta tìm được :

$$y^k \{k(k-1) + k + \varepsilon - \beta^2 y^2 + 2\beta^2 y\} = 0$$

hay $k(k-1) + k + \varepsilon - \beta^2 y^2 + 2\beta^2 y = 0$

Khi $y \rightarrow 0$ ta có $k^2 + \varepsilon = 0$ hay $k = \pm\sqrt{-\varepsilon}$. Vậy

$$\psi_0 = y^{\pm\sqrt{-\varepsilon}} = e^{\pm\sqrt{-\varepsilon}x} \text{ với } x \rightarrow \infty.$$

Khi $\varepsilon > 0$ thì $E > 0$ và $\sqrt{-\varepsilon} = i\sqrt{|\varepsilon|}$. Hàm ψ_n khi đó là hữu hạn và phổ năng lượng E là liên tục. Ta không xét trường hợp này.

Khi $\varepsilon < 0$ thì $E < 0$ và $\sqrt{-\varepsilon} = \lambda > 0$. Trong trường hợp năng lượng E có giá trị âm này ta có : $\psi_0 = e^{\pm\alpha\lambda x}$. Nghiệm $e^{+\alpha\lambda x} \rightarrow \infty$ khi $x \rightarrow \infty$ không thoả mãn điều kiện hữu hạn của hàm sóng nên bị loại bỏ và ta chỉ lấy nghiệm $\psi_0 = e^{-\alpha\lambda x} = y^\lambda$ với $\lambda = \sqrt{-\varepsilon}$. Nghiệm tổng quát $\psi(y)$ được tìm dưới dạng :

$$\psi(y) = e^{-\beta y} y^\lambda F(y)$$

Thay biểu thức của hàm $\psi(y)$ vào phương trình vi phân của nó ta nhận được phương trình vi phân đối với hàm $F(y)$:

$$y \frac{d^2 F}{dy^2} + (1 + 2\lambda - 2\beta y) \frac{dF}{dy} + 2\beta \left(\beta - \lambda - \frac{1}{2} \right) F = 0$$

Tìm $F(y)$ dưới dạng chuỗi nguyên : $F(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k$. Đặt biểu

thức của $F(y)$ vào phương trình vi phân của nó ta được :

$$\sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)a_k y^{k-1} + (1+2\lambda) \sum_{k=1}^{\infty} k a_k y^{k-1} - 2\beta \sum_{k=1}^{\infty} k a_k y^k + 2\beta \left(\beta - \lambda - \frac{1}{2} \right) \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k = 0$$

trong tổng đầu và tổng thứ hai ta thay chỉ số tổng $k \rightarrow k+1$, ta có :

$$\sum_{k=0}^{\infty} y^k \left\{ [(k+1)k + (1+2\lambda)(k+1)]a_{k+1} + 2\beta \times (\beta - k - \lambda - \frac{1}{2})a_k \right\} = 0$$

Mọi hệ số của y^k buộc phải bằng không. Từ đây ta tìm được hệ thức giữa các hệ số a_k :

$$a_{k+1} = \frac{2\beta \left(k + \lambda + \frac{1}{2} - \beta \right)}{(k+1)(k+1+2\lambda)} a_k$$

Để hàm sóng $\psi(y)$ hữu hạn thì k phải dừng ở một giá trị $k_{\max} = n$ nào đó. Khi đó $a_n \neq 0$ và $a_{n+1} = a_{n+2} = \dots = 0$.

Từ điều kiện $a_{k_{\max}+1} = 0$, suy ra :

$$2\beta \left(n + \lambda + \frac{1}{2} - \beta \right) = 0 \text{ hay } \lambda = \beta - \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Bởi vì k là số nguyên không âm nên $k_{\max} = n$ cũng là số nguyên

không âm ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$). Từ các hệ thức $\beta = (2mU_0/\hbar\alpha)$ và

$$\lambda^2 = -\varepsilon = -\frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2} \text{ ta xác định được năng lượng } E_n \text{ của hạt :}$$

$$E_n = -U_0 \left\{ 1 - \frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2mU_0}} \left(n + \frac{1}{2} \right) \right\}^2, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Số lượng tử n được giới hạn bởi điều kiện

$$\lambda = \beta - n - \frac{1}{2} > 0. \text{ Hàm sóng của hạt có dạng :}$$

$$\psi_n(y) = e^{-\beta y} y^{\lambda_n} \sum_{k=0}^n a_k y^k$$

trong đó $y = e^{-\alpha x}$, $\lambda_n = \frac{\sqrt{-2mE_n}}{\hbar\alpha}$, $\beta = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar\alpha}$ và

$$a_{k+1} = \frac{2\beta \left(k + \lambda + \frac{1}{2} - \beta \right)}{(k+1)(k+1+2\lambda)} a_k.$$

Ghi chú : Nếu đặt $\xi = 2\beta y$ thì $\frac{dF}{dy} = 2\beta \frac{dF}{d\xi}$, $\frac{d^2F}{dy^2} = (2\beta)^2 \frac{d^2F}{d\xi^2}$ và

phương trình vi phân đối với $F(\xi)$ có dạng :

$$\xi \frac{d^2F}{d\xi^2} + (c - \xi) \frac{dF}{d\xi} - aF = 0$$

trong đó $c = 1 + 2\lambda$, $a = \lambda + \frac{1}{2} - \beta$.

Phương trình vi phân đối với $F(\xi)$ này có nghiệm là hàm siêu bội thường gặp :

$$F_1 = F(a, c, \xi) = 1 + \frac{a \xi}{c 1!} + \frac{a(a+1)\xi^2}{c(c+1)2!} + \frac{a(a+1)(a+2)\xi^3}{c(c+1)(c+2)3!} + \dots$$

Nếu $a = -n$ với $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ thì F trở thành đa thức bậc n .

$$F(-n, c, \xi) = 1 - \frac{n}{c}\xi + \frac{n(n-1)}{c(c+1)}\frac{\xi^2}{2!} + \dots + (-1)^n \times \frac{(c-1)!n!}{(c+n-1)!}\xi^n$$

Nếu c là số không nguyên thì tồn tại nghiệm thứ hai

$F_2 = \xi^{1-c}F(a-c+1, 2-c; \xi)$ nghiệm tổng quát có dạng :

$F(\xi) = AF_1(\xi) + BF_2(\xi)$. Đối với bài toán đã cho $1-c = -2\lambda$ và nghiệm F_2 không hữu hạn khi $\xi \rightarrow 0$ nên bị loại trừ. Vậy $F(\xi) = AF_1(\xi)$ với $a = -n, c = 1 + 2\lambda$.

64. Phương trình Schrödinger của hạt có dạng :

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{U_0}{ch^2(\alpha x)} \right] \psi(x) = 0.$$

Xét trường hợp $E < 0$.

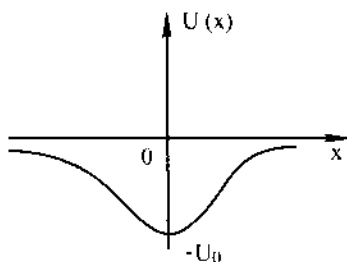
Đặt $\xi = th(\alpha x)$ và chú ý rằng

$$\frac{1}{ch^2(\alpha x)} = 1 - \xi^2.$$

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{d\xi} \cdot \frac{d\xi}{dx} = \alpha(1 - \xi^2) \times \frac{d\psi}{d\xi},$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \alpha \frac{d}{d\xi} \left\{ (1 - \xi^2) \times \frac{d\psi}{d\xi} \right\} \frac{d\xi}{dx}$$

$$= \alpha^2(1 - \xi^2) \frac{d}{d\xi} \left\{ (1 - \xi^2) \frac{d\psi}{d\xi} \right\}$$



Hình 3.8

ta có:
$$\frac{d}{d\xi} \left\{ (1-\xi^2) \frac{d\psi}{d\xi} \right\} + \left\{ s(s+1) - \frac{\varepsilon^2}{1-\xi^2} \right\} \psi(\xi) = 0$$

trong đó
$$\varepsilon = \frac{\sqrt{-2mE}}{\alpha\hbar} > 0, s = \frac{1}{2} \left(-1 + \sqrt{1 + \frac{8mU_0}{\alpha^2\hbar^2}} \right)$$

và
$$s(s+1) = \frac{2mU_0}{\alpha^2\hbar^2}$$

Phương trình vi phân có điểm kỳ dị tại $\xi = \pm 1$. Để khử điểm kỳ dị này ta tìm hàm $\psi(\xi)$ dưới dạng :

$$\psi(\xi) = (1 - \xi^2)^q F(\xi) \text{ với } q > 0$$

Ta phải chọn giá trị của q thích hợp để phương trình vi phân đối với hàm $F(\xi)$ không có điểm kỳ dị. Đặt biểu thức của $\psi(\xi)$ vào phương trình vi phân của nó ta được phương trình vi phân đối với $F(\xi)$:

$$(1-\xi^2) \frac{d^2 F}{d\xi^2} - 2\xi(2q+1) \frac{dF}{d\xi} + \left\{ s(s+1) - \frac{\varepsilon^2}{1-\xi^2} + \frac{4q^2}{1-\xi^2} - 4q^2 - 2q \right\} F = 0$$

Nếu chọn $q = \frac{s}{2}$ thì ta có :

$$(1-\xi^2) \frac{d^2 F}{d\xi^2} - 2\xi(\varepsilon+1) \frac{dF}{d\xi} + \{s(s+1) - \varepsilon^2 - \varepsilon\} F = 0$$

Tìm hàm $F(\xi)$ dưới dạng chuỗi nguyên :

$$F(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k$$

Đặt biểu thức của $F(\xi)$ vào phương trình vi phân của nó ta tìm được :

$$\sum_{k=0}^{\infty} \xi^k \{ (k+2)(k+1)a_{k+2} + [s(s+1) - \varepsilon(\varepsilon+1) - k(k-1) - 2k(1+\varepsilon)]a_k \} = 0$$

Từ đây suy ra :

$$a_{k+2} = \frac{k(k-1) + 2(1+\varepsilon)k - s(s+1) + \varepsilon(\varepsilon+1)}{(k+2)(k+1)} a_k$$

Để hàm sóng $\psi(\xi)$ hữu hạn thì k phải dừng ở một giá trị $k_{\max} = n$ nào đó. Khi đó $a_n \neq 0$ và $a_{k_{\max}+2} = 0$.

Từ điều kiện này ta có :

$$n(n-1) + 2(1+\varepsilon)n - s(s+1) + \varepsilon(\varepsilon+1) = 0$$

hay $s - \varepsilon = n$. Với $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ và $s - n > 0$.

Dùng hệ thức $\varepsilon^2 = (s - n)^2 = -\frac{2mE_n}{\alpha^2 \hbar^2}$ ta xác định được mức

năng lượng E_n của hạt :

$$E_n = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m} (s-n)^2 = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m} \left\{ -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{8mU_0}{\alpha^2 \hbar^2}} \right\} - n^2$$

trong đó $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ và $n < s$.

Hàm sóng $\psi_n(\xi)$ có dạng :

$$\varphi_n(\xi) = (1 - \xi^2)^{\frac{\varepsilon}{2}} \sum_{k=0}^n a_k \xi^k, \quad \varepsilon = \frac{\sqrt{-2mE_n}}{\alpha \hbar} = \varepsilon - n > 0 \text{ trong đó}$$

các hệ số a_k và a_{k+2} liên hệ với nhau bằng hệ thức đã xác định ở trên.

* Ghi chú : Nếu đặt $u = \frac{1}{2}(1 - \xi)$ thì $(1 - \xi^2) = 4u(1 - u)$.

$$\frac{dF}{d\xi} = -\frac{1}{2} \frac{dF}{du}, \quad \frac{d^2F}{d\xi^2} = \frac{1}{4} \frac{d^2F}{du^2}$$

và ta có :

$$u(1-u) \frac{d^2F}{du^2} + (\varepsilon+1)(1-2u) \frac{dF}{du} + (s-\varepsilon)(\varepsilon+s+1)F = 0$$

hay

$$u(1-u) \frac{d^2F}{du^2} + [c - (a+b+1)u] \frac{dF}{du} - abF = 0$$

trong đó $a = \varepsilon - s$, $b = \varepsilon + s + 1$, $c = \varepsilon + 1$.

Phương trình này có hai nghiệm F_1 và F_2 :

$$F_1(u) = F(a, b, c, u) = 1 + \frac{ab}{c} \frac{u}{1!} + \frac{a(a+1)b(b+1)}{c(c+1)} \frac{u^2}{2!} + \dots$$

$$F_2(u) = u^{1-c} F(1+a-c, 1+b-c, 2-c, u)$$

Nghiệm tổng quát $F(u) = AF_1(u) + BF_2(u)$. Hàm $F(a, b, c, u)$ là hàm siêu bội. Khi $x \rightarrow \infty$ thì $\xi \rightarrow 1$ và $u \rightarrow 0$. Bởi vì $1-c = -\varepsilon < 0$ cho nên khi $u \rightarrow 0$ thì nghiệm $F_2(u)$ không hữu hạn và dẫn đến hàm sóng ψ không hữu hạn. Vì vậy ta loại bỏ nghiệm $F_2(u)$. Nghiệm $F(a, b, c, u)$ hữu hạn khi $u \rightarrow 0$ tức là khi $x \rightarrow \infty$ và $\varepsilon \rightarrow 1$ (h.3.8). Để có hàm sóng ψ hữu hạn khi $u \rightarrow 1$ (tức là khi $x \rightarrow -\infty$ và $\xi \rightarrow -1$) ta phải đặt $a = -n$ với $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ khi đó $F(-n, b, c, u)$ là một đa thức bậc n . Vậy hàm sóng của hạt có thể được viết dưới dạng :

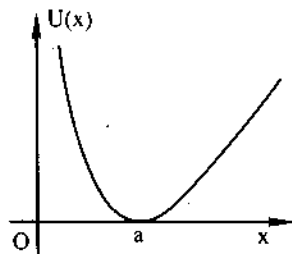
$$\psi_n(\xi) = (1-\varepsilon^2)^{\frac{\varepsilon}{2}} F\left(-n, \varepsilon+s+1, s+1, \frac{1-\xi}{2}\right) \text{ với } n = s - \varepsilon. \text{ Từ}$$

hệ thức $\varepsilon = s - n$ ta xác định được năng lượng E_n của hạt.

65. Phương trình Schrödinger của hạt có dạng :

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ E + 2U_0 - \frac{U_0 A^2}{x^2} - \frac{U_0}{A^2} x^2 \right\} \psi(x) = 0$$

$$\text{Đặt } \alpha = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar A}, \beta = \frac{\alpha A^2}{2} = \frac{A\sqrt{2mU_0}}{2\hbar}$$



Hình 3.9

$$\gamma = \frac{2(E + 2U_0)}{2\hbar^2\alpha} = \frac{mA(E + 2U_0)}{2\hbar\sqrt{2mU_0}}, z = \alpha x^2 \text{ (h.3.9)}$$

và chú ý rằng $\frac{d^2\psi}{dx^2} = 4\alpha \left\{ z \frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{1}{2} \frac{d\psi}{dz} \right\}$, ta có :

$$z \frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{1}{2} \frac{d\psi}{dz} + \left\{ \gamma - \frac{\beta^2}{z} - \frac{z}{4} \right\} \psi = 0$$

$$\text{hay} \quad \frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{1}{2z} \frac{d\psi}{dz} + \left\{ \frac{\gamma}{z} - \frac{\beta^2}{z^2} - \frac{1}{4} \right\} \psi = 0$$

Khi $z \rightarrow \infty$ thì nghiệm hữu hạn ψ_∞ của phương trình ở dạng tiệm cận $\frac{d^2\psi_\infty}{dz^2} - \frac{1}{4}\psi_\infty = 0$ có dạng $\psi_\infty = e^{\frac{z}{2}}$ (loại bỏ nghiệm $\psi_\infty = e^{-\frac{z}{2}}$ không hữu hạn khi $z \rightarrow \infty$).

Khi $z \rightarrow 0$ thì nghiệm của phương trình ở dạng tiệm cận $z \frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{1}{2} \frac{d\psi}{dz} - \frac{\beta^2}{z} \psi = 0$ được tìm dưới dạng $\psi_0 = z^{\frac{\lambda}{2}}$ trong đó λ là một số cần tìm sao cho khi $z \rightarrow 0$ thì ψ_0 là hữu hạn.

Đặt biểu thức của ψ_0 vào phương trình ở dạng tiệm cận ta tìm được :

$$z^{\frac{\lambda}{2}-1} \left\{ \frac{\lambda}{2} \left(\frac{\lambda}{2} - 1 \right) + \frac{1}{4} \lambda - \beta^2 \right\} = 0$$

Từ đây suy ra $\lambda^2 - \lambda - 4\beta^2 = 0$ hay

$$\lambda = \frac{1 \pm \sqrt{1+16\beta^2}}{2}$$

Nghiệm ứng với $\lambda = \frac{1 - \sqrt{1+16\beta^2}}{2} < 0$ dẫn đến ψ_0 không hữu hạn khi $z \rightarrow 0$. Ta loại bỏ nghiệm λ này. Nghiệm ứng với $\lambda = \frac{1 + \sqrt{1+16\beta^2}}{2} > 0$ dẫn đến $\psi_0 \rightarrow 0$ khi $z \rightarrow 0$. Ta chọn giá trị λ này. Nghiệm tiệm cận ψ_0 bây giờ có dạng :

$$\psi_0 = z^{\frac{\lambda}{2}} \text{ với } \lambda = \frac{1 + \sqrt{1 + 16\beta^2}}{2} = \frac{1 + \sqrt{1 + \frac{8mA^2U_0}{\hbar^2}}}{2}$$

Hàm sóng $\psi(z)$ được tìm dưới dạng :

$\psi(z) = e^{-z/2} \cdot z^{\lambda/2} \cdot F(z)$. Đặt biểu thức của $\psi(z)$ này vào phương trình vi phân của nó ta tìm được phương trình vi phân đối với $F(z)$.

$$z \frac{d^2 F}{dz^2} + (c - z) \frac{dF}{dz} - aF = 0$$

trong đó $a = \frac{\lambda}{2} + \frac{1}{4} - \gamma$, $c = \lambda + \frac{1}{2}$

Tìm nghiệm $F(z)$ dưới dạng chuỗi nguyên :

$$F(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$$

Đặt biểu thức $F(z)$ vào phương trình vi phân của nó ta có :

$$\sum_{k=0}^{\infty} z^k \{ (k+1)(c+k)a_{k+1} - (k+a)a_k \} = 0$$

Từ đây suy ra :

$$a_{k+1} = \frac{(k+a)}{(k+1)(c+k)} a_k$$

Để hàm $\psi(z)$ hữu hạn thì k phải dừng ở một giá trị $k_{\max} = n$ nào đó. Khi đó $a_n \neq 0$ và $a_{k_{\max}+1} = 0$. Từ điều kiện này ta có :

$$k_{\max} + a = n + a = 0 \text{ hay } a = -n.$$

Vì k là số nguyên không âm nên $k_{\max} = n$ cũng là số nguyên

không âm ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$). Từ hệ thức :

$$a = \frac{\lambda}{2} + \frac{1}{4} - \gamma = \frac{\lambda}{2} + \frac{1}{4} - \frac{mA(E + 2U_0)}{2\hbar\sqrt{2mU_0}} = -n$$

ta tìm được biểu thức năng lượng E_n của hạt.

$$E_n = \left(n + \frac{\lambda}{2} + \frac{1}{4} \right) \frac{2\hbar}{mA} \sqrt{2mU_0} - 2U_0 \text{ hay}$$

$$E_n = \left\{ n + \frac{2 + \sqrt{1 + 8mA^2U_0/\hbar^2}}{4} \right\} \frac{2\hbar}{mA} \sqrt{2mU_0} - 2U_0$$

$$n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Hàm sóng $\psi_n(z)$ của hạt có dạng :

$$\psi_n(z) = e^{-\frac{z}{2} \frac{\lambda}{z^2}} \sum_{k=0}^n a_k z^k$$

trong đó giữa các hệ số a_k có hệ thức :

$$a_{k+1} = \frac{(k-n)}{(k+1)(\lambda + \frac{1}{2} + k)} a_k$$

Ghi chú : Phương trình vi phân

$$z \frac{d^2F}{dz^2} + (c-z) \frac{dF}{dz} - aF = 0$$

có hai nghiệm $F_1(z)$ và $F_2(z)$

$$F_1(z) = F(a, c, z) = 1 + \frac{a}{c} \frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots$$

$$F_2(z) = z^{1-c} F(a-c+1, 2-c, z)$$

Vì $1 - c = 1 - \lambda - \frac{1}{2} = -\frac{\sqrt{1+16\beta^2}}{2} < 0$ nên nghiệm F_2 không

hữu hạn khi $z \rightarrow 0$. Nghiệm này ta loại bỏ. Nghiệm $F(a, c, z)$ là hàm siêu bội. Nghiệm này là hữu hạn khi $a = -n$ với $n = 0, 1, 2, \dots$. Vậy hàm sóng $\psi(z)$ có thể được viết dưới dạng :

$$\psi(z) = e^{-\frac{z}{2}} z^{\frac{\lambda}{2}} F\left(-n, \lambda + \frac{1}{2}, z\right); z = \alpha x^2.$$

Đặt $\omega = (2\sqrt{2mU_0}/mA)$ thì biểu thức năng lượng E_n được viết lại như sau :

$$E_n = (n + \delta) \hbar \omega, n = 0, 1, 2, \dots$$

trong đó

$$\delta = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \left\{ \sqrt{1 + \frac{8mU_0 A^2}{\hbar^2}} - \sqrt{\frac{8mU_0 A^2}{\hbar^2}} \right\}$$

66. Phương trình Schrödinger của hạt :

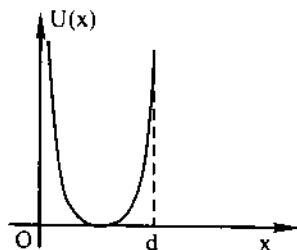
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - U_0 \cot^2 \frac{\pi}{d} x \right] \psi(x) = 0$$

Đặt $z = \cos^2 \alpha x$, $\alpha = \frac{\pi}{d}$ thì ta có :

$$1 - z = \sin^2 \alpha x,$$

$$\cot^2 \alpha x = \frac{1}{1-z} - 1$$

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{dz} \cdot \frac{dz}{dx}; \quad \frac{dz}{dx} = -2\alpha \cos \alpha x \sin \alpha x;$$



Hình 3.10

$$\begin{aligned}
\frac{d^2\psi}{dx^2} &= \left(\frac{dz}{dx}\right)^2 \frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{d}{dx}\left(\frac{dz}{dx}\right) \frac{d\psi}{dz} \\
&= 4\alpha^2 z(1-z) \frac{d^2\psi}{dz^2} + 2\alpha^2(1-2z) \frac{d\psi}{dz} + \frac{2m}{\hbar^2} \times \\
&\quad \times \left[E + U_0 - \frac{U_0}{1-z} \right] \psi = 0
\end{aligned}$$

Hàm sóng $\psi(x) = 0$ tại điểm $x = 0$ và $x = d$ (h. 3.10) nghĩa là tại điểm $z = 1$. Khi $z \rightarrow 1$ thì phương trình Schrödinger có dạng tiệm cận sau :

$$z(1-z) \frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{1}{2}(1-2z) \frac{d\psi}{dz} - \frac{mU_0}{2\hbar^2\alpha^2} \frac{\psi}{(1-z)} = 0$$

Nghiệm ψ của phương trình ở dạng tiệm cận sẽ bằng không khi $z \rightarrow 1$. Nghiệm này được tìm dưới dạng :

$$\psi_{z \rightarrow 1}(z) = (1-z)^q \text{ với } q > 0,$$

Đặt $\psi_{z \rightarrow 1}$ vào phương trình Schrödinger ở dạng tiệm cận ta có :

$$-(1-z)q^2 + q^2 - \frac{1}{2}q - \frac{mU_0}{2\hbar^2\alpha^2} = 0 \text{ khi } z \rightarrow 1$$

hay

$$q\left(q - \frac{1}{2}\right) - \frac{mU_0}{2\hbar^2\alpha^2} = 0$$

Giải phương trình ta tìm được nghiệm $q > 0$:

$$q = \frac{1}{4} \left\{ 1 + \sqrt{1 + \frac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2}} \right\}$$

Đặt $\beta^2 = \frac{m}{2\hbar^2\alpha^2}(E + U_0)$ và chú ý rằng

$$q\left(q - \frac{1}{2}\right) = \frac{mU_0}{2\hbar^2\alpha^2}$$

ta viết lại phương trình Schrödinger của hạt như sau :

$$z(1-z)\frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{1}{2}(1-2z)\frac{d\psi}{dz} + \left\{ \beta^2 - \frac{q\left(q - \frac{1}{2}\right)}{1-z} \right\} \psi = 0$$

Tìm nghiệm $\psi(z)$ của phương trình này dưới dạng :

$$\psi(z) = (1-z)^q F(z)$$

Thay biểu thức của $\psi(z) = (1-z)^q F(z)$ vào phương trình Schrödinger ta tìm được phương trình vi phân đối với hàm $F(z)$.

$$z(1-z)\frac{d^2F}{dz^2} + \left[\frac{1}{2} - (1+2q)z \right] \frac{dF}{dz} + (\beta^2 - q^2)F = 0$$

Nghiệm $F(z)$ được tìm dưới dạng chuỗi :

$$F(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$$

Khi đó ta có :

$$\begin{aligned} & \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)a_k z^{k-1} - \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)a_k z^k + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} a_k k z^{k-1} - (1+2q) \sum_{k=1}^{\infty} a_k k z^k + (\beta^2 - q^2) \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k = 0. \end{aligned}$$

Trong tổng đầu và tổng thứ ba ta thay chỉ số tổng $k \rightarrow k+1$, khi đó ta có :

$$\sum_{k=0}^{\infty} z^k \left\{ (k+1) \left(k + \frac{1}{2} \right) a_{k+1} - [(k+q)^2 - \beta^2] a_k \right\} = 0$$

Từ đây ta tìm được hệ thức giữa các hệ số a_k :

$$a_{k+1} = \frac{(k+q)^2 - \beta^2}{(k+1)\left(k + \frac{1}{2}\right)} a_k$$

Để hàm sóng $\psi(x)$ hữu hạn thì hàm $F(z)$ phải trở thành một đa thức bậc $k_{\max} = n$. Khi đó $a_n \neq 0$ nhưng $a_{k_{\max}+1} = a_{k_{\max}+2} = \dots = 0$.

Từ điều kiện $a_{k_{\max}+1} = 0$ suy ra :

$$(n+q)^2 - \beta^2 = 0, n = 0, 1, 2, 3$$

hay

$$\beta^2 = \frac{m}{2\hbar^2 \alpha^2} (E_n + U_0) = (n+q)^2$$

Năng lượng của hạt bằng :

$$E_n = \frac{2\hbar^2 \pi^2}{md^2} (n+q)^2 - U_0$$

với $q = \frac{1}{4} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{8mU_0 d^2}{\hbar^2 \pi^2}} \right)$ và $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Hàm sóng $\psi_n(z)$ có dạng :

$$\psi_n(z) = (1-z)^q \sum_{k=0}^n a_k z^k, \quad z = \cos^2\left(\frac{\pi x}{d}\right).$$

Chú ý rằng $\beta^2 = (n+q)^2$ ta viết lại hệ thức giữa các hệ số a_k như sau :

$$a_{k+1} = -\frac{(n-k)(n+k+2q)}{(k+1)(k+\frac{1}{2})} a_k$$

Cho a_0 ta xác định được tất cả a_k còn lại. Trạng thái cơ bản ứng với $n=0$. Khi đó $\psi_0(z) = (1-z)^q \cdot a_0$

Ghi chú : Phương trình vi phân của hàm $F(z)$ có thể viết :

$$z(1-z) \frac{d^2 F}{dz^2} + [c - (a+b+1)z] \frac{dF}{dz} - abF = 0 \text{ trong đó } c = \frac{1}{2}, a = q - \beta,$$

$b = q + \beta$. Hàm siêu bội :

$$F(a, b, c, z) = 1 + \frac{ab}{c} \frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)b(b+1)}{c(c+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots$$

là một nghiệm của phương trình vi phân nói trên. Nghiệm này trở thành một đa thức bậc n khi $a = -n$ với $n = 0, 1, 2, \dots$. Khi đó $b = q + \beta = n + 2q$. Hàm sóng $\psi(z)$ của hạt có thể được viết dưới dạng :

$$\psi_n(z) = (1-z)^q F(-n, n+2q; \frac{1}{2}, z) \quad \text{với } z = \cos^2\left(\frac{\pi x}{d}\right),$$

Nghiệm ứng với $q < 0$ thì $\psi_n(z)$ không hữu hạn khi $z \rightarrow 1$. Ta loại bỏ nghiệm này.

67. a) Toán tử Haminton trong toạ độ cầu có dạng :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \frac{\widehat{L}^2}{\hbar^2} \right\} + U(r)$$

trong đó

$$\widehat{L}^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta, \varphi}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}$$

Phương trình Schrödinger của hạt trong trường $U(r)$ có dạng :

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

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

Chú ý rằng $\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1)Y_{lm}(\theta, \varphi)$ ta tìm được phương trình vi phân xác định hàm bán kính R .

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)R}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)]R = 0,$$

hay

$$\frac{d^2}{dr^2} R + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)R}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)]R = 0$$

Hàm $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ là hàm cầu đã được xác định.

b) Đặt $R(r) = \frac{f(r)}{r}$ thì ta tìm được phương trình vi phân đối

với hàm $f(r)$:

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] f = 0$$

Khi $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ ta có :

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] f = 0$$

Ta tìm nghiệm tiệm cận của hàm f khi $r \rightarrow 0$ và khi $r \rightarrow \infty$:

- Khi $r \rightarrow 0$ thì phương trình ở dạng tiệm cận

$$\frac{d^2 f}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} f = 0$$

Có nghiệm $f(r) = Ar^\gamma$ với $\gamma(\gamma - 1) = l(l + 1)$.

Phương trình bậc hai đối với γ có hai nghiệm $\gamma_1 = l + 1$ và $\gamma_2 = -l$. Hàm $R(r) = \frac{f(r)}{r}$ hữu hạn khi $r \rightarrow 0$ chỉ khi $\gamma = \gamma_1 = l + 1$.

Khi đó $f = Ar^{l+1}$ và $R = Ar^l$. Nghiệm ứng với $\gamma = \gamma_2 = -l$ dẫn đến hàm $R \rightarrow \infty$ khi $r \rightarrow 0$. Ta loại bỏ nghiệm này.

- Khi $r \rightarrow \infty$ thì phương trình ở dạng tiệm cận.

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} f = 0$$

có nghiệm :

$$f(r) = A_1 e^{ikr} + A_2 e^{-ikr} \quad \text{khi } E > 0$$

$$f(r) = A_1 e^{-\beta r} + A_2 e^{\beta r} \quad \text{khi } E < 0$$

trong đó $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \beta^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$

Hàm $R(r)$ có dạng :

$$R(r) = \frac{f(r)}{r} = \frac{A_1 e^{ikr}}{r} + \frac{A_2 e^{-ikr}}{2} \quad \text{khi } E > 0$$

$$R(r) = \frac{f}{r} = \frac{A_1 e^{-\beta r}}{r} + \frac{A_2 e^{\beta r}}{r} \quad \text{khi } E < 0.$$

Ta khảo sát trạng thái dừng và trường hợp $E > 0$. Khi đó mật độ dòng hạt đi đến tâm trường và từ tâm trường đi ra là như nhau và do đó $|A_1| = |A_2|$. Đặt $A_1 = \frac{1}{2i} A e^{i\alpha}$ và $A_2 = -\frac{A}{2i} e^{-i\alpha}$ với A, α là những số thực, ta có :

$$R(r) = \frac{A \sin(kr + \alpha)}{r} \text{ khi } r \rightarrow \infty \text{ và } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0.$$

Ta xét trường hợp $E < 0$.

Khi $r \rightarrow \infty$ thì $A_2 \frac{e^{\beta r}}{r} \rightarrow \infty$. Vậy để R là hữu hạn ta đặt

$A_2 = 0$. Hàm $R(r)$ bây giờ có dạng :

$$R(r) = \frac{A_1 e^{-\beta r}}{r} \text{ khi } r \rightarrow \infty \text{ và } E < 0.$$

Đặt $\beta r = \frac{x}{2}$ thì phương trình đối với hàm f có dạng :

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{A}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] f = 0$$

trong đó :

$$A = \frac{Ze^2}{2} \frac{\beta}{|E|} = \sqrt{\frac{mZ^2 e}{2\hbar^2 |E|}} = \sqrt{-\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 E}}.$$

Khi $r \rightarrow 0$ thì hàm $f(r) = rR(r) \sim r^{l+1}$ và khi $r \rightarrow \infty$ thì hàm $f(r) = rR(r) \sim e^{-\beta r}$. Nghiệm $f(x)$ được tìm dưới dạng :

$$f(x) = e^{-\frac{x}{2}} x^{l+1} y(x).$$

Khi đó hàm $y(x)$ thoả mãn phương trình :

$$x \frac{d^2 y}{dx^2} + [2(l+1) - x] \frac{dy}{dx} + [A - (l+1)] y = 0$$

Tìm nghiệm $y(x)$ dưới dạng chuỗi :

$$y(x) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k x^k$$

Thay biểu thức của y vào phương trình vi phân của nó ta có :

$$\sum_{k=0}^{\infty} x^k \{ (k+1)[k+2(l+1)]a_{k+1} + [A - (l+k+1)]a_k \} = 0.$$

Các hệ số của x^k phải bằng không, từ đó suy ra :

$$a_{k+1} = \frac{k+l+1-A}{(k+1)(k+2l+2)} a_k$$

Để hàm $R(x)$ hữu hạn thì chuỗi y phải trở thành một đa thức bậc $k_{\max} = N$ (N là số nguyên không âm). Khi đó $a_N \neq 0$ và $a_{N+1} = 0$.

Điều kiện $a_{N+1} = 0$ dẫn đến :

$$A = N + l + 1 = n = \left(-\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 E_n} \right)^{1/2}$$

Vì $N = 0, 1, 2, 3$ nên $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ và $n = 1, 2, 3, \dots$. Năng lượng E_n của hạt được xác định bằng công thức :

$$E_n = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Hàm sóng bán kính $R_{nl}(r)$ có dạng :

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r} e^{-\beta_n r} (2\beta_n r)^{l+1} y_{nl}(2\beta_n r)$$

trong đó
$$\beta_n = \left(-\frac{2mE_n}{\hbar^2} \right)^{1/2} = \frac{me^2 Z}{\hbar^2 n} \quad \text{và} \quad y(x) = \sum_{k=0}^{N=n-l-1} a_k x^k$$

$$a_{k+1} = \frac{k+l+1-n}{(k+1)(k+2l+2)} a_k$$

Ghi chú : Phương trình vi phân của hàm $y(x)$ có thể viết :

$$x \frac{d^2 y}{dx^2} + (c - x) \frac{dy}{dx} - ay = 0$$

Với $a = l + 1 - A$, $c = 2l + 2$.

Phương trình có nghiệm là hàm siêu bội :

$$y = (a, c, x) = 1 + \frac{a x}{c \cdot 1!} + \frac{a(a+1) x^2}{c(c+1) 2!} + \frac{a(a+1)(a+2) x^3}{c(c+1)(c+2) 3!} + \dots$$

Nghiệm này trở thành một đa thức bậc N khi $a = -N$ với $N = 0, 1, 2$ hay $A = N + l + 1 = n$. Chú ý rằng $-N + k = -(N - k)$ ta viết được :

$$y(-N, c, x) = 1 - \frac{N x}{c \cdot 1!} + \frac{N(N-1) x^2}{c(c+1) 2!} - \dots + (-1)^N \frac{(c-1)!}{(c+N-1)!} x^N.$$

Đa thức $L_k^j(x)$ liên hệ với đa thức $y[-(k-j), j+1, x]$ bằng hệ thức :

$$L_k^j(x) = (-1)^j \frac{(k!)^2}{j!(k-j)!} y(-(k-j), j+1, x)$$

(với j là số nguyên và $0 \leq j \leq k$) gọi là đa thức Lagơr (Laguerre). Đa thức $y(-N, c, x)$ là nghiệm của phương trình vi phân đối với hàm $y(x)$ thì đa thức Lagơr

$$L_{N+c-1}^{c-1}(x) = (-1)^{c-1} \frac{[(N+c-1)!]^2}{(c-1)! N!} y(-N, c, x)$$

cũng là nghiệm của phương trình vi phân này. Chú ý rằng $c-1 = 2l+1$, $N+C-1 = n+l$, ta có :

$$R_{nl}(r) = A_{nl} e^{-\beta_n r} (2\beta_n r)^l L_{n+l}^{2l+1}(2\beta_n r)$$

trong đó A_{nl} là thừa số được xác định từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng.

Dễ dàng thấy rằng :

$$\begin{aligned} L_k^j(x) = (-1)^k \frac{k!}{(k-j)!} & \left\{ x^{k-j} - \frac{k(k-j)}{1!} x^{k-j-1} + \right. \\ & + \frac{k(k-1)(k-j)(k-j-1)}{2!} x^{k-j-2} - \\ & - \frac{k(k-1)(k-2)(k-j)(k-j-1)(k-j-2)}{3!} x^{k-j-3} + \dots \end{aligned}$$

Có thể viết biểu thức $L_k^j(x)$ này dưới dạng khác (dưới dạng vi phân) ngắn gọn hơn :

$$L_k^j(x) = \frac{d^j}{dx^j} L_k(x)$$

trong đó $L_k(x) = e^x \frac{d^k}{dx^k} (x^k e^{-x})$ gọi là đa thức Lagơơ đơn giản.

68. Ta xác định thừa số chuẩn hoá A_{nl} . Điều kiện chuẩn hoá của hàm sóng $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$

$$\int \psi_{nlm}^*(r, \theta, \varphi) \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = 1$$

Chú ý rằng $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ và

$$\int \psi_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

ta có :

$$\int_0^\infty R_{nl}(r) R_{nl}(r) r^2 dr = 1.$$

Đặt $k = n + l$, $j = 2l + 1$ và $x = 2\beta_n r$ thì hàm $R_{nl}(x)$ có dạng

$$R_{nl}(x) = A_{nl} e^{-\frac{x}{2}} x^{\frac{j-1}{2}} L_k^j(x)$$

Từ điều kiện chuẩn hoá hàm $R_{nl}(r)$ ta xác định được A_{nl} :

$$A_{nl} = \sqrt{\frac{(2\beta_n)^3}{I}} \text{ trong đó } I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x} x^{j+1} L_k^j(x) \times L_k^j(x) dx.$$

Để tính A_{nl} ta cần tính tích phân I . Ta biết :

$$L_k^j = \frac{d^j}{dx^j} L_k(x), \quad L_k(x) = e^x \frac{d^k}{dx^k} (e^{-x} x^k)$$

Đặt $u = e^{-x}$, $v = x^k$ và dùng quy tắc tính đạo hàm

$$\begin{aligned} \frac{d^k}{dx^k} (uv) &= (uv)^{(k)} = u^{(k)} v + \frac{k}{1!} u^{(k-1)} v^{(1)} + \dots + \frac{k(k-1)\dots 1}{k!} uv^{(k)} \\ &= (-1)^k e^{-x} \left\{ x^k - \frac{k}{1!} k x^{k-1} + \frac{k(k-1)}{2!} k(k-1) x^{k-2} - \dots \right\} \end{aligned}$$

$$\text{ta có : } L_k(x) = (-1)^k \left\{ x^k - \frac{k}{1!} k x^{k-1} + \frac{k(k-1)}{2!} \times \right.$$

$$\left. \times k(k-1) x^{k-2} - \frac{k(k-1)(k-2)}{3!} k(k-1)(k-2) x^{k-3} + \dots \right\}$$

$$\begin{aligned} L_k^j(x) &= \frac{d^j}{dx^j} L_k(x) = (-1)^k \frac{k!}{(k-j)!} \left\{ x^{k-j} - \frac{k(k-j)}{1!} x^{k-j-1} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{k(k-1)}{2!} (k-j)(k-j-1) x^{k-j-2} - \dots \right\} \end{aligned}$$

$$x^{j+1}L_k^j(x) = (-1)^k \frac{k!}{(k-j)!} \left\{ x^{k+1} - \frac{k(k-j)}{1!} x^k + \right. \\ \left. + \frac{1}{2!} k(k-1)(k-j)(k-j-1)x^{k-1} - \dots \right\}$$

Để tính tích phân I cần tính các tích phân có dạng sau :

$$A = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\gamma} L_k^j(x) dx = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\gamma} \frac{d^j}{dx^j} L_k(x) dx \\ = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\gamma} d \left(\frac{d^{j-1}}{dx^{j-1}} L_k(x) \right)$$

Lấy tích phân từng phần j lần ta được :

$$A = (-1)^j \int_0^{\infty} L_k(x) \frac{d^j}{dx^j} (e^{-x} x^{\gamma}) dx$$

Đặt $u = e^{-x}$, $v = x^{\gamma}$, ta có :

$$\frac{d^j}{dx^j} (u.v) = (u.v)^{(j)} = (u)^j v + \frac{j}{1!} u^{(j-1)} v^{(1)} + \\ + \frac{j(j-1)}{2!} u^{(j-2)} v^{(2)} + \dots + u v^{(j)} = \\ = (-1)^j e^{-x} \left\{ x^{\gamma} - \frac{j}{1!} \gamma x^{\gamma-1} + \frac{j(j-1)}{2!} \gamma(\gamma-1) x^{\gamma-2} - \dots + x^{\gamma-j} \right\}$$

Để tính tích phân A cần tính các tích phân có dạng sau :

$$B = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\alpha} L_k(x) dx = \int_0^{\infty} x^{\alpha} \frac{d^k}{dx^k} (e^{-x} x^k) dx =$$

$$= \int_0^{\infty} x^{\alpha} d \left(\frac{d^{k-1}}{dx^{k-1}} (e^{-x} x^k) \right) \text{ với } \alpha = \gamma, \gamma - 1, \dots, \gamma - j$$

Lấy tích phân từng phần α lần, ta có :

$$B = (-1)^{\alpha} \alpha! \int_0^{\infty} \frac{d^{k-\alpha}}{dx^{k-\alpha}} (e^{-x} x^k) dx$$

Khi $k > \alpha$ thì ta có :

$$B = (-1)^{\alpha} \alpha! \frac{d^{k-\alpha-1}}{dx^{k-\alpha-1}} (e^{-x} x^k) \Big|_0^{\infty}$$

Chú ý rằng $\frac{d^j (e^{-x} x^{\gamma})}{dx^j} \Big|_0^{\infty} = 0$ (với $j = k - \alpha - 1, \gamma = k$) ta được

$B = 0$. Vậy :

$$B = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\alpha} L_k(x) dx = 0 \text{ khi } k > \alpha$$

Khi $k = \alpha$, ta có:

$$B = (-1)^k k! \int_0^{\infty} e^{-x} x^k dx$$

Đặt $u = x^k$, $dv = -e^{-x} dx$ và lấy tích phân từng phần k lần ta được $B = (-1)^k (k!)^2$.

Tích phân A được biểu diễn qua các tích phân B . Nếu $k > \gamma$ thì $k > \alpha$ ($\alpha = \gamma, \gamma - 1, \dots, \gamma - j$) và lúc đó tất cả các tích phân B đều bằng không và do đó $A = 0$.

Khi $k = \gamma$ ta có :

$$A = (-1)^j \int_0^{\infty} L_k(x) \frac{d^j}{dx^j} (e^{-x} x^k) dx$$

Chú ý rằng

$$\frac{d^j}{dx^j}(e^{-x}x^k) = (-1)^j e^{-x} \left\{ x^k - \frac{j}{1!} kx^{k-1} + \frac{j(j-1)k(k-1)}{2!} x^{k-2} + \dots \right\}$$

và $\int_0^\infty e^{-x} x^\alpha L_k(x) dx = 0$ khi $\alpha = k-1, k-2, \dots, k-j$ ta tìm được :

$$A = (-1)^j \int_0^\infty L_k(x) (-1)^j e^{-x} x^k dx = \int_0^\infty e^{-x} x^k L_k(x) dx = (-1)^k (k!)^2$$

Bây giờ ta tính tích phân I

$$I = \int_0^\infty e^{-x} L_k^j(x) \cdot x^{j+1} L_k^j(x) dx$$

Chú ý :

$$x^{j+1} L_k^j(x) = (-1)^k \frac{k!}{(k-j)!} \left\{ x^{k+1} - \frac{k(k-j)}{1!} x^k + \right. \\ \left. + \frac{1}{2!} \times k(k-1)(k-j)(k-j-1)x^{k-1} - \dots \right\}$$

và

$$A = \int_0^\infty e^{-x} x^\gamma L_k^j(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{khi } k > \gamma \ (\gamma = k-1, k-2, \dots) \\ (-1)^k (k!)^2 & \text{khi } k = \gamma \end{cases}$$

ta có :

$$I = (-1)^k \frac{k!}{(k-j)!} \left\{ \int_0^\infty e^{-x} L_k^j(x) \cdot x^{k+1} dx - \frac{k(k-j)}{1!} \times \int_0^\infty e^{-x} L_k^j(x) x^k dx \right\} \\ (-1)^k \frac{k!}{(k-j)!} \left\{ \int_0^\infty x^{k-1} e^{-x} L_k^j(x) dx - \frac{k(k-j)}{1!} (-1)^k (k!)^2 \right\}$$

Để tính I ta cần phải tính tích phân sau :

$$C = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{k+1} \frac{d^j}{dx^j} (L_k(x)) dx.$$

Lấy tích phân từng phần j lần, ta có :

$$C = (-1)^j \int_0^{\infty} L_k(x) \frac{d^j}{dx^j} (e^{-x} x^{k+1}) dx$$

Chú ý rằng

$$\frac{d^j}{dx^j} (e^{-x} x^{k+1}) = (-1)^{j-x} \left\{ x^{k+1} - \frac{j(k+1)}{1!} x^k + \frac{j(j-1)}{2!} (k+1)k x^{k-1} - \dots \right\}$$

và $\int_0^{\infty} x^{\alpha} e^{-x} L_k(x) dx = 0$ khi $\alpha = k-1, k-2, \dots$

ta được :

$$\begin{aligned} C &= (-1)^j \int_0^{\infty} L_k(x) (-1)^j e^{-x} \left\{ x^{k+1} - \frac{j(k+1)}{1!} x^k \right\} dx + 0 \\ &= \int_0^{\infty} e^{-x} x^{k+1} L_k(x) dx - \int_0^{\infty} j(k+1) e^{-x} x^k L_k(x) dx \\ &= \int_0^{\infty} e^{-x} x^{k+1} \cdot e^x \frac{d^k}{dx^k} (e^{-x} x^k) dx - j(k+1) (-1)^k (k!)^2 \\ &= \int_0^{\infty} x^{k+1} \frac{d^k}{dx^k} (e^{-x} x^k) dx - j(k+1) (-1)^k (k!)^2 \\ &= (-1)^k \int_0^{\infty} e^{-x} x^k \frac{d^k}{dx^k} (x^{k+1}) - j(k+1) (-1)^k (k!)^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= (-1)^k (k+1)! \int_0^{\infty} e^{-\lambda} x^k x dx - j(k+1)(-1)^k (k!)^2 \\
&= (-1)^k (k+1)! \int_0^{\infty} x^{k+1} d(-e^{-\lambda}) - j(k+1)(-1)^k (k!)^2 \\
&= (-1)^k [(k+1)!]^2 - (-1)^k j(k+1)(k!)^2 \\
I &= (-1)^k \frac{k!}{(k-j)!} \left\{ (-1)^k [(k+1)!]^2 - (-1)^k j(k+1)(k!)^2 - \right. \\
&\quad \left. - (-1)^k k(k-j)(k!)^2 \right\}.
\end{aligned}$$

Chú ý $(-1)^{2k} = 1$, $(k+1)! = k!(k+1)$ ta có :

$$I = \frac{(k!)^3}{(k-j)!} (2k-j+1) \text{ với } k = n+l, j = 2l+1.$$

$$I = \frac{[(n+l)!]^3 2n}{(n-l-1)!}, A_{nl} = \sqrt{\frac{4(n-l-1)!}{n^4 [(n+l)!]^3} \left(\frac{Zme^2}{\hbar^2} \right)^3}.$$

69. Phương trình Schrödinger của electron :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U(r)\psi = E\psi$$

trong đó $\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \nabla_{\theta, \varphi}^2$, $U(r) = -\frac{e^2}{r}$.

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

Hàm sóng chỉ phụ thuộc vào r chỉ khi $Y(\theta, \varphi) = \text{const}$

Khi đó $\nabla_{\theta, \varphi}^2 Y = 0$ và ta có :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) \right\} \psi(r) + U(r)\psi(r) = E\psi(r).$$

Đặt $\psi(r) = A(1 + ar)e^{\alpha r}$ vào phương trình Schrödinger này ta tìm được :

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2m} 4a\alpha - \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 - e^2 a - E \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} a\alpha^2 - Ea \right] r + \\ & + \frac{1}{r} \left[-\frac{\hbar^2}{m} (a + \alpha) - e^2 \right] = 0 \end{aligned}$$

Đẳng thức này bằng không đối với mọi giá trị của r chỉ khi :

$$\begin{aligned} & +\frac{\hbar^2}{2m} 4a\alpha + \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 + e^2 a + E = 0, \\ & +\frac{\hbar^2}{2m} a\alpha^2 + Ea = 0, \quad +\frac{\hbar^2}{m} (a + \alpha) + e^2 = 0. \end{aligned}$$

Từ đây suy ra :

$$\alpha = a = -\frac{me^2}{2\hbar^2}, \quad E = -\frac{me^4}{8\hbar^2}.$$

Ta biết $E_n = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar n^2}$. Đối với hiđrô $Z = 1$.

Dễ thấy rằng $2n^2 = 8$ hay $n = 2$. Hàm $Y(\theta, \varphi) = \text{const}$ chỉ khi $l = 0, m = 0$ ($P_0^0 = 1, Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$). Vậy trạng thái $\psi(r) = A(1 + ar)e^{\alpha r}$ tương ứng với các số lượng tử $n = 2, l = 0, m = 0$.

70. Ta tìm nghiệm dưới dạng :

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

Phương trình của phân xuyên tâm $R(r)$ trong vùng $r \leq a$ ($U(r) = 0$) sẽ là :

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R = 0$$

Khi $r > a$ thì $R(r) = 0$. Đặt $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ ta có :

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0$$

hay :

$$\frac{d^2 R}{ds^2} + \frac{2}{s} \frac{dR}{ds} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{s^2} \right] R(s) = 0$$

trong đó $s = kr$. Đặt $R(s) = \frac{Z(s)}{\sqrt{s}}$ và chú ý

$$\frac{dR}{ds} = \frac{1}{\sqrt{s}} \left\{ \frac{dZ}{ds} - \frac{Z}{2s} \right\}$$

$$\frac{d^2 R}{ds^2} = \frac{1}{\sqrt{s}} \left\{ \frac{d^2 Z}{ds^2} - \frac{dZ}{s ds} + \frac{3}{4} \frac{Z}{s^2} \right\}$$

ta tìm được phương trình đối với Z :

$$\frac{d^2 Z}{ds^2} + \frac{1}{s} \frac{dZ}{ds} + \left[1 - \frac{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2}{s^2} \right] Z = 0$$

Khi $s \rightarrow 0$ phương trình ở dạng tiệm cận

$$\frac{d^2 Z}{ds^2} + \frac{1}{s} \frac{dZ}{ds} - \frac{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2}{s^2} Z = 0$$

Có nghiệm $Z_0 = As^q$. Khi đó $R_0 = As^{q-\frac{1}{2}}$. Để hàm $R_0(s)$ hữu hạn khi $r \rightarrow 0$ ta phải có $q - \frac{1}{2} \geq 0$.

Đặt biểu thức $Z_0 = As^q$ vào phương trình ở dạng tiệm cận ta tìm được :

$$q^2 - \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 = 0 \text{ hay } q = \pm \left(l + \frac{1}{2}\right)$$

Để $R(s)$ hữu hạn ta chọn nghiệm $q = l + \frac{1}{2}$.

Nghiệm $Z(s)$ được tìm dưới dạng :

$$Z(s) = s^q y(s)$$

Khi đó phương trình đối với hàm y sẽ là :

$$s \frac{d^2 y}{ds^2} + (2q+1) \frac{dy}{ds} + sy = 0$$

Nghiệm $y(s)$ được tìm dưới dạng chuỗi :

$$y(s) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k s^k$$

Đặt biểu thức của y này vào phương trình vì phân của nó ta có :

$$\begin{aligned} \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)a_k s^{k-1} + (2q+1)a_1 + \sum_{k=2}^{\infty} (2q+1)ka_k s^{k-1} + \\ + \sum_{k=0}^{\infty} a_k s^{k+1} = 0. \end{aligned}$$

Trong tổng đầu và tổng thứ hai ta thay chỉ số tổng $k \rightarrow k + 2$ ta được :

$$(2q + 1)a_1 + \sum_{k=0}^{\infty} s^{k+1} \{ (k+2)(k+2q+2)a_{k+2} + a_k \} = 0$$

Đồng thức này đồng nhất bằng không chỉ khi

$$(k+2)(k+2q+2)a_{k+2} + a_k = 0 \text{ và } a_1 = 0.$$

Từ đây suy ra :

$$a_{k+2} = -\frac{a_k}{(k+2)(k+2q+2)}, a_1 = 0$$

Các hệ số a_k với k lẻ đều bằng không. Cho a_k ta xác định được a_{k+2} với $k = 0, 2, 4, \dots$

Cho a_0 ta tìm được $a_2, a_4, a_6, \dots$ như sau :

$$a_2 = -\frac{a_0}{2(2q+2)} = \frac{a_0}{2^2(q+1)!}$$

$$a_4 = -\frac{a_2}{(2+2)(2q+2+2)} = \frac{a_0}{2^4(q+1)(q+2)2!}$$

.....

$$a_{2q} = (-1)^p \frac{a_0}{2^{2p}(q+1)(q+2)\dots(q+p).p!},$$

$$k = 2p : p = 0, 1, 2$$

Để viết các hệ số a_{2p} một cách gọn ta dùng hàm $\Gamma(q)$:

$$\Gamma(q) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{q-1} dx$$

Hàm này có các tính chất: $\Gamma(1) = 1$, $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$.

$$\begin{aligned}\Gamma(q+1) &= q\Gamma(q) = q(q-1)\Gamma(q-2) = \\ &= q(q-1)(q-2)\Gamma(q-3) = \\ \Gamma(q+p+1) &= (q+p)\Gamma(q+p) = \\ &= (q+p)(q+p-1)\Gamma(q+p-1) = \dots\end{aligned}$$

Để thấy rằng :

$$\begin{aligned}(q+1)(q+2)\dots(q+p) &= \frac{\Gamma(q+p+1)}{\Gamma(q+1)} \\ a_{2p} &= (-1)^p \frac{a_0}{2^{2p}p!} \frac{\Gamma(q+1)}{\Gamma(q+p+1)}; \quad 2p = k \\ Z(s) &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k s^{k+q} = \sum_{p=0}^{\infty} a_{2p} s^{2p+q} \\ &= \sum_{p=0}^{\infty} (-1)^p \frac{a_0}{2^{2p}p!} \frac{\Gamma(q+1)}{\Gamma(q+p+1)} s^{(2p+q)}\end{aligned}$$

Vì hàm sóng R chưa chuẩn hoá thì tiện hơn cả ta chọn

$$a_0 = \frac{1}{2^q \Gamma(q+1)}.$$

Khi đó ta có :

$$Z(s) = \sum_{p=0}^{\infty} (-1)^p \frac{\left(\frac{s}{2}\right)^{2p+q}}{p! \Gamma(p+q+1)} = J_q(s)$$

Hàm $J_q(s)$ gọi là hàm Betsen với $q = l + \frac{1}{2}$

Hàm sóng $R_{kl}(r)$ có dạng :

$$R_{kl}(r) = A \frac{J_l + \frac{1}{2}}{\sqrt{kr}}$$

trong đó A là thừa số chuẩn hoá.

Từ điều kiện liên tục của hàm sóng $R_{kl}(a) = 0$ suy ra :

$$J_l + \frac{1}{2}(ka) = 0$$

Nghiệm của phương trình này là $k_{nl}a = \lambda_{nl}$

Năng lượng E_{nl} của hạt sẽ là :

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2 k_{nl}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \lambda_{nl}^2}{2ma^2}$$

Trường hợp đặc biệt khi $l = 0$, khi đó $q = \frac{1}{2}$ và ta có :

$$J_{\frac{1}{2}}(s) = \frac{1}{\sqrt{2s}} \sum_{p=0}^{\infty} (-1)^p \frac{s^{2p+1}}{2^{2p} p! \Gamma\left(p + \frac{1}{2} + 1\right)}$$

Chú ý rằng :

$$\Gamma(q+p+1) = (q+p)(q+p-1) \dots (q+2)(q+1)q\Gamma(q)$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2} + p + 1\right) = \left(\frac{1}{2} + p\right)\left(\frac{1}{2} + p - 1\right) \dots \left(\frac{1}{2} + 2\right) \times$$

$$\times \left(\frac{1}{2} + 1\right) \dots \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right)$$

$$= \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot \frac{1 \times 3 \times 5 \times 7 \times (2p+1)}{2^p}$$

$$2^{2p} p! \Gamma\left(\frac{1}{2} + p + 1\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (2p + 1)!$$

ta có :

$$J_{\frac{1}{2}}(s) = \sqrt{\frac{2}{\pi s}} \cdot \sum_{p=0}^{\infty} (-1)^p \frac{s^{2p}}{(2p+1)!} = \sqrt{\frac{2}{\pi s}} \sin(s).$$

$$R_{k_0}(r) = A \frac{J_{\frac{1}{2}}(kr)}{\sqrt{kr}} = A \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{\sin(kr)}{kr}$$

Điều kiện $R_{k_0}(a) = 0$ dẫn đến $\sin(ka) = 0$ hay $k_n a = n\pi$ với $n = 1, 2, 3, \dots$ (giá trị $n = 0$ cho $R_{k_0}(r) = 0$ ở mọi điểm trong giếng thế bị loại bỏ vì xác suất tìm hạt trong giếng thế khác không). Năng lượng của hạt :

$$E_{n_0} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{a^2}, \quad n = 1, 2, 3,$$

71. Giải phương trình Schrödinger trong trường đối xứng cầu.

Xét phương trình đối với hàm bán kính $R(r)$. Đặt $R(r) = \frac{1}{r} f(r)$ ta

được phương trình :

$$\frac{d^2}{dr^2} f + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] f = 0$$

Đối với hạt có mômen xung lượng bằng không ta đặt $l = 0$. Khi đó ta có :

$$\frac{d^2}{dr^2} f + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + U_0 e^{-\frac{r}{a}} \right] f = 0$$

$$\text{Đặt } \xi = e^{-\frac{1}{2a}r}, \alpha = \sqrt{\frac{8mU_0 a^2}{\hbar^2}}, \beta^2 = -\frac{8mEa^2}{\hbar^2}$$

ta có phương trình

$$\frac{d^2 f}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{df}{d\xi} + \left(\alpha^2 - \frac{\beta^2}{\xi^2} \right) f(\xi) = 0$$

Nếu đặt $s = \alpha\xi = \frac{2a}{\hbar} \sqrt{2mU_0} e^{-\frac{r}{2a}}$ thì ta có :

$$\frac{d^2 f}{ds^2} + \frac{1}{s} \frac{df}{ds} + \left(1 - \frac{\beta^2}{s^2} \right) f(s) = 0$$

Xét trường hợp $E < 0$. Khi đó $\beta^2 > 0$. Khi $r \rightarrow \infty$ thì $R(r) \rightarrow 0$. Vậy khi $s \rightarrow 0$ thì $f(s) \rightarrow 0$ để hàm $R(r) \rightarrow 0$ khi $r \rightarrow \infty$. Nghiệm $f(s)$ để hàm $R(r)$ hữu hạn ($R \rightarrow 0$ khi $r \rightarrow \infty$) là hàm Betxen (Bessel) :

$$f_\beta(s) = J_\beta(s) = \sum_{p=0}^{\infty} (-1)^p \frac{\left(\frac{s}{2}\right)^{2p+\beta}}{p! \Gamma(p+\beta+1)} \text{ với } \beta > 0.$$

Hàm bán kính $R(r)$ có dạng :

$$R_\beta(s) = \frac{A}{r} J_\beta(\alpha e^{-\frac{r}{2a}})$$

trong đó A là thừa số chuẩn hoá hàm sóng $R(r)$. Từ điều kiện $R_\beta(r)$ phải hữu hạn tại $r = 0$ ta có phương trình $J_\beta(\alpha) = 0$. Phương trình $J_\beta(\alpha) = 0$ xác định các mức năng lượng của hạt. Nhờ bảng hàm Betxen ta có thể biết được những giá trị β nào đó làm thoả mãn phương trình này. Biết được β ta xác định được E bằng công thức :

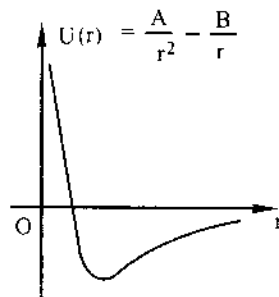
$$E = -\frac{\hbar^2}{8ma^2}\beta^2$$

72. Phương trình Schrödinger đối với hàm bán kính $R(r)$ (h.3.11)

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \left(\frac{A}{r^2} - \frac{B}{r} \right) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R = 0$$

Đặt $R(r) = \frac{f(r)}{r}$ ta có phương trình :

$$\frac{d^2f}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{A}{r^2} + \frac{B}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] f(r) = 0$$



Hình 3.11

Xét trường hợp $E < 0$. Đặt $\alpha = \left(-\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2}$, $x = 2\alpha r$.

$$\frac{2mA}{\hbar^2} + l(l+1) = s(s+1) \text{ với}$$

$$s = \frac{1}{2} \times \left\{ -1 + \sqrt{(2l+1)^2 + \frac{8mA}{\hbar^2}} \right\} > 0, \quad \beta = \frac{B}{\hbar} \left(\frac{m}{-2E} \right)^{1/2}$$

ta có :

$$\frac{d^2f}{dx^2} + \left\{ -\frac{1}{4} + \frac{\beta}{x} - \frac{s(s+1)}{x^2} \right\} f = 0$$

Nghiệm $f(x)$ được tìm dưới dạng : $f(x) = e^{-\frac{x}{2}} x^{s+1} y(x)$. Hàm $y(x)$ thỏa mãn phương trình :

$$x \frac{d^2 y}{dx^2} + [2(s+1) - x] \frac{dy}{dx} + [\beta - (s+1)]y = 0$$

Tìm nghiệm $y(x)$ dưới dạng chuỗi : $y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$

Thay biểu thức của y vào phương trình vi phân của nó ta có :

$$\sum_{k=0}^{\infty} x^k \{ (k+1)[k+2(s+1)]a_{k+1} + [\beta - (k+s+1)]a_k \} = 0$$

Từ đây ta có hệ thức truy toán :

$$a_{k+1} = \frac{k+s+1-\beta}{(k+1)(k+2s+2)} a_k$$

Để hàm $R(r)$ hữu hạn thì k phải dừng ở một giá trị $k_{\max} = N$ ($N = 0, 1, 2, 3, \dots$). Khi đó $a_{N+1} = 0$. Từ điều kiện này ta có :

$$\beta = N + s + 1 = \frac{B}{\hbar} \left(\frac{m}{-2E} \right)^{1/2}$$

hay

$$E_{Nl} = -\frac{mB^2}{2\hbar^2(N+s+1)^2} = -\frac{2mB^2}{\hbar^2} \times \left\{ 2N+1 + \sqrt{(2l+1)^2 + \frac{8mA}{\hbar^2}} \right\}^{-2},$$

$$N = 0, 1, 2, \dots$$

Hàm sóng $R_{Nl}(r)$ có dạng : $R_{Nl}(r) = \frac{f_{Nl}(2\alpha r)}{r}$

$$f(2\alpha r) = e^{-\alpha r} (2\alpha r)^{s+1} y_{Nl}(2\alpha r)$$

$$y_{Nl}(x) = \sum_{k=0}^N a_k x^k$$

$$a_{k+1} = \frac{k-N}{(k+1)(k+2s+2)} a_k$$

Ghi chú : Phương trình vi phân của hàm $y(x)$ có dạng :

$$x \frac{d^2 y}{dx^2} + (c-x) \frac{dy}{dx} - ay = 0$$

trong đó $c = 2s + 2$, $a = s + 1 - \beta$. Hàm siêu bội

$$y(a, c, x) = 1 + \frac{a}{c} \frac{x}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)} \frac{x^2}{2!} + \dots$$

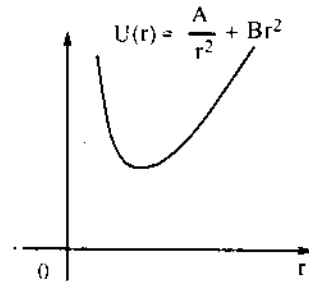
là nghiệm của phương trình. Nghiệm này trở thành một đa thức bậc N khi $a = -N$. Vậy hàm $R_{N/}(x)$ có thể viết :

$$R_{N/}(x) = A_{N/} e^{-\frac{x}{2}} x^s y_{N/}(-N, 2s+2, x), \text{ với } x = 2\alpha r.$$

73. Ta xét trường hợp phổ năng lượng gián đoạn.

Phương trình Schrödinger đối với hàm bán kính (h.3.12)

$$\left\{ \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \times \left[E - \frac{A}{r^2} - Br^2 - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] \right\} \times R = 0$$



Hình 3.12

$$\text{Đặt } \xi = \sqrt{\frac{2mB}{\hbar^2}} r^2, \quad s = \frac{1}{4} \left\{ -1 + \sqrt{(2l+1)^2 + \frac{8mA}{\hbar^2}} \right\}$$

$$(\text{hay } 2s(2s+1) = l(l+1) + \frac{2mA}{\hbar^2}) \cdot \sqrt{\frac{2m}{B}} \cdot \frac{E}{\hbar} = 4(n+s) + 3$$

và chú ý rằng : $\frac{2}{r} \frac{dR}{dr} = \frac{4\sqrt{2mB}}{\hbar} \frac{dR}{d\xi}$,

$$\frac{d^2 R}{dr^2} = \frac{2\sqrt{2mB}}{\hbar} \left\{ 2\xi \frac{d^2 R}{d\xi^2} + \frac{dR}{d\xi} \right\} \text{ ta tìm được :}$$

$$\xi \frac{d^2 R}{d\xi^2} + \frac{3}{2} \frac{dR}{d\xi} + \left\{ n + s + \frac{3}{4} - \frac{s\left(s + \frac{1}{2}\right)}{\xi} - \frac{\xi}{4} \right\} R = 0$$

Tìm các nghiệm tiệm cận khi $\xi \rightarrow \infty$ và khi $\xi \rightarrow 0$. Khi $\xi \neq 0$ ta có :

$$\frac{d^2 R}{d\xi^2} + \frac{3}{2\xi} \frac{dR}{d\xi} + \left\{ \frac{n + s + \frac{3}{4}}{\xi} - \frac{s\left(s + \frac{1}{2}\right)}{\xi^2} - \frac{1}{4} \right\} R = 0$$

$$\text{Khi } \xi \rightarrow \infty \text{ ta có : } \frac{d^2 R}{d\xi^2} - \frac{1}{4} R = 0$$

Nghiệm hữu hạn của R khi $\xi \rightarrow \infty$ có dạng $R_\infty = e^{-\frac{\xi}{2}}$ (nghiệm $R_\infty = e^{\xi/2}$ không hữu hạn khi $\xi \rightarrow \infty$). Khi $\xi \rightarrow 0$ thì phương trình có dạng :

$$\xi \frac{d^2 R}{d\xi^2} + \frac{3}{2} \frac{dR}{d\xi} - \frac{s\left(s + \frac{1}{2}\right)}{\xi} R = 0$$

Nghiệm của phương trình ở dạng tiệm cận này được tìm dưới dạng $R_0 = \xi^q$ với $q > 0$. Đặt biểu thức của R_0 vào phương trình ở

dạng tiệm cận ta có $q\left(q + \frac{1}{2}\right) - s\left(s + \frac{1}{2}\right) = 0$. Từ đây suy ra $q = s$.

Nghiệm $R(\xi)$ được tìm dưới dạng :

$$R(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi} \xi^s y(\xi)$$

Khi đó hàm $y(\xi)$, thoả mãn phương trình :

$$\xi \frac{d^2 y}{d\xi^2} + \left(2s + \frac{3}{2} - \xi\right) \frac{dy}{d\xi} + ny = 0$$

Hàm $y(\xi)$ được tìm dưới dạng chuỗi

$$y(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k$$

Khi đó ta có :

$$\sum_{k=0}^{\infty} \xi^k \left\{ (k+1)\left(k + 2s + \frac{3}{2}\right)a_{k+1} - (k-n)a_k \right\} = 0$$

Từ đây suy ra :

$$a_{k+1} = \frac{k-n}{(k+1)\left(k + 2s + \frac{3}{2}\right)} a_k$$

Cho hệ số a_0 ta xác định được các hệ số còn lại. Để hàm $R(r)$ hữu hạn thì $y(\xi)$ phải trở thành đa thức bậc $k_{\max}$. Khi đó $a_{k_{\max}} \neq 0$ còn $a_{k_{\max}+1} = 0$. Từ đây suy ra $k_{\max} = n$. Vì $k_{\max}$ là số nguyên không âm nên $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Hàm sóng $R_n(\xi)$ được viết lại như sau :

$$R_n(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi} \xi^s \sum_{k=0}^n a_k \xi^k$$

trong đó ξ biểu diễn qua r^2 , s phụ thuộc vào l và a_k phụ thuộc vào l và n đã xác định ở trên.

Năng lượng của hạt được xác định từ hệ thức :

$$\sqrt{\frac{2m}{B}} \cdot \frac{E_{nl}}{\hbar} = 4(n+1) + 3$$

hay

$$E_{nl} = \hbar \sqrt{\frac{B}{2m}} \left\{ 4n+2 + \sqrt{(2l+1)^2 + \frac{8mA}{\hbar^2}} \right\} ; n = 0, 1, 2.$$

Ghi chú : Hàm $R(\xi)$ được biểu diễn qua hàm siêu bội

$y_{nl}(-n, 2s + \frac{3}{2}, \xi)$ như sau :

$$R_{nl}(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi} \xi^s y_{nl}(-n, 2s + \frac{3}{2}, \xi)$$

74. Thế năng của dao động tử điều hoà ba chiều đồng nhất có dạng :

$$U(x, y, z) = \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2.$$

Phương trình Schrödinger của dao động tử trong tọa độ cầu có dạng :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r, \theta, \varphi) + \frac{m\omega^2}{2} r^2 \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi)$$

trong đó :

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}$$

Nghiệm $\psi(r, \theta, \varphi)$ được tìm dưới dạng :

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

Khi đó hàm bán kính $R(r)$ thoả mãn phương trình :

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{m\omega^2}{2} r^2 \right] R = 0$$

Chú ý rằng trong bài toán (73) nếu đặt $A = 0$ và $B = \frac{m\omega^2}{2}$ thì ta có bài toán về dao động tử điều hòa ba chiều đồng nhất. Dùng kết quả của bài toán (73) với $A = 0$ và $B = \frac{m\omega^2}{2}$ ta được :

$$\xi = \frac{m\omega}{\hbar} r^2, s = \frac{l}{2}$$

$$R_n(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi} \xi^{\frac{l}{2}} \sum_{k=0}^n a_k \xi^k$$

$$a_{k+1} = \frac{k-n}{(k+1)\left(k+1+\frac{3}{2}\right)} a_k, \quad n=0, 1, 2, \dots$$

$$E_n = \hbar\omega \left(1 + 2n + \frac{3}{2} \right); \quad n, l = 0, 1, 2, \dots$$

hay :

$$E_N = \hbar\omega \left(N + \frac{3}{2} \right), \quad N = l + 2n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Hàm $R_n(\xi)$ có thể được biểu diễn qua hàm siêu bội $y_n(a, c, \xi)$

với $a = -n, c = l + \frac{3}{2}$:

$$R_{nl}(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi} \xi^{\frac{l}{2}} y_{nl}(-n, l + \frac{3}{2}, \xi).$$

75. Phương trình Schrödinger đối với hàm bán kính $R(r)$ khi $l = 0$, có dạng :

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] R = 0$$

Đặt $R(r) = \frac{f(r)}{r}$ ta có phương trình :

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] f = 0$$

$$\text{Đặt } \varepsilon = -E > 0, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - \varepsilon)}, \quad \lambda = \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}$$

ta có :

$$\frac{d^2 f(r)}{dr^2} + k^2 f(r) = 0 \text{ khi } r \leq a$$

$$\frac{d^2 f(r)}{dr^2} - \lambda^2 f(r) = 0 \text{ khi } r > a$$

Nghiệm $f_1(r)$ và $f_2(r)$ có dạng :

$$f_1(r) = A \sin kr + B \cos kr$$

$$f_2(r) = C e^{-\lambda r} + D e^{\lambda r}$$

Để hàm $R(r) = \frac{f(r)}{r}$ hữu hạn khi $r \rightarrow 0$ và bằng không khi $r \rightarrow$

∞ ta phải có $B = 0, D = 0$. Khi đó ta có :

$$R_1(r) = \frac{f_1(r)}{r} = \frac{A \sin kr}{r} \quad \text{khi } r \leq a,$$

$$R_2(r) = \frac{f_2(r)}{r} = C \frac{e^{-\lambda r}}{r} \quad \text{khi } r > a.$$

Từ điều kiện liên tục $R_1(a) = R_2(a)$ và

$$\left(\frac{dR_1}{dr} \right)_{r=a} = \left(\frac{dR_2}{dr} \right)_{r=a} \quad \text{ta tìm được :}$$

$$k \cotg ka = -\lambda = -\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2} - k^2} < 0$$

hay
$$\sin(ka) = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{2ma^2 U_0}} \cdot ka = \pm \alpha \cdot ka$$

trong đó $\alpha = \frac{\hbar}{a\sqrt{2mU_0}}$. Đặt $u = ka$ thì giao điểm của đường $y = \pm \sin x$

và đường $y = \alpha x$ trong miền $\cotg x < 0$ xác định những giá trị của k tương ứng với các mức năng lượng (biết k ta xác định được $\varepsilon = -E$) của hạt.

76. Phương trình Schrödinger của hạt có dạng :

$$\nabla^2 \psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0 \quad (\mu \text{ khối lượng của hạt}).$$

Trong hệ tọa độ cực ta có :

$$x = r \cos \varphi, \quad y = r \sin \varphi, \quad \vec{r} = \vec{i}x + \vec{j}y$$

$$\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\vec{e}_\varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\vec{e}_r = \frac{\vec{r}}{r} = \vec{i} \cos \varphi + \vec{j} \sin \varphi, \quad \vec{e}_\varphi = -\vec{i} \sin \varphi + \vec{j} \cos \varphi$$

$$\frac{\partial \vec{e}_r}{\partial \varphi} = \vec{e}_\varphi, \quad \frac{\partial \vec{e}_\varphi}{\partial \varphi} = -\vec{e}_r$$

$$\nabla^2 = \nabla \nabla = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

Phương trình Schrödinger trong tọa độ cực có dạng :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0$$

Đặt $\psi(r, \varphi) = e^{im\varphi} R(r)$ vào phương trình Schrödinger ta nhận được phương trình đối với hàm bán kính $R(r)$:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E - \frac{\hbar^2 m^2}{2\mu r^2} + \frac{Ze^2}{r} \right) R = 0$$

Đặt $R(r) = r^\gamma f(r)$ (ta sẽ chọn γ thích hợp để phương trình vi phân đối với hàm f có dạng thuận lợi hơn) ta có :

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{(2\gamma+1)}{r} \frac{df}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - \frac{\hbar^2 (m^2 - \gamma^2)}{2\mu r^2} + \frac{Ze^2}{r} \right] f = 0$$

Nếu chọn $\gamma = -\frac{1}{2}$ thì phương trình vi phân đối với f có dạng thuận lợi hơn :

$$\frac{d^2 F}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - \frac{\hbar^2 \left(m^2 - \frac{1}{4} \right)}{2\mu r^2} + \frac{Ze^2}{r} \right] f = 0$$

Ta khảo sát trường hợp $E < 0$ (trường hợp $E > 0$ sẽ cho phổ liên tục).

$$\text{Đặt } \beta = \sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}, \quad x = 2\beta r, \quad A = \frac{\mu Z e^2}{\hbar^2 \beta} = \sqrt{-\frac{\mu Z^2 e^4}{2E \hbar^2}}, \quad s = |m| - \frac{1}{2}$$

ta có :

$$\frac{d^2 f}{dr^2} = 4\beta^2 \frac{d^2 f}{dx^2}, \quad s(s+1) = m^2 - \frac{1}{4} \quad \text{và}$$

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{A}{x} - \frac{s(s+1)}{x^2} \right] f = 0$$

Khi $x \rightarrow 0$ ($r \rightarrow 0$) để hàm R hữu hạn thì hàm $f(x) \rightarrow f_0(x) = r^{s+1}$

và khi $x \rightarrow \infty$ ($r \rightarrow \infty$) để hàm $R \rightarrow 0$ thì hàm $f(x) \rightarrow f_\infty(x) = e^{-\frac{x}{2}}$.

Nghiệm $f(x)$ trong trường hợp tổng quát được tìm dưới dạng :

$$f(x) = e^{-\frac{x}{2}} x^{s+1} y(x), \quad (s+1 = |m| + \frac{1}{2})$$

Khi đó hàm $y(x)$, thỏa mãn phương trình :

$$x \frac{d^2 y}{dx^2} + [2(s+1) - x] \frac{dy}{dx} + [A - (s+1)] y = 0$$

Tìm nghiệm $y(x)$ dưới dạng chuỗi : $y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$

Thay biểu thức của y vào phương trình vi phân của nó ta có :

$$\sum_{k=0}^{\infty} x^k \{ (k+1)[k+2(s+1)]a_{k+1} + [A - (k+s+1)]a_k \} = 0$$

Từ đây suy ra :

$$a_{k+1} = \frac{k+s+1-A}{(k+1)(k+2s+2)} a_k$$

Để hàm $R(r)$ hữu hạn thì k phải dừng ở một giá trị $k_{\max} = N$ nào đó. Khi đó $a_{N+1} = 0$ và ta có :

$$A = N + s + 1, N = 0, 1, 2, \dots$$

Chú ý : $A^2 = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2E\hbar^2}$ ta tìm được :

$$E_{Nm} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 (N+s+1)^2} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 (N+|m|+\frac{1}{2})^2}$$

với $N, |m| = 0, 1, 2, 3, \dots$

Hàm sóng $\psi_{Nm}(r, \varphi) = e^{im\varphi} R(r)$ với $R(r)$ có dạng :

$$R_{Nm}(x) = A_{Nm} x^{-\frac{1}{2}} f(x) = A_{Nm} e^{-\frac{x}{2}} x^{|m|} \sum_{k=0}^N a_k x^k$$

$$(x = 2\beta r)$$

trong đó :

$$a_{k+1} = \frac{k-N}{(k+1)(k+2|m|+1)} a_k \quad (k \leq N)$$

77. Toán tử $\hat{F}$ là ecmit nên ta có :

$$F_{nm} = \int \psi_n^*(x) \hat{F} \psi_m(x) dx = \int \psi_m(x) (\hat{F} \psi_n(x))^* dx$$

Chú ý rằng :

$$\int \psi_m(x) (\hat{F} \psi_n(x))^* dx = \int (\psi_m^* \hat{F} \psi_n)^* dx = F_{mn}^* = F_{nm}^+$$

ta có $F_{nm} = F_{nm}^+$. Vậy ma trận $F = F^+$.

b) Ma trận S là ma trận unita nếu $S^+ = S^{-1}$ và là ma trận ecmit

nếu $S^+ = S$. Ma trận S đồng thời là ma trận unita và ma trận ecmit khi $S^+ = S^{-1} = S$ hay $S^2 = I$ trong đó I là ma trận đơn vị.

c) Ma trận A, B là những ma trận hạng hai thì ma trận $C = AB$ cũng là ma trận hạng hai với các phần tử

$$C_{11} = A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21}, \quad C_{12} = A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22}$$

$$C_{21} = A_{21}B_{11} + A_{22}B_{21}, \quad C_{22} = A_{21}B_{12} + A_{22}B_{22}.$$

Trị riêng λ của ma trận C được xác định bằng phương trình cho dưới dạng định thức :

$$|C - \lambda I| = \begin{vmatrix} (C_{11} - \lambda) & C_{12} \\ C_{21} & (C_{22} - \lambda) \end{vmatrix} = 0 \quad (I \text{ là ma trận đơn vị})$$

hay

$$\lambda^2 - \lambda \text{Sp}C + |C| = 0$$

trong đó $\text{Sp}C = C_{11} + C_{22}$ là tổng các phần tử chéo của ma trận C và $|C| = C_{11}C_{22} - C_{21}C_{12}$ là định thức của ma trận C . Chú ý rằng :

$$\begin{aligned} \text{Sp}C &= \text{Sp}(AB) = \sum_k (AB)_{kk} = \sum_k \sum_l A_{kl} B_{lk} = \sum_l \sum_k B_{lk} A_{kl} = \\ &= \sum_l (BA)_l = \text{Sp}(BA) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{và } |C| &= |AB| = (C_{11}C_{22} - C_{12}C_{21}) = (A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21}) \times \\ &\times (A_{21}B_{12} + A_{22}B_{22}) - (A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22})(A_{21}B_{11} + A_{22}B_{21}) = \\ &= (A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21})(B_{11}B_{22} - B_{12}B_{21}) = |A||B| = |B||A| = |BA| \end{aligned}$$

ta có

$$\lambda^2 - \lambda \text{Sp}(AB) + |AB| = \lambda^2 - \lambda \text{Sp}(BA) + |BA| = 0$$

Từ đây suy ra hai ma trận hạng hai AB và BA có cùng trị riêng λ .

$$78. a) x_{nm} = \frac{2}{d} \int_0^d x \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{d}\right) dx$$

Khi $n = m$ ta có :

$$x_{nn} = \bar{x} = \frac{2}{d} \int_0^d x \sin^2\left(\frac{n\pi x}{d}\right) dx \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Chú ý rằng $\sin^2\left(\frac{n\pi x}{d}\right) = \frac{1}{2} \left[1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{d}\right) \right]$ và

$$\begin{aligned} \int_0^d x \cos qx dx &= \frac{1}{q} \int_0^d x d(\sin qx) = \\ &= \frac{1}{q} x \sin qx \Big|_0^d - \frac{1}{q} \int_0^d \sin qx dx = \\ &= \frac{d}{q} \sin qd + \frac{1}{q^2} [\cos qd - 1] \end{aligned}$$

ta tìm được $x_{nn} = \frac{d}{2}$.

Khi $n \neq m$ ta có :

$$\begin{aligned} x_{nm} &= \frac{2}{d} \int_0^d x \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{d}\right) dx \\ &= \frac{1}{d} \int_0^d x \left\{ \cos(n-m)\frac{\pi}{d}x - \cos(n+m)\frac{\pi x}{d} \right\} dx \end{aligned}$$

Dùng công thức tích phân $\int_0^d x \cos qx dx$ ở trên với sự chú ý

$$\cos(n-m)\pi = (-1)^{n-m}, \quad \cos(n+m)\pi = (-1)^{n+m} \quad \text{và} \quad (-1)^{n-m} = (-1)^{n-m} (-1)^{2m} = (-1)^{n+m} \text{ ta nhận được}$$

$$x_{nm} = \frac{4dnm}{\pi^2(n^2 - m^2)^2} \left\{ (-1)^{n-m} - 1 \right\} \quad \text{với } n \neq m.$$

$$\begin{aligned} \text{b) } p_{nm} &= \int_0^d \psi_n^*(x) (-i\hbar) \frac{d}{dx} \psi_m(x) dx \\ &= -\frac{2i\hbar}{d} \int_0^d \sin \frac{n\pi x}{d} \frac{d}{dx} \left(\sin \frac{m\pi x}{d} \right) dx \\ &= -\frac{2i\hbar\pi m}{d^2} \int_0^d \sin \left(\frac{n\pi x}{d} \right) \cos \left(\frac{m\pi x}{d} \right) dx = \\ &= -\frac{i\hbar\pi m}{d} \int_0^d \left\{ \sin(n+m) \frac{\pi x}{d} + \sin(n-m) \frac{\pi x}{d} \right\} dx \end{aligned}$$

Từ đây suy ra :

Khi $n = m$ thì $p_{nn} = 0$ và khi $n \neq m$ ta có :

$$p_{nm} = -\frac{2i\hbar nm}{d} \frac{1}{(n^2 - m^2)} [(-1)^{n-m} - 1]$$

$$\begin{aligned} \text{c) } (L_j)_{mm'} &= \int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi) \left(-i\hbar \frac{d}{d\varphi} \psi_{m'}(\varphi) \right) d\varphi \\ &= \frac{-i\hbar}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} \frac{d}{d\varphi} e^{im'\varphi} d\varphi = -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_0^{2\pi} im' e^{i(m'-m)\varphi} d\varphi \end{aligned}$$

Chú ý rằng $\int_0^{2\pi} e^{ik\varphi} d\varphi = \begin{cases} 0 & \text{khí } k \neq 0 \\ 2\pi & \text{khí } k = 0 \end{cases}$ ta tìm được :

$$(L_z)_{mm'} = \hbar m \delta_{m,m'}$$

trong đó $\delta_{m,m'} = 0$ khi $m' \neq m$ và $\delta_{m,m'} = 1$ khi $m' = m$.

79. Toán tử Haminton của dao động tử điều hòa một chiều có dạng :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}. \quad \text{Giá trị trung bình của năng}$$

lượng của dao động tử điều hòa trong trạng thái $\psi(x)$ sẽ là :

$$\bar{E} = \int \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) dx = \frac{1}{2m} \int \psi^* \hat{p}^2 \psi dx + \frac{m\omega^2}{2} \int \psi^* x^2 \psi dx$$

Vì các toán tử $\hat{p}$ và $\hat{x}$ là ecmit nên ta có :

$$\begin{aligned} \int \psi^*(x) \hat{p}^2 \psi(x) dx &= \int (\hat{p}\psi(x))^* \hat{p}\psi(x) dx = \\ &= \int |\hat{p}\psi(x)|^2 dx \geq 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx &= \int (x\psi(x))^* x\psi(x) dx = \\ &= \int |x\psi(x)|^2 dx \geq 0 \end{aligned}$$

Vậy $\bar{E} \geq 0$. Nếu $\psi_n(x)$ là hàm riêng của $\hat{H}$ thì ta có

$$\bar{E} = \int \psi_n^* \hat{H} \psi_n dx = \int \psi_n^* E_n \psi_n dx = E_n \geq 0$$

Kí hiệu $F_{nm} = \int \psi_n^*(x) \hat{F} \psi_m(x) dx \equiv \langle n | \hat{F} | m \rangle$. Khi $\hat{F} = I$ là toán

tử đơn vị thì $\langle n | I | m \rangle = \langle n | m \rangle = \delta_{n,m}$. Đặt

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m \omega}} \left\{ \frac{\hat{p}}{\sqrt{m}} - i\omega \sqrt{m} \hat{x} \right\}$$

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m \omega}} \left\{ \frac{\hat{p}}{\sqrt{m}} + i\omega \sqrt{m} \hat{x} \right\}$$

Để dàng thấy rằng :

$$\hat{x} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} - \hat{a}^+)$$

$$\hat{p} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a} + \hat{a}^+)$$

Xác định phần tử ma trận của $\hat{a}$ và $\hat{a}^+$ ta xác định được phần tử của các ma trận $\hat{x}$ và $\hat{p}$. Từ hệ thức giao hoán $\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$ ta suy ra : $\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = 1$. Toán tử $\hat{H}$ được biểu diễn qua $\hat{a}$ và $\hat{a}^+$ như sau :

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}) = \\ &= \hbar\omega \left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

Năng lượng E_n của dao động tử điều hòa sẽ là :

$$E_n = \langle n | \hat{H} | n \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega \langle n | \hat{a}^+\hat{a} | n \rangle = \left(\langle n | \hat{a} | n \rangle \right)^2 \geq 0$$

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega \sum_m \langle n | \hat{a}^+ | m \rangle \langle m | \hat{a} | n \rangle$$

$$\left| \langle m | \hat{a} | n \rangle \right|^2 \geq 0$$

Đặt $\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}$ ta được :

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega \langle n | \hat{N} | n \rangle \geq 0 \text{ hay } \langle n | \hat{N} | n \rangle \geq 0$$

Dùng hệ thức giao hoán $\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = 1$ ta có :

$$\hat{N}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a} = \hat{a}^+(1 + \hat{a}^+\hat{a}) - \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a} = \hat{a}^+$$

$$\hat{N}\hat{a} - \hat{a}\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^+\hat{a} = \hat{a}^+\hat{a}\hat{a} - (1 + \hat{a}^+\hat{a})\hat{a} = -\hat{a}.$$

Toán tử $\hat{H}$ và $\hat{N}$ giao hoán với nhau nên có chung hàm riêng ψ_n . Gọi ψ_n là hàm riêng của $\hat{N}$ tương ứng với trị riêng n , ta có :

$$\hat{N}\psi_n = n\psi_n \text{ hay } \langle n | \hat{N} | n \rangle = n \geq 0$$

Dễ dàng thấy rằng :

$$(\hat{N}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{N})\psi_n = \hat{a}^+\psi_n$$

$$\hat{N}\hat{a}^+\psi_n - \hat{a}^+\hat{N}\psi_n = \hat{N}\hat{a}^+\psi_n - n\hat{a}^+\psi_n = \hat{a}^+\psi_n$$

hay

$$\hat{N}(\hat{a}^+\psi_n) = (n+1)(\hat{a}^+\psi_n).$$

Tương tự :

$$(\hat{N}\hat{a} - \hat{a}\hat{N})\psi_n = -\hat{a}\psi_n$$

$$\hat{N}\hat{a}\psi_n - \hat{a}\hat{N}\psi_n = \hat{N}\hat{a}\psi_n - n\hat{a}\psi_n = -\hat{a}\psi_n$$

hay

$$\hat{N}(\hat{a}\psi_n) = (n-1)(\hat{a}\psi_n)$$

Vậy nếu ψ_n là hàm riêng của $\hat{N}$ ứng với trị riêng n thì $(\hat{a}^+\psi_n)$ và $(\hat{a}\psi_n)$ cũng là hàm riêng của $\hat{N}$ tương ứng với trị riêng $(n+1)$ và $(n-1)$. Các trị riêng liên tiếp của $\hat{N}$ khác nhau một đơn vị.

Gọi ψ_0 là hàm riêng của $\hat{N}$ tương ứng với trị riêng bé nhất n_0 . Ta có :

$$\hat{N}(\hat{a}\psi_0) = (n_0 - 1)(\hat{a}\psi_0)$$

Vì n_0 là trị riêng bé nhất của $\hat{N}$ thì $n_0 - 1$ không thể là trị riêng có thể có của $\hat{N}$ được. Đồng thức trên chỉ xảy ra khi $\hat{a}\psi_0 = 0$. Vì $\hat{a}\psi_0 = 0$ nên

$$\hat{a}^+(\hat{a}\psi_0) = \hat{N}\psi_0 = n_0\psi_0 = 0.$$

Từ đây suy ra $n_0 = 0$. Các trị riêng của $\hat{N}$ có thể có sẽ là $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Năng lượng E_n của dao động tử điều hòa một chiều bằng :

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2} + n\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Hàm $\psi_0(x)$ được xác định từ phương trình $\hat{a}\psi_0 = 0$.

Biết được $\psi_0(x)$ ta xác định được $\psi_n = (\hat{a}^+)^n \psi_0$

Ta xác định phân tử ma trận của $\hat{a}$ và $\hat{a}^+$. Ta biết $n = \langle n | \hat{N} | n \rangle = \langle n | \hat{a}^+ \hat{a} | n \rangle = \sum_m \langle n | \hat{a}^+ | m \rangle \langle m | \hat{a} | n \rangle$

Chú ý rằng $\hat{a}^+\psi_m$ và ψ_{m+1} đều là hàm riêng của $\hat{N}$ tương ứng với một trị riêng $m+1$ nên hai hàm riêng này chỉ khác nhau một

thừa số nhân α nào đó : $\hat{a}^+ \psi_m = \alpha \psi_{m+1}$

Khi đó ta có $\langle n | \hat{a}^+ | m \rangle = \alpha \langle n | m+1 \rangle = \alpha \delta_{n, m+1}$. Phần tử ma trận này chỉ khác không khi $m = n-1$. Tương tự $\hat{a} \psi_n = \beta \psi_{n-1}$ và $\langle m | \hat{a} | n \rangle = \beta \times \delta_{m, n-1}$ chỉ khác không khi $m = n-1$. Vậy ta có :

$$n = \langle n | \hat{a}^+ | n-1 \rangle \langle n-1 | \hat{a} | n \rangle = |\langle n | \hat{a}^+ | n-1 \rangle|^2$$

hay

$$\langle n | \hat{a}^+ | n-1 \rangle = \sqrt{n} e^{i\gamma}, \quad \langle n-1 | \hat{a} | n \rangle = \sqrt{n} e^{-i\gamma}$$

trong đó γ là số thực bất kì. Chú ý $\langle n | \hat{a} | n-1 \rangle = 0$ ta tìm được :

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{x} | n-1 \rangle &= i \sqrt{\frac{\hbar}{2m}} \left\{ \langle n | \hat{a} | n-1 \rangle - \langle n | \hat{a}^+ | n-1 \rangle \right\} \\ &= -i \sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega}} e^{i\gamma} \\ \langle n | \hat{p} | n-1 \rangle &= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left\{ n \langle \hat{a} | n-1 \rangle + \langle n | \hat{a}^+ | n-1 \rangle \right\} \\ &= \sqrt{\frac{m\hbar\omega n}{2}} e^{i\gamma} \end{aligned}$$

Nếu chọn $\gamma = \frac{\pi}{2}$ thì

$$\langle n | \hat{x} | n-1 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar n}{2m\omega}},$$

$$\langle n | \hat{p} | n-1 \rangle = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega n}{2}}.$$

80. 1. a) Nhân vế phải phải và phía trái $\hat{J}_x$ lên $\hat{J}_x \hat{J}_y - \hat{J}_y \hat{J}_x = i\hbar \hat{J}_z$ rồi cộng hai phương trình vừa nhân được, ta có :

$$\hat{J}_x^2 \hat{J}_y - \hat{J}_y \hat{J}_x^2 = i\hbar(\hat{J}_x \hat{J}_z + \hat{J}_z \hat{J}_x)$$

Nhân vế phải phải và phía trái $\hat{J}_z$ lên $\hat{J}_z \hat{J}_y - \hat{J}_y \hat{J}_z = -i\hbar \hat{J}_x$ rồi cộng hai phương trình vừa nhân lại, ta có :

$$\hat{J}_z^2 \hat{J}_y - \hat{J}_y \hat{J}_z^2 = i\hbar(\hat{J}_z \hat{J}_x + \hat{J}_x \hat{J}_z)$$

Chú ý rằng $\hat{J}_y^2 \hat{J}_y - \hat{J}_y \hat{J}_y^2 = 0$ ta tìm được :

$$(\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2) \hat{J}_y - \hat{J}_y (\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2) = \hat{J}_y^2 \hat{J}_y - \hat{J}_y \hat{J}_y^2 = 0$$

Bằng cách chứng minh tương tự ta có $\hat{J}_z^2 \hat{J}_x - \hat{J}_x \hat{J}_z^2 = 0$, $\hat{J}_x^2 \hat{J}_z - \hat{J}_z \hat{J}_x^2 = 0$.

$$b) \hat{J}_z \hat{J}_+ - \hat{J}_+ \hat{J}_z = \hat{J}_z (\hat{J}_x + i\hat{J}_y) - (\hat{J}_x + i\hat{J}_y) \hat{J}_z =$$

$$= \hat{J}_z \hat{J}_x - \hat{J}_x \hat{J}_z + i(\hat{J}_z \hat{J}_y - \hat{J}_y \hat{J}_z) = i\hbar \hat{J}_y + i(-i\hbar \hat{J}_x) =$$

$$= i\hbar \hat{J}_y + \hbar \hat{J}_x = \hbar \hat{J}_+$$

$$\hat{J}_z \hat{J}_- - \hat{J}_- \hat{J}_z = \hat{J}_z (\hat{J}_x - i\hat{J}_y) - (\hat{J}_x - i\hat{J}_y) \hat{J}_z =$$

$$= \hat{J}_z \hat{J}_x - \hat{J}_x \hat{J}_z - i(\hat{J}_z \hat{J}_y - \hat{J}_y \hat{J}_z) = i\hbar \hat{J}_y - i(-i\hbar \hat{J}_x) =$$

$$= i\hbar \hat{J}_y - \hbar \hat{J}_x = -\hbar(\hat{J}_x - i\hat{J}_y) = -\hbar \hat{J}_-$$

$$\begin{aligned}
\widehat{j}_+ \widehat{j}_- - \widehat{j}_- \widehat{j}_+ &= (\widehat{j}_x + i\widehat{j}_y)(\widehat{j}_x - i\widehat{j}_y) - (\widehat{j}_x - i\widehat{j}_y)(\widehat{j}_x + i\widehat{j}_y) = \\
&= \widehat{j}_x^2 + \widehat{j}_y^2 - i(\widehat{j}_x \widehat{j}_y - \widehat{j}_y \widehat{j}_x) - \widehat{j}_x^2 - \widehat{j}_y^2 - i(\widehat{j}_x \widehat{j}_y - \widehat{j}_y \widehat{j}_x) \\
&= -2i(\widehat{j}_x \widehat{j}_y - \widehat{j}_y \widehat{j}_x) = 2\hbar \widehat{j}_z.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
c) \quad \widehat{j}_- \widehat{j}_+ &= (\widehat{j}_x - i\widehat{j}_y)(\widehat{j}_x + i\widehat{j}_y) = \widehat{j}_x^2 + \widehat{j}_y^2 + i(\widehat{j}_x \widehat{j}_y - \widehat{j}_y \widehat{j}_x) \\
&= \widehat{j}_x^2 + \widehat{j}_y^2 + \widehat{j}_z^2 - \widehat{j}_z^2 + i\hbar \widehat{j}_z = \widehat{j}^2 - \widehat{j}_z^2 - \hbar \widehat{j}_z
\end{aligned}$$

hay

$$\widehat{j}^2 = \widehat{j}_- \widehat{j}_+ + \widehat{j}_z^2 + \hbar \widehat{j}_z$$

Chứng minh tương tự ta có :

$$\widehat{j}^2 = \widehat{j}_+ \widehat{j}_- + \widehat{j}_z^2 - \hbar \widehat{j}_z.$$

2) Toán tử $\widehat{j}^2$ và $\widehat{j}_z$ giao hoán với nhau nên chúng có hàm riêng chung. Gọi ψ_m là hàm riêng của $\widehat{j}_z$ tương ứng với trị riêng $m\hbar$ (m là một số nào đó cần xác định sau) :

$$\widehat{j}_z \psi_m = m\hbar \psi_m$$

Dùng phương trình này và phương trình

$$(\widehat{j}_z \widehat{j}_+ - \widehat{j}_+ \widehat{j}_z) \psi_m = \hbar \widehat{j}_+ \psi_m$$

ta tìm được :

$$\widehat{j}_z (\widehat{j}_+ \psi_m) = (m+1)\hbar (\widehat{j}_+ \psi_m)$$

tương tự, từ các phương trình $\widehat{j}_z \psi_m = m\hbar \psi_m$ và

$$(\widehat{j}_z \widehat{j}_- - \widehat{j}_- \widehat{j}_z) \psi_m = -\hbar \widehat{j}_- \psi_m$$

ta có :

$$\hat{j}_z(\hat{j}_-\psi_m) = (m-1)\hbar(\hat{j}_-\psi_m)$$

Vậy nếu ψ_m là hàm riêng của $\hat{j}_z$ tương ứng với trị riêng $m\hbar$ thì $(\hat{j}_+\psi_m)$ và $(\hat{j}_-\psi_m)$ cũng là hàm riêng của $\hat{j}_z$ tương ứng với các trị riêng $(m+1)\hbar$ và $(m-1)\hbar$. Các giá trị của m kế tiếp nhau khác nhau một đơn vị ($m-1, m, m+1$). Ký hiệu j là số lượng tử đặc trưng cho độ lớn của j_j^2 , ψ_{mj} là hàm riêng chung cho j^2 và $\hat{j}_z$, ta có :

$$\langle mj | \hat{j}^2 | m'j' \rangle = j_j^2 \delta_{mm'} \delta_{ij}$$

$$\langle mj | \hat{j}_z | m'j' \rangle = m\hbar \delta_{mm'} \delta_{ij}$$

$$\hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2$$

$$\langle mj | \hat{j}^2 | mj \rangle - \langle mj | \hat{j}_z^2 | mj \rangle = j_j^2 - m^2 \hbar^2 =$$

$$= \langle mj | \hat{j}_x^2 | mj \rangle + \langle mj | \hat{j}_y^2 | mj \rangle =$$

$$= \sum_{m'j'} \langle mj | \hat{j}_x | m'j' \rangle \langle m'j' | \hat{j}_x | mj \rangle +$$

$$+ \sum_{m'j'} \langle mj | \hat{j}_y | m'j' \rangle \langle m'j' | \hat{j}_y | mj \rangle$$

Các toán tử $\hat{j}_x, \hat{j}_y$ là ecmit ($\hat{j}_x = \hat{j}_x^\dagger, \hat{j}_y = \hat{j}_y^\dagger$) nên ta có :

$$\langle m'j' | \hat{j}_x | mj \rangle = \langle m'j' | \hat{j}_x^\dagger | mj \rangle = \langle mj | \hat{j}_x | m'j' \rangle^*$$

$$\langle m'j | \hat{j}_y | mj \rangle = \langle m'j' | \hat{j}_y^+ | mj \rangle = \langle mj | \hat{j}_y | m'j' \rangle^*$$

Vậy

$$j_j^2 - m^2 \hbar^2 = \sum_{m'j'} \left\{ \left| \langle mj | \hat{j}_x | m'j' \rangle \right|^2 + \left| \langle mj | \hat{j}_y | m'j' \rangle \right|^2 \right\} \geq 0$$

Từ đây suy ra

$$-\sqrt{j_j^2} \leq m\hbar \leq \sqrt{j_j^2}$$

Kí hiệu $m_{\max} = m_1$ và $m_{\min} = m_2$, khi đó không tồn tại trạng thái mà m có giá trị bằng $m_1 + 1$ hay bằng $m_2 - 1$. Điều đó có nghĩa rằng

$$\hat{j}_+ \psi_{m_1} = 0, \quad \hat{j}_- \psi_{m_2} = 0$$

Dễ dàng thấy rằng :

$$\begin{aligned} \langle m_1j | j^2 | m_1j \rangle &= j_j^2 = \langle m_1j | \left(\hat{j}_- \hat{j}_+ + \hat{j}_z^2 + \hbar \hat{j}_z \right) | m_1j \rangle \\ &= \langle m_1j | \hat{j}_- \hat{j}_+ | m_1j \rangle + \hbar^2 m_1^2 + \hbar^2 m_1 \end{aligned}$$

Vì $\hat{j}_+ \psi_{m_1} = 0$ nên $\langle m_1j | \hat{j}_- \hat{j}_+ | m_1j \rangle = 0$.

Vậy $j_j^2 = \hbar^2 m_1(m_1 + 1)$

Tương tự :

$$\begin{aligned} \langle m_2j | j^2 | m_2j \rangle &= j_j^2 = \langle m_2j | \left(\hat{j}_+ \hat{j}_- + \hat{j}_z^2 - \hbar \hat{j}_z \right) | m_2j \rangle = \\ &= \langle m_2j | \hat{j}_+ \hat{j}_- | m_2j \rangle + \hbar^2 m_2^2 - \hbar^2 m_2 \end{aligned}$$

Vì $\hat{j}_- \psi_{m_2j} = 0$ nên $\langle m_2j | \hat{j}_+ \hat{j}_- | m_2j \rangle = 0$ và ta có :

$$j_j^2 = \hbar^2 m_2(m_2 - 1).$$

So sánh hai biểu thức của j_j^2 ta được :

$$m_1(m_1 + 1) = m_2(m_2 - 1)$$

Đẳng thức này thoả mãn khi $m_2 = m_1 + 1$ và $m_2 = -m_1$. Vì m_1 là giá trị lớn nhất của m nên ta luôn luôn phải có $m_2 \leq m_1$, nghiệm $m_2 = m_1 + 1$ không thoả mãn điều kiện này ta loại bỏ và chỉ lấy nghiệm $m_2 = -m_1$. Ta quy ước j là số lượng tử đặc trưng cho độ lớn của j_j^2 mà j_j^2 chỉ phụ thuộc vào m_1 nên ta đặt $m_1 = j$. Khi đó m có tất cả các giá trị từ $-j$ đến $+j$. Các giá trị liên tiếp của m khác nhau một đơn vị :

$$-j, -j + 1, -j + 2, \dots, -j + q = j \quad (q = 2j)$$

Có $q + 1 = 2j + 1$ giá trị có thể có của m . Bởi vì q là số nguyên nên j là số nguyên ($j = 0, 1, 2, 3, \dots$) hay số bán nguyên $\left(j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots\right)$. Tóm lại ta có :

$$\hat{j}_z \psi_{mj} = j_z \psi_{mj}, \quad j_j = m\hbar \text{ với } m = -j, -j + 1, \dots, j$$

$$\hat{j}^2 \psi_{mj} = j_j^2 \psi_{mj} \quad j_j^2 = \hbar^2 j(j+1)$$

3) Ta có :

$$\begin{aligned} j_j^2 &= \langle mj | \hat{j}^2 | mj \rangle = \langle mj | (\hat{j}_- \hat{j}_+ + \hat{j}_z^2 + \hbar \hat{j}_z) | mj \rangle \\ &= \langle mj | \hat{j}_- \hat{j}_+ | mj \rangle + m^2 \hbar^2 + \hbar^2 m = \hbar^2 j(j+1) \end{aligned}$$

hay

$$\begin{aligned}\langle m_j | \hat{j}_- \hat{j}_+ | m_j \rangle &= \sum_{m', j'} \langle m_j | \hat{j}_- | m' j' \rangle \langle m' j' | \hat{j}_+ | m_j \rangle = \\ &= \hbar^2 (j-m)(j+m+1)\end{aligned}$$

Các hàm $\hat{j}_+ \psi_{mj}$ và $\psi_{m+1, j}$ đều là hàm riêng của $\hat{j}_z$ tương ứng với trị riêng $(m+1)\hbar$ nên chúng tỉ lệ với nhau :

$$\hat{j}_+ \psi_{mj} = \alpha_m \psi_{m+1, j}$$

Tương tự, hàm $\hat{j}_- \psi_{mj}$ và hàm $\psi_{m-1, j}$ là những hàm riêng của $\hat{j}_z$ tương ứng với trị riêng $(m-1)\hbar$ nên ta có :

$$\hat{j}_- \psi_{m' j'} = \beta_{m'} \psi_{m'-1, j'}$$

trong đó $\alpha_m, \beta_{m'}$ là những hệ số tỉ lệ. Dễ dàng thấy rằng

$$\langle m' j' | \hat{j}_+ | m_j \rangle = \alpha_m \langle m' j' | m+1, j \rangle = \alpha_m \delta_{m', m+1} \delta_{j' j}$$

$$\langle m_j | \hat{j}_- | m' j' \rangle = \beta_{m'} \langle m_j | m'-1, j' \rangle = \beta_{m'} \delta_{m, m'-1} \delta_{j j'}$$

Các phần tử ma trên này chỉ khác không khi $m' = m+1$ và $j' = j$.

Vậy :

$$\begin{aligned}\langle m_j | \hat{j}_- \hat{j}_+ | m_j \rangle &= \langle m_j | \hat{j}_- | m+1, j \rangle \langle m+1, j | \hat{j}_+ | m, j \rangle = \\ &= \hbar^2 (j-m)(j+m+1)\end{aligned}$$

Chú ý rằng các toán tử $\hat{j}_x, \hat{j}_y$ là ecmit ($\hat{j}_x = \hat{j}_x^\dagger, \hat{j}_y = \hat{j}_y^\dagger$) nên ta có :

$$\widehat{j}_+^+ = (\widehat{j}_x + i\widehat{j}_y)^+ = \widehat{j}_x^+ - i\widehat{j}_y^+ = \widehat{j}_x - i\widehat{j}_y = \widehat{j}_-$$

$$\widehat{j}_-^+ = (\widehat{j}_x - i\widehat{j}_y)^+ = \widehat{j}_x^+ + i\widehat{j}_y^+ = \widehat{j}_x + i\widehat{j}_y = \widehat{j}_+$$

và

$$\begin{aligned}\langle m, j | \widehat{j}_- | m+1, j \rangle &= \langle m, j | \widehat{j}_+^+ | m+1, j \rangle = \\ &= \langle m+1, j | \widehat{j}_+ | m, j \rangle^* \\ \langle m+1, j | \widehat{j}_+ | m, j \rangle &= \langle m+1, j | \widehat{j}_-^+ | m, j \rangle = \\ &= \langle m, j | \widehat{j}_- | m+1, j \rangle^*\end{aligned}$$

Dùng đẳng thức các phần tử ma trận này ta tìm được

$$\begin{aligned}\langle m+1, j | \widehat{j}_+ | m, j \rangle^2 &= \langle m, j | \widehat{j}_- | m+1, j \rangle^2 = \\ &= \hbar^2(j-m)(j+m+1)\end{aligned}$$

Từ đây suy ra :

$$\begin{aligned}\langle m+1, j | \widehat{j}_+ | m, j \rangle &= \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \\ \langle m, j | \widehat{j}_- | m+1, j \rangle &= \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\end{aligned}$$

Ta biết

$$\widehat{j}_x = \frac{1}{2}(\widehat{j}_+ + \widehat{j}_-), \quad \widehat{j}_y = \frac{1}{2i}(\widehat{j}_+ - \widehat{j}_-)$$

Chú ý rằng $\langle m+1, j | \widehat{j}_- | m, j \rangle = 0$, $\langle m, j | \widehat{j}_+ | m+1, j \rangle = 0$ ta tìm được

$$\langle m+1 | \hat{j}_x | m \rangle = \frac{1}{2} \langle m+1 | \hat{j}_+ | m \rangle =$$

$$= \frac{\hbar}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)}$$

$$\langle m | \hat{j}_y | m+1 \rangle = \frac{i}{2} \langle m | \hat{j}_- | m+1 \rangle =$$

$$= \frac{i\hbar}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \text{ hay}$$

$$\langle m | \hat{j}_x | m+1 \rangle = \langle m+1 | \hat{j}_x | m \rangle^* =$$

$$= \frac{\hbar}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)}$$

$$\langle m+1 | \hat{j}_y | m \rangle = \langle m | \hat{j}_y | m+1 \rangle^* =$$

$$= -\frac{i\hbar}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)}$$

81. Toán tử $\hat{F}_{\vec{p}}$ trong $\vec{p}$ - biểu diễn (trong biểu diễn xung lượng) được xác định từ đẳng thức :

$$\hat{F}_{\vec{p}} \varphi(\vec{p}) = \int \hat{F}_{\vec{p}\vec{p}'} \varphi(\vec{p}') d\vec{p}'$$

trong đó $\varphi(\vec{p})$ là hàm sóng trong $\vec{p}$ - biểu diễn và

$$F_{\vec{p}\vec{p}'} = \int \psi_{\vec{p}}^*(\vec{r}) \hat{F} \psi_{\vec{p}'}(\vec{r}) d\vec{r}$$

với $\hat{F}$ là toán tử trong $\vec{r}$ - biểu diễn và $\psi_{\vec{p}}(\vec{r})$, là hàm riêng của toán tử xung lượng $\hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla$ trong $\vec{r}$ - biểu diễn.

$$\text{Hàm } \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r}}$$

Khi $\hat{F} = \hat{\vec{r}} = \vec{r}$ ta có :

$$\begin{aligned}\vec{r}_{\vec{p}\vec{p}'} &= \int \psi_{\vec{p}'}^*(\vec{r}) \cdot \vec{r} \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) d\vec{r} = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\vec{r}} \cdot \vec{r} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} d\vec{r} = \\ &= \frac{-i\hbar}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\vec{r}} \frac{\partial}{\partial \vec{p}'} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} d\vec{r} = \\ &= -\frac{i\hbar}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\partial}{\partial \vec{p}'} \int e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\vec{r}} d\vec{r}.\end{aligned}$$

Chú ý rằng

$$\begin{aligned}\int e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\vec{r}} d\vec{r} &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x-p'_x)x} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(p_y-p'_y)y} dy \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(p_z-p'_z)z} dz = \\ &= 2\pi\delta\left(\frac{p_x-p'_x}{\hbar}\right) \cdot 2\pi\delta\left(\frac{p_y-p'_y}{\hbar}\right) \cdot 2\pi\delta\left(\frac{p_z-p'_z}{\hbar}\right) = \\ &= (2\pi\hbar)^3 \delta(p_x-p'_x) \delta(p_y-p'_y) \delta(p_z-p'_z) = (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p}-\vec{p}')\end{aligned}$$

ta có :

$$\vec{r}_{\vec{p}\vec{p}'} = -i\hbar \frac{\delta}{\delta \vec{p}} (\delta(\vec{p}-\vec{p}'))$$

Toán tử $\vec{r}_{\vec{p}}$ trong $\vec{p}$ - biểu diễn được xác định bằng phương trình :

$$\begin{aligned}
\hat{r}\varphi(\vec{p}) &= \int \vec{r}_{\vec{p}\vec{p}'} \varphi(\vec{p}') d\vec{p}' = \\
&= -i\hbar \int \frac{\partial}{\partial \vec{p}'} [\delta(\vec{p} - \vec{p}')] \varphi(\vec{p}') d\vec{p}' \\
&= -i\hbar \int d[\delta(\vec{p} - \vec{p}')] \varphi(\vec{p}') \\
&= 0 + i\hbar \int \delta(\vec{p} - \vec{p}') \frac{\partial \varphi(\vec{p}')}{\partial \vec{p}} d\vec{p}' = i\hbar \frac{\partial \varphi(\vec{p})}{\partial \vec{p}}
\end{aligned}$$

Vậy $\hat{r}_{\vec{p}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}}$

Khi $\hat{F} = \hat{p} = -i\hbar \nabla$ ta có :

$$\begin{aligned}
\vec{p}_{\vec{p}\vec{p}'} &= \int \psi_{\vec{p}}^*(\vec{r}) \hat{\vec{p}} \psi_{\vec{p}'}(\vec{r}) d\vec{r} = \int \psi_{\vec{p}}^*(\vec{r}) (-i\hbar \nabla) \psi_{\vec{p}'}(\vec{r}) d\vec{r} \\
&= \int \psi_{\vec{p}}^*(\vec{r}) \vec{p}' \psi_{\vec{p}'}(\vec{r}) d\vec{r} = \vec{p}' \delta(\vec{p} - \vec{p}') \\
\hat{p}_{\vec{p}} \varphi_{\vec{p}} &= \int \vec{p}_{\vec{p}\vec{p}'} \varphi_{\vec{p}'} d\vec{p}' = \int \vec{p}' \delta(\vec{p} - \vec{p}') \varphi_{\vec{p}'} d\vec{p}' = \vec{p} \varphi(\vec{p})
\end{aligned}$$

Vậy $\hat{p}_{\vec{p}} = \vec{p}$

Trong $\vec{p}$ biểu diễn ta có $\hat{r} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \vec{p} = \vec{p}$.

82. Toán tử Haminton của dao động tử điều hòa một chiều trong $\vec{p}$ - biểu diễn có dạng :

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right)^2 = \frac{p^2}{2m} - \hbar^2 \frac{m\omega^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial p^2}$$

Phương trình hàm riêng và trị riêng của $\hat{H}$:

$$\hat{H} \varphi(p) = E \varphi(p)$$

Đưa vào thông số không thứ nguyên $\xi = \frac{p}{\sqrt{m\hbar\omega}}$ và đặt

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}, \text{ ta có :}$$

$$\frac{d^2\varphi(\xi)}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\varphi(\xi) = 0$$

Nghiệm $\varphi(\xi)$ được tìm dưới dạng :

$$\varphi(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} y(\xi).$$

Khi đó hàm $y(\xi)$ thoả mãn phương trình :

$$\frac{d^2y}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dy}{d\xi} + 2ny = 0, \quad 2n = \lambda - 1$$

Nghiệm $y(\xi)$ được tìm dưới dạng : $y(\xi) = \sum_{k=0}^n a_k \xi^k$

$$a_{k+2} = \frac{2(n-k)}{(k+1)(k+2)} a_k ; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Hàm $\varphi(\xi)$ có thể viết dạng :

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

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}), \quad A_n = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}.$$

83. 1. a) Ta biết hàm sóng trong biểu diễn xung lượng $\varphi(p)$ được xác định bằng công thức :

$$\varphi(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \psi_p^*(x) dx.$$

trong đó

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p x}$$

Khi $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x}$ ta có :

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p_0)x} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} 2\pi\delta\left(\frac{p-p_0}{\hbar}\right)$$

$$\varphi(p) = \delta(p-p_0)$$

$$\text{b) } \varphi(p) = \int_{-d/2}^{d/2} \psi(x) \psi_p^*(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar d}} \int_{-d/2}^{d/2} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0-p)x} dx$$

$$\varphi(p) = \left(\frac{2\hbar}{\pi d}\right)^{1/2} \frac{\sin\left[\frac{(p-p_0)d}{2\hbar}\right]}{(p-p_0)}$$

$$\text{c) } \varphi(p) = \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2a^2} + \frac{i}{\hbar}(p_0-p)x} dx, \quad A = \left(\frac{1}{\pi a^2}\right)^{1/4}$$

Chú ý rằng

$$\frac{x^2}{2a^2} - \frac{i}{\hbar}(p_0-p)x = \left(\frac{x}{a\sqrt{2}} - \alpha\right)^2 - \alpha^2 :$$

$$\alpha = \frac{ia\sqrt{2}}{2\hbar}(p_0-p)$$

và $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$ ta tìm được :

$$\varphi(p) = \left(\frac{a^2}{\pi \hbar^2} \right)^{1/4} e^{-\frac{a^2(p_0 - p)^2}{2\hbar^2}}$$

$$2. \varphi(p) = \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2 + \frac{i}{\hbar} p x} dx$$

$$\varphi(p) = \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\alpha x + \beta)^2 + \beta^2} dx$$

trong đó $A = \left(\alpha \sqrt{\frac{2}{\pi}} \right)^{1/2}$, $\alpha = \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{1/2}$, $\beta = \frac{ip}{2\hbar\alpha}$

Thực hiện phép tính tích phân ta có :

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{\alpha\hbar\sqrt{2\pi}}} e^{-\frac{p^2}{4\hbar^2\alpha^2}}$$

84. Hàm sóng $\psi(\varphi)$ có dạng :

$$\begin{aligned} \psi(\varphi) &= A[1 + \cos\varphi]^2 = A\{1 + \cos^2\varphi + 2\cos\varphi\} \\ &= A \left\{ 1 + \left(\frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} \right)^2 + 2 \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} \right\} \\ &= A \left\{ \frac{3}{2} + \frac{1}{4}(e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}) + e^{i\varphi} + e^{-i\varphi} \right\} \end{aligned}$$

Từ điều kiện chuẩn hóa hàm sóng :

$$\int_0^{2\pi} |\psi(p)|^2 d\varphi = 1,$$

với sự chú ý rằng

$$\int_0^{2\pi} e^{ik\varphi} d\varphi = \begin{cases} 2\pi & \text{khi } k = 0 \\ 0 & \text{khi } k \neq 0 \end{cases}$$

ta tìm được : $A = \frac{2}{\sqrt{35\pi}}$

Hàm sóng trong L_z - biểu diễn có dạng :

$$\varphi(L_z) = \int_0^{2\pi} \psi(\varphi) \psi_m^*(\varphi) d\varphi,$$

trong đó $\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$ là hàm riêng của $\hat{L}_z$ tương ứng với giá

trị riêng $L_z = m\hbar$

$$\varphi(L_z) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} \left\{ \frac{3}{2} e^{-im\varphi} + \frac{e^{-i(m+2)\varphi} + e^{-i(m+2)\varphi}}{4} + \right. \\ \left. + e^{-i(m+1)\varphi} + e^{-i(m+1)\varphi} \right\} d\varphi =$$

$$A \sqrt{2\pi} \left\{ \frac{3}{2} \delta_{m,0} + \frac{1}{4} \delta_{m,2} + \frac{1}{4} \delta_{m,-2} + \delta_{m,1} + \delta_{m,-1} \right\}$$

$$\varphi(L_z) = \sqrt{\frac{8}{35}} \left\{ \frac{3}{2} \delta_{m,0} + \frac{1}{4} \delta_{m,2} + \frac{1}{4} \delta_{m,-2} + \delta_{m,1} + \delta_{m,-1} \right\}.$$

85. Hàm sóng và năng lượng của hạt trong giếng thế một chiều có thành cao vô hạn, có bề rộng d có dạng

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{d^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Hàm sóng trong biểu diễn năng lượng (E – biểu diễn) có dạng

$$\varphi(E_n) = \varphi_n = \int_0^d \psi(x) \psi_n^*(x) dx, \text{ trong đó}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} x^2 - 4d^2 & \text{khi } 0 \leq x \leq d \\ 2 & \text{khi } x > d \text{ và } x < 0 \end{cases}$$

$$\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{d}} \left\{ \int_0^d x^2 \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) dx - 4d^2 \int_0^d \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) dx \right\}$$

Thực hiện phép tính tích phân với sự chú ý :

$$\sin(kx)dx = -\frac{1}{k}d(\cos kx), \cos(kx)dx = \frac{1}{k}d(\sin kx),$$

$\cos(n\pi) = (-1)^n$ và $\sin n\pi = 0$ ta tìm được :

$$\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{d}} \left\{ -\frac{d^3}{n\pi}(-1)^n + \frac{2d^3}{(n\pi)^3}[(-1)^n - 1] + \frac{4d^3}{n\pi} \times [(-1)^n - 1] \right\}$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

86. Chứng minh như bài toán về mômen xung lượng ta tìm được :

$$a) \widehat{S}_x^2 \widehat{S}_x - \widehat{S}_x \widehat{S}_x^2 = 0, \widehat{S}_y^2 \widehat{S}_y - \widehat{S}_y \widehat{S}_y^2 = 0, \widehat{S}_z^2 \widehat{S}_z - \widehat{S}_z \widehat{S}_z^2 = 0.$$

Điều đó có nghĩa rằng có thể đo được đồng thời bình phương spin và hình chiếu spin trên cùng một trục.

$$b) \widehat{S}_z \psi_{m_s} = m_s \hbar \psi_{m_s}, \widehat{S}^2 \psi_{m_s} = s(s+1) \hbar^2 \psi_{m_s}, s,$$

trong đó m_s có $(2s+1)$ giá trị ($m_s = -s, -s+1, \dots, s$) và s là số nguyên ($s = 0, 1, 2, 3, \dots$) hoặc là số bán nguyên $\left(s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots\right)$. Mỗi

hạt đã cho thì số s hoàn toàn xác định. Hạt có spin nguyên gọi là bôzôn, và hạt có spin bán nguyên gọi là fermiôn.

87. a) Gọi ψ_1 là hàm sóng của electron ứng với $m_1 = \frac{1}{2}$ và ψ_2 là hàm sóng của electron ứng với $m_s = -\frac{1}{2}$. Trong biểu diễn S_z ta có :

$$\widehat{S}_z \psi_1 = \frac{1}{2} \hbar \psi_1, \quad \widehat{S}_z \psi_2 = -\frac{1}{2} \hbar \psi_2$$

hay

$$\begin{pmatrix} \widehat{S}_z & \psi_1 \\ \widehat{S}_z & \psi_2 \end{pmatrix} = \widehat{S}_z \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

Vậy trong biểu diễn S_z ta có $\widehat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \widehat{\sigma}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ hay

$\widehat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Đặt $\widehat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \widehat{\sigma}_x$, $\widehat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \widehat{\sigma}_y$ và tìm dạng ma trận

$\widehat{\sigma}_z, \widehat{\sigma}_y$. Trị riêng của $\widehat{S}_x, \widehat{S}_y, \widehat{S}_z$ bằng $\pm \frac{\hbar}{2}$ nên trị riêng của

$\widehat{\sigma}_x, \widehat{\sigma}_y, \widehat{\sigma}_z$ bằng ± 1 .

$$\text{Vậy } \widehat{\sigma}_x^2 = \widehat{\sigma}_y^2 = \widehat{\sigma}_z^2 = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Từ các hệ thức giao hoán của $\widehat{S}_x, \widehat{S}_y, \widehat{S}_z$ dễ thấy rằng :

$$\widehat{\sigma}_x \widehat{\sigma}_y - \widehat{\sigma}_y \widehat{\sigma}_x = 2i \widehat{\sigma}_z$$

$$\widehat{\sigma}_y \widehat{\sigma}_z - \widehat{\sigma}_z \widehat{\sigma}_y = 2i \widehat{\sigma}_x$$

$$\widehat{\sigma}_z \widehat{\sigma}_x - \widehat{\sigma}_x \widehat{\sigma}_z = 2i \widehat{\sigma}_y$$

Chú ý rằng :

$$\begin{aligned}
 2i(\widehat{\sigma_x} \widehat{\sigma_y} + \widehat{\sigma_y} \widehat{\sigma_x}) &= (2i\widehat{\sigma_x})\widehat{\sigma_y} + \widehat{\sigma_y}(2i\widehat{\sigma_x}) = \\
 &= (\widehat{\sigma_y} \widehat{\sigma_z} - \widehat{\sigma_z} \widehat{\sigma_y})\widehat{\sigma_y} + \widehat{\sigma_y}(\widehat{\sigma_y} \widehat{\sigma_z} - \widehat{\sigma_z} \widehat{\sigma_y}) = \\
 &= \widehat{\sigma_y} \widehat{\sigma_z} \widehat{\sigma_y} - \widehat{\sigma_z} \widehat{\sigma_y}^2 + \widehat{\sigma_y}^2 \widehat{\sigma_z} - \widehat{\sigma_y} \widehat{\sigma_z} \widehat{\sigma_y} = -\widehat{\sigma_y} + \widehat{\sigma_z} = 0.
 \end{aligned}$$

Chứng minh tương tự, ta tìm được :

$$\widehat{\sigma_x} \widehat{\sigma_y} = -\widehat{\sigma_y} \widehat{\sigma_x} = i\widehat{\sigma_z}$$

$$\widehat{\sigma_y} \widehat{\sigma_z} = -\widehat{\sigma_z} \widehat{\sigma_y} = i\widehat{\sigma_x}$$

$$\widehat{\sigma_z} \widehat{\sigma_x} = -\widehat{\sigma_x} \widehat{\sigma_z} = i\widehat{\sigma_y}$$

Đặt :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$$

Dùng hệ thức $\widehat{\sigma_x} \widehat{\sigma_z} = -\widehat{\sigma_z} \widehat{\sigma_x}$ và $\widehat{\sigma_x} = \widehat{\sigma_x}^+$ ta tìm được :

$$\widehat{\sigma_x} = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{12}^* & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix}$$

trong đó α là số thực bất kì.

Tương tự, dùng hệ thức $\widehat{\sigma_y} \widehat{\sigma_z} = \widehat{\sigma_z} \widehat{\sigma_y}$, $\widehat{\sigma_y} = \widehat{\sigma_y}^+$ ta có :

$$\widehat{\sigma_y} = \begin{pmatrix} 0 & b_{12} \\ b_{12}^* & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{pmatrix}$$

trong đó β là số thực bất kì.

Dùng hệ thức $\widehat{\sigma}_x \widehat{\sigma}_y = i \widehat{\sigma}_z$ ta tìm được $\alpha - \beta = \frac{\pi}{2}$.

Nếu chọn $\alpha = 0$ thì $\beta = -\frac{\pi}{2}$, khi đó ta có :

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

Trong biểu diễn S_y ta tìm được :

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

trong biểu diễn S_x ta có :

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

b) Kí hiệu $\chi^{(1)}, \chi^{(2)}, \chi^{(3)}$ là các hàm riêng và $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ là các trị riêng của $\widehat{\sigma}_x, \widehat{\sigma}_y, \widehat{\sigma}_z$ ta có :

$$\widehat{\sigma}_x \chi^{(1)} = \sigma_x \chi^{(1)}, \widehat{\sigma}_y \chi^{(2)} = \sigma_y \chi^{(2)}, \widehat{\sigma}_z \chi^{(3)} = \sigma_z \chi^{(3)}.$$

Ta tìm các hàm riêng $\chi^{(i)}$ dưới dạng :

$$\chi^{(1)} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \chi^{(2)} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}, \chi^{(3)} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

Từ phương trình $\widehat{\sigma}_x \chi^{(1)} = \sigma_x \chi^{(1)}$ ta có :

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_2 \\ a_1 \end{pmatrix} = \sigma_x \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_x & a_1 \\ \sigma_x & a_2 \end{pmatrix}$$

Từ đây suy ra :

$$a_2 = \sigma_x a_1, a_1 = \sigma_x a_2$$

$$a_2 = \sigma_x a_1 = \sigma_x^2 a_2 \text{ hay } \sigma_x^2 = 1 \rightarrow \sigma_x = \pm 1$$

Ứng với giá trị $\sigma_x = +1$ thì $a_1 = a_2$ và hàm riêng $\chi^{(1)}$ tương ứng là $\chi_+^{(1)}$ có dạng :

$$\chi_+^{(1)} = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

ứng với giá trị $\sigma_x = -1$ thì $a_1 = -a_2$ và hàm riêng tương ứng có dạng : $\chi_-^{(1)} = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

Từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng $\chi^{(1)}$ (hoặc $\chi_+^{(1)}$ hoặc $\chi_-^{(1)}$)

$$\chi^{+(1)} \chi^{(1)} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = |a_1|^2 + |a_2|^2 = 1,$$

suy ra :

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 2|a_1|^2 = 1$$

hay :

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha} \text{ (}\alpha \text{ là số thực bất kì). Vậy :}$$

$$\chi_+^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha_1} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \chi_-^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha_2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

trong đó α_1, α_2 là những số thực bất kì.

Từ phương trình $\hat{\sigma}_y \chi^{(2)} = \sigma_y \chi^{(2)}$ ta có :

$$\sigma_y \chi^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -ib_2 \\ ib_1 \end{pmatrix} = \sigma_y \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_y & b_1 \\ \sigma_y & b_2 \end{pmatrix}$$

Từ đây suy ra :

$$-ib_2 = \sigma_y b_1 ; ib_1 = \sigma_y b_2$$

$$b_2 = \sigma_y ib_1 = \sigma_y^2 b_2 \Rightarrow \sigma_y^2 = 1 \text{ và } \sigma_y = \pm 1$$

Khi $\sigma_y = +1$ ta có $b_2 = ib_1$ và khi $\sigma_y = -1$ ta có $b_2 = -ib_1$. Các hàm riêng ứng với $\sigma_y = 1$ và $\sigma_y = -1$ là $\chi_+^{(2)}$ và $\chi_-^{(2)}$:

$$\chi_+^{(2)} = b_1 \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \chi_-^{(2)} = b_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}.$$

Từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng :

$$\chi_+^{(2)} \chi_+^{(2)*} = (b_1^* b_2^*) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = |b_1|^2 + |b_2|^2 = 2|b_1|^2 = 1,$$

từ đây suy ra $b_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\beta_1}$. Tương tự, từ điều kiện $\chi_-^{(2)} \chi_-^{(2)*} = 1$

suy ra $b_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\beta_2}$. Vậy :

$$\chi_+^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\beta_1} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \chi_-^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\beta_2} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

trong đó β_1 và β_2 là những số thực bất kì.

Từ phương trình $\hat{\sigma}_z \chi^{(3)} = \sigma_z \chi^{(3)}$ ta có :

$$\widehat{\sigma_z} \chi^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ -c_2 \end{pmatrix} = \sigma_z \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_z & c_1 \\ \sigma_z & c_2 \end{pmatrix}$$

Ta có :

$$c_1 = \sigma_z c_1, -c_2 = \sigma_z c_2$$

$$c_1^2 = \sigma_z^2 c_1^2, \quad c_2^2 = \sigma_z^2 c_2^2 \Rightarrow \sigma_z^2 = 1 \text{ và } \sigma_z = \pm 1$$

Khi $\sigma_z = +1$ thì $-c_2 = c_2$ hay $c_2 = 0$ và khi $\sigma_z = -1$ thì $c_1 = -c_1$ hay $c_1 = 0$. Khi đó ta có :

$$\chi_+^{(3)} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_-^{(3)} = c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng :

$$\chi_+^{+(3)} \chi_+^{(3)} = (c_1^* 0) \begin{pmatrix} c_1 \\ 0 \end{pmatrix} = |c_1|^2 = 1$$

$$\chi_-^{+(3)} \chi_-^{(3)} = (0 \ c_2^*) \begin{pmatrix} 0 \\ c_2 \end{pmatrix} = |c_2|^2 = 1,$$

suy ra

$$c_1 = e^{i\gamma_1}, c_2 = e^{i\gamma_2}$$

với γ_1, γ_2 là những số thực bất kì. Vậy :

$$\chi_+^{(3)} = e^{i\gamma_1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_-^{(3)} = e^{i\gamma_2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Nghiệm tổng quát $\chi^{(3)}$ là tổ hợp tuyến tính từ các nghiệm $\chi_+^{(3)}$ và $\chi_-^{(3)}$:

$$\chi^{(3)} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = c_+ \chi_+^{(3)} + c_- \chi_-^{(3)}$$

$$= c_+ e^{i\gamma_1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_- e^{i\gamma_2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_+ & e^{i\gamma_1} \\ c_- & e^{i\gamma_2} \end{pmatrix}$$

Từ điều kiện chuẩn hoá hàm $\chi^{(3)}$

$$\chi^{+(3)} \chi^{(3)} = (\psi_1^* \psi_2^*) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = |c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$$

Dễ thấy rằng

$$c_+ = e^{iq} \cos \delta, \quad c_- = e^{ik} \sin \delta,$$

trong đó q, k, δ là những số thực bất kì.

Hàm riêng $\chi^{(3)}$ tổng quát có dạng :

$$\chi^{(3)} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \cos \delta \\ e^{i\beta} \sin \delta \end{pmatrix},$$

trong đó α và β ($\alpha = \gamma_1 + q, \beta = \gamma_2 + k$) và δ là những số thực bất kì. Trong trạng thái $\chi^{(3)}$ này hình chiếu spin không có giá trị xác định. Xác suất của giá trị spin $\frac{1}{2}$ trên trục z bằng $\cos^2 \delta$ và xác suất

của giá trị spin $-\frac{1}{2}$ trên trục z bằng $\sin^2 \delta$.

c) Ta biết

$$\widehat{S}_x^2 = \frac{\hbar^2}{4} \sigma_x^2 = \frac{\hbar^2}{4} I, \quad \widehat{S}_y^2 = \frac{\hbar^2}{4} \sigma_y^2 = \frac{\hbar^2}{4} I$$

$$\widehat{S}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \sigma_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} I$$

trong đó $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. Các $\widehat{S}_x^2$, $\widehat{S}_y^2$, $\widehat{S}_z^2$ giao hoán với nhau nên các bình phương hình chiếu spin của electron trên các trục x, y, z có giá trị đồng thời xác định.

d) Bình phương hình chiếu spin trên phương $\vec{a}$ được xác định như sau :

$$\begin{aligned} \left(\widehat{S} \frac{\vec{a}}{a} \right)^2 &= \frac{1}{a^2} (\widehat{S}\vec{a})(\widehat{S}\vec{a}) = \frac{\hbar^2}{4a^2} (\widehat{\sigma}\vec{a})(\widehat{\sigma}\vec{a}) = \\ &= \frac{1}{a^2} \frac{\hbar^2}{4} (\widehat{\sigma}_x a_x + \widehat{\sigma}_y a_y + \widehat{\sigma}_z a_z)(\widehat{\sigma}_x a_x + \widehat{\sigma}_y a_y + \widehat{\sigma}_z a_z) = \\ &= \frac{\hbar^2}{4a^2} \left\{ \widehat{\sigma}_x^2 a_x^2 + \widehat{\sigma}_y^2 a_y^2 + \widehat{\sigma}_z^2 a_z^2 + (\widehat{\sigma}_x \widehat{\sigma}_y + \right. \\ &\quad \left. + \widehat{\sigma}_y \widehat{\sigma}_x) a_x a_y + (\widehat{\sigma}_y \widehat{\sigma}_z + \widehat{\sigma}_z \widehat{\sigma}_y) a_y a_z + (\widehat{\sigma}_z \widehat{\sigma}_x + \widehat{\sigma}_x \widehat{\sigma}_z) a_z a_x \right\}. \end{aligned}$$

Chú ý rằng

$$\widehat{\sigma}_x^2 = \widehat{\sigma}_y^2 = \widehat{\sigma}_z^2 = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \widehat{\sigma}_x \widehat{\sigma}_y + \widehat{\sigma}_y \widehat{\sigma}_x = 0,$$

$$\widehat{\sigma}_y \widehat{\sigma}_z + \widehat{\sigma}_z \widehat{\sigma}_y = 0; \quad \widehat{\sigma}_z \widehat{\sigma}_x + \widehat{\sigma}_x \widehat{\sigma}_z = 0; \quad a_x^2 + a_y^2 + a_z^2 = a^2,$$

ta được :

$$\begin{aligned} \left(\widehat{S} \frac{\vec{a}}{2} \right)^2 &= \frac{\hbar^2}{4} I \\ \left(\widehat{S} \frac{\vec{a}}{a} \right)^2 \chi &= S_a^2 \chi = \frac{\hbar^2}{4} I \chi = \frac{\hbar^2}{4} \chi. \end{aligned}$$

Bình phương hình chiếu trên trục $\vec{a}$ là

$$S_a^2 = \frac{\hbar^2}{4} \text{ và } S_a = \pm \frac{\hbar}{2}.$$

88. Toán tử spin của hệ hai electron $\hat{S}$:

$$\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$$

Bình phương hai vế của đẳng thức này và chú ý $\hat{S}_1\hat{S}_2 = \hat{S}_2\hat{S}_1$ ta có :

$$\hat{S}_1\hat{S}_2 = \frac{\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2}{2}$$

Các toán tử $\hat{S}_1\hat{S}_2$, $\hat{S}_1^2$, $\hat{S}_2^2$ giao hoán với $\hat{S}^2$ nên chúng có hàm riêng chung χ_s .

$$\begin{aligned}\hat{S}_1\hat{S}_2\chi_s &= \left(\frac{\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2}{2} \right) \chi_s \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \{ S(S+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1) \} \chi_s\end{aligned}$$

Đối với electron thì $s_1 = \frac{1}{2}$, $s_2 = \frac{1}{2}$.

Khi đó giá trị riêng của $\hat{S}_1\hat{S}_2$ là :

$$\frac{\hbar^2}{2} \left\{ S(S+1) - \frac{3}{2} \right\}$$

Khi hai spin song song thì $S = 1$ và khi hai spin đối song thì $S = 0$. Vậy trị riêng của $\hat{S}_1\hat{S}_2$ bằng $\frac{\hbar^2}{4}$ khi hai spin song song và bằng $-\frac{3}{4}\hbar^2$ khi hai spin đối song.

89. a) Toán tử $\hat{S}$ không phụ thuộc vào tọa độ x, y, z nên $\hat{S}$ giao hoán với $\hat{L}$. Ta biết :

$$\widehat{L}_x \widehat{L}_y - \widehat{L}_y \widehat{L}_x = i\hbar \widehat{L}_z, \quad \widehat{S}_x \widehat{S}_y - \widehat{S}_y \widehat{S}_x = i\hbar \widehat{S}_z$$

$$\widehat{J}_x = \widehat{L}_x + \widehat{S}_x, \quad \widehat{J}_y = \widehat{L}_y + \widehat{S}_y, \quad \widehat{J}_z = \widehat{L}_z + \widehat{S}_z$$

$$\begin{aligned} \widehat{J}_x \widehat{J}_y - \widehat{J}_y \widehat{J}_x &= (\widehat{L}_x + \widehat{S}_x)(\widehat{L}_y + \widehat{S}_y) - (\widehat{L}_y + \widehat{S}_y)(\widehat{L}_x + \widehat{S}_x) = \\ &= \widehat{L}_x \widehat{L}_y - \widehat{L}_y \widehat{L}_x + \widehat{S}_x \widehat{S}_y - \widehat{S}_y \widehat{S}_x = i\hbar \widehat{L}_z + i\hbar \widehat{S}_z = i\hbar \widehat{J}_z \end{aligned}$$

Chứng minh tương tự ta tìm được :

$$\widehat{J}_y \widehat{J}_z - \widehat{J}_z \widehat{J}_y = i\hbar \widehat{J}_x, \quad \widehat{J}_z \widehat{J}_x - \widehat{J}_x \widehat{J}_z = i\hbar \widehat{J}_y.$$

b) Dùng các hệ thức giao hoán của câu (4) và chứng minh như bài (80) ta tìm được :

$$\widehat{J}^2 \widehat{J}_z - \widehat{J}_z \widehat{J}^2 = 0$$

$$\widehat{J}_z \psi_{m_j} = j_z \psi_{m_j} = m_j \hbar \psi_{m_j}$$

$$\widehat{J}^2 \psi_{m_j} = j^2 \psi_{m_j} = \hbar^2 j(j+1) \psi_{m_j},$$

trong đó $j_z = m_j \hbar$ với $m_j = -j, -j+1, \dots, j$

(m_j có $2j+1$ giá trị) là trị riêng của $\widehat{J}_z$ và $j^2 = \hbar^2 j(j+1)$ là trị riêng của $\widehat{J}^2$. Ta tìm trị riêng của $\widehat{J}\hat{S}$:

$$\widehat{J}\hat{S} = (\widehat{L} + \widehat{S})\hat{S} = \widehat{L}\hat{S} + \widehat{S}^2 = \frac{1}{2} \left\{ \widehat{J}^2 - \widehat{L}^2 + \widehat{S}^2 \right\} + \widehat{S}^2$$

$$\widehat{J}\hat{S} = \frac{1}{2} (\widehat{J}^2 + \widehat{S}^2 - \widehat{L}^2)$$

Các toán tử $\widehat{L^2}$, $\widehat{S^2}$, $\widehat{j^2}$, $\widehat{j_z}$ giao hoán với nhau nên chúng có chung hàm riêng ψ_{lsm_jj} . Ta có :

$$\widehat{j^2}\psi_{lsm_jj} = \frac{\hbar^2}{2} \{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)\} \psi_{lsm_jj}$$

Trị riêng của $\widehat{j^2}$ sẽ là :

$$\frac{1}{2} \hbar^2 \{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)\}$$

Ta xác định những giá trị có thể có của j khi cho l và s . Ta biết rằng : $j_z = L_z + S_z = (m + m_s) \hbar = m_j \hbar$

$$m_{\max} = l, m_{s\max} = s, m_{j\max} = l + s = j_{\max}$$

Các giá trị có thể có của j là :

$$l + s, l + s - 1, l + s - 2, \dots, l + s - q = j_{\min}$$

Ta cần xác định giá trị của $j_{\min}$ hay giá trị của q .

Các toán tử $\widehat{L^2}$, $\widehat{S^2}$, $\widehat{L_z}$, $\widehat{S_z}$ giao hoán với nhau nên chúng có chung hàm riêng $\psi_{lsm_l m_s}$. Khi cho l và s ta có $(2l + 1)(2s + 1)$ hàm $\psi_{lsm_l m_s}$ với mọi giá trị của m_l , m_s khác nhau. Ta hãy chỉ rằng khi l và s đã cho ta cũng có $(2l + 1)(2s + 1)$ hàm ψ_{lsm_jj} với mọi giá trị của m_j và j khác nhau. Để thấy rõ điều đó ta biểu diễn những cặp giá trị m_l , m_s và j , m_j bằng bảng sau :

m	m_s	$m_j = m + m_s$	j
l	s	$l + s$	$l + s$
$\begin{cases} l \\ l-1 \end{cases}$	$\begin{cases} s-1 \\ s \end{cases}$	$\begin{cases} l+s-1 \\ l+s-1 \end{cases}$	$\begin{cases} l+s \\ l+s-1 \end{cases}$
$\begin{cases} l \\ l-1 \\ l-2 \end{cases}$	$\begin{cases} s-2 \\ s-1 \\ s \end{cases}$	$\begin{cases} l+s-2 \\ l+s-2 \\ l+s-2 \end{cases}$	$\begin{cases} l+s \\ l+s-1 \\ l+s-2 \end{cases}$
l	$s-3$	$l+s-3$	$l+s$
$l-1$	$s-2$	$l+s-3$	$l+s-1$
$l-2$	$s-1$	$l+s-3$	$l+s-2$
$l-3$	s	$l+s-3$	$l+s-3$

Từ bảng trên ta thấy rằng ứng với $m_j = l + s$ chỉ có một hàm ψ_{lsmm_s} với $m = l$, $m_s = s$ và một hàm ψ_{lsmj} với $j = l + s$, $m_j = j = l + s$.
 Ứng với $m_j = l + s - 1$ có hai hàm ψ_{lsmm_s} với $m = l$, $m_s = s - 1$ và $m = l - 1$, $m_s = s$ và cũng có hai hàm ψ_{lsmj} với $m_j = l + s - 1$, $j = l + s$ và $m_j = l + s - 1$ và $j = l + s - 1$ v.v...

Vậy khi cho l và s thì số hàm ψ_{lsmm_s} khi m , m_s thay đổi bằng số hàm ψ_{lsmj} khi m_j và j thay đổi. Vậy khi cho l và s số hàm ψ_{lsmm_s} và ψ_{lsmj} đều bằng $(2l + 1)(2s + 1)$. Ứng với mỗi giá trị của j thì m_j có $(2j + 1)$ giá trị. Số hàm ψ_{lsmj} khi l , s đã cho nhưng m_j , j thay đổi mọi giá trị có thể có sẽ là :

$$j = j_{\max} = l + s, \\ \sum_{j = j_{\min}}^{j = j_{\max}} (2j + 1) = (2l + 1)(2s + 1).$$

Tổng theo j từ $j_{\min} = l + s - q$ đến $j_{\max} = l + s$ có $(q + 1)$ số hạng. Chú ý rằng :

$$q = l + s - j_{\min}, \quad \sum_{j = j_{\min}}^{j = j_{\max}} j = \frac{j_{\min} + j_{\max}}{2} (q + 1),$$

$$\sum_{j = j_{\min}}^{j = j_{\max}} (1) = (q + 1)$$

ta có :

$$(l + s + 1 - j_{\min})(l + s + 1 + j_{\min}) = (2l + 1)(2s + 1).$$

Từ đây suy ra $j_{\min} = \pm(l - s)$. Các giá trị của $j \geq 0$ nên $j_{\min} = |l - s|$. Vậy những giá trị có thể có của j khi l, s đã cho là :

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

90. Để thấy rằng

$$\beta_1 \beta_2 - \beta_2 \beta_1 = i\beta_3$$

$$\beta_1^2 + \beta_2^2 + \beta_3^2 = 2I, \quad \widehat{S^2} = \widehat{S_x^2} + \widehat{S_y^2} + \widehat{S_z^2} = \hbar^2 (\beta_1^2 + \beta_2^2 + \beta_3^2) I,$$

trong đó I là ma trận đơn vị. Trị riêng của $\widehat{S^2}$ là S^2 bằng :

$$S^2 = 2\hbar^2 = s(s + 1)\hbar^2.$$

Từ đây suy ra $s = 1$. Spin của hạt bằng 1.

91. Ta biết rằng hình chiếu của spin $\hat{\sigma} = \frac{\hat{S}}{\hbar}$ trên phương $\vec{r}$

được đặc trưng bằng ma trận :

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= \vec{r} \cdot \vec{\sigma} = x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z \\ &= x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z & x-iy \\ x+iy & -z \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Thực hiện phép biến đổi unita $\hat{S}$ thì hàm sóng hai thành phần $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ chuyển thành hàm $\psi' = S\psi$ và ma trận $\hat{\rho}$ chuyển thành

ma trận $\hat{\rho}' = \hat{S}\hat{\rho}\hat{S}^+$ với $\hat{S}\hat{S}^+ = \hat{S}^+\hat{S} = I$ (I là ma trận đơn vị). Trong cơ học lượng tử phép biến đổi unita không làm thay đổi trị riêng và các phần tử ma trận. Ta tìm ma trận $\hat{S}$ khi thực hiện phép quay hệ toạ độ trong không gian quanh gốc O để chuyển $\hat{\rho}$ về $\hat{\rho}'$ và chuyển ψ về $\psi' = \begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \end{pmatrix}$. Biết được ψ'_1 và ψ'_2 ta xác định được các xác suất $W'_1 = \psi'^2_1$ và $W'_2 = \psi'^2_2$.

Nếu quay hệ toạ độ Oxyz xung quanh trục O_z một góc φ thì ta có

$$x' = x\cos\varphi - y\sin\varphi$$

$$y' = x\sin\varphi + y\cos\varphi$$

$$z' = z$$

$$\begin{aligned}\hat{\rho}' &= \begin{pmatrix} z' & x'-iy' \\ x'+iy' & -z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z & (x-iy)e^{-i\varphi} \\ (x+iy)e^{i\varphi} & -z \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} e^{\frac{i\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z & x-iy \\ x+iy & z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

$$= \hat{S}(\varphi) \hat{\rho} \hat{S}^+(\varphi),$$

trong đó

$$\hat{S}(\varphi) = \begin{pmatrix} e^{\frac{i\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix}, \quad \hat{S}^+(\varphi) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix}.$$

Nếu quay hệ tọa độ Oxyz xung quanh trục Ox một góc θ thì ta có :

$$x' = x$$

$$y' = y \cos \theta + z \sin \theta$$

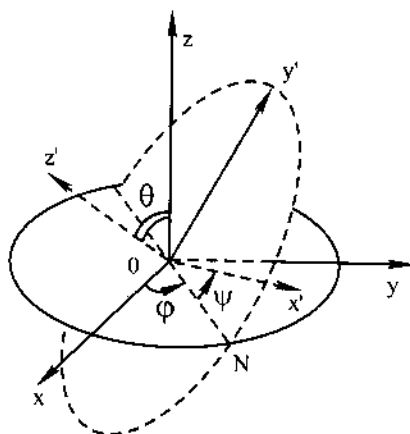
$$z' = -y \sin \theta + z \cos \theta$$

$$\begin{aligned} \hat{\rho}' &= \begin{pmatrix} z' & x - iy' \\ x' + iy' & -z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -y \sin \theta + z \cos \theta & x - iy \cos \theta - iz \sin \theta \\ x + iy \cos \theta + iz \sin \theta & y \sin \theta - z \cos \theta \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{pmatrix} \times \\ &\quad \times \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & -i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ -i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} = \hat{S}(\theta) \hat{\rho} \hat{S}^+(\theta) \end{aligned}$$

trong đó :

$$\hat{S}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & i \sin \frac{\theta}{2} \\ i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad \hat{S}^+(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -i \sin \frac{\theta}{2} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

Một phép quay bất kì để chuyển hệ tọa độ xyz về $x'y'z'$ được thực hiện bằng ba phép quay liên tiếp theo các góc Euler φ , θ và ψ như sau : quay xung quanh trục Oz một góc φ chuyển Ox về ON , quay xung quanh trục ON (vị trí mới của Ox) một góc θ chuyển Oz về Oz' sau cùng quay xung quanh Oz' một góc ψ chuyển ON về Ox' (h. 3.13) khi đó ta có :



Hình 3.13

$$\hat{\rho} = (\hat{S}(\psi)\hat{S}(\theta)\hat{S}(\varphi))\hat{\rho}(\hat{S}(\psi)\hat{S}(\theta)\hat{S}(\varphi))^+$$

$$\psi' = (\hat{S}(\psi)\hat{S}(\theta)\hat{S}(\varphi))\psi = \begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \end{pmatrix},$$

trong đó :

$$\hat{S}(\psi) = \begin{pmatrix} i\frac{\psi}{2} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\psi}{2}} \end{pmatrix}, \quad \hat{S}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & i\sin\frac{\theta}{2} \\ i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix},$$

$$\hat{S}(\varphi) = \begin{pmatrix} \frac{i\varphi}{2} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix}$$

Thực hiện phép tính ma trận ta có :

$$\hat{S}(\psi, \theta, \varphi) = \hat{S}(\psi), \quad \hat{S}(\theta)\hat{S}(\varphi) = \begin{pmatrix} a & ib \\ ib^* & a^* \end{pmatrix},$$

trong đó

$$a = \cos \frac{\theta}{2} e^{i\left(\frac{\varphi+\varphi'}{2}\right)}, \quad b = \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\left(\frac{\varphi-\varphi'}{2}\right)}$$

Ta xác định ψ'_1 và ψ'_2 :

$$\begin{aligned} \psi' &= \begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \end{pmatrix} = \hat{S}(\psi, \theta, \varphi)\psi = \begin{pmatrix} a & ib \\ ib^* & a^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} a\psi_1 + ib\psi_2 \\ ib^*\psi_1 + a^*\psi_2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Từ đây suy ra :

$$\psi'_1 = a\psi_1 + ib\psi_2, \quad \psi'_2 = ib^*\psi_1 + a^*\psi_2$$

$$W'_1 = |\psi'_1|^2 = |a|^2 |\psi_1|^2 + |b|^2 |\psi_2|^2 + ia^*b\psi_1^*\psi_2 - ib^*a\psi_1\psi_2^*$$

$$W'_2 = |\psi'_2|^2 = |b|^2 |\psi_1|^2 + |a|^2 |\psi_2|^2 + ia^*b\psi_1^*\psi_2 - ib^*a\psi_1\psi_2^*$$

Thay $\psi_1 = e^{i\alpha}\cos\delta$, $\psi_2 = e^{i\beta}\sin\delta$ và các biểu thức của a, b ta tìm được :

$$\begin{aligned} W'_1 &= \cos^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \delta + \sin^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \delta + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sin \theta \sin(2\delta) \sin(\varphi + \alpha - \beta) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W'_2 &= \sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \delta + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \delta - \\ &\quad - \frac{1}{2} \sin \theta \sin(2\delta) \sin(\varphi + \alpha - \beta). \end{aligned}$$

92. Để tìm hàm riêng của $\widehat{j}_z, \widehat{j}^2$ và $\widehat{L}^2$ ta viết $\widehat{j}_z$ và $\widehat{j}$ dưới dạng ma trận.

$$\widehat{j}_z = \widehat{L}_z + \widehat{S}_z = \widehat{L}_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

$$= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} =$$

$$= \hbar \begin{pmatrix} -i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -i \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$\widehat{j}^2 = (\widehat{L} + \widehat{S})^2 = \widehat{L}^2 + \widehat{S}^2 + 2\widehat{L}\widehat{S}, \quad \widehat{S}^2 = \frac{\hbar}{2} \widehat{\sigma}.$$

$$2\widehat{L}\widehat{S} = \hbar \widehat{L}\widehat{\sigma} = \hbar \left\{ \widehat{L}_x \widehat{\sigma}_x + \widehat{L}_y \widehat{\sigma}_y + \widehat{L}_z \widehat{\sigma}_z \right\} =$$

$$= \hbar \left\{ \begin{pmatrix} 0 & \widehat{L}_x \\ \widehat{L}_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i\widehat{L}_y \\ i\widehat{L}_y & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \widehat{L}_z & 0 \\ 0 & -\widehat{L}_z \end{pmatrix} \right\} =$$

$$= \hbar \begin{pmatrix} \widehat{L}_z & \widehat{L}_x - i\widehat{L}_y \\ \widehat{L}_x + i\widehat{L}_y & -\widehat{L}_z \end{pmatrix}$$

$$\widehat{L}^2 + \widehat{S}^2 = \widehat{L}^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \widehat{L}^2 + \frac{3}{4} \hbar^2 & 0 \\ 0 & \widehat{L}^2 + \frac{3}{4} \hbar^2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}\widehat{j^2} &= \widehat{L^2} + \widehat{S^2} + 2\widehat{L}\widehat{S} = \\ &= \begin{pmatrix} \widehat{L^2} + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar\widehat{L}_z & \hbar\widehat{L}_- \\ \hbar\widehat{L}_+ & \widehat{L^2} + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar\widehat{L}_z \end{pmatrix}\end{aligned}$$

trong đó $\widehat{L}_+ = \widehat{L}_x + i\widehat{L}_y$ và $\widehat{L}_- = \widehat{L}_x - i\widehat{L}_y$. Hàm sóng ψ được viết dưới dạng ma trận :

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}.$$

Phương trình hàm riêng và trị riêng của $\widehat{j_z}$ có dạng :

$$\begin{aligned}\widehat{j_z} \psi &= \hbar \begin{pmatrix} -i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -i\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \\ &= m\hbar \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

hay

$$\begin{aligned}-i\frac{\partial\psi_1}{\partial\varphi} + \frac{1}{2}\psi_1 &= m\psi_1 \\ -i\frac{\partial\psi_2}{\partial\varphi} - \frac{1}{2}\psi_2 &= m\psi_2\end{aligned}$$

Nghiệm ψ_1, ψ_2 có dạng :

$$\begin{aligned}\psi_1 &= f_1(r, \theta) e^{i\left(m-\frac{1}{2}\right)\varphi} \\ \psi_2 &= f_2(r, \theta) e^{i\left(m+\frac{1}{2}\right)\varphi} ;\end{aligned}$$

trong đó f_1, f_2 là hàm tùy ý phụ thuộc vào r, θ và m là số bán nguyên ($m_{\max} = l + s = l + \frac{1}{2}$ là số bán nguyên nên m là số bán nguyên).

Vì hàm sóng ψ cũng là hàm riêng của $\widehat{L}^2$ nên ta có :

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_1(r) Y_{l, m - \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ R_2(r) Y_{l, m + \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}$$

Ta phải chọn R_1 và R_2 sao cho hàm này đồng thời là hàm riêng của mômen toàn phần

$$\widehat{J}^2 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 j(j+1) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

hay

$$\begin{pmatrix} \widehat{L}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar\widehat{L}_z & \hbar\widehat{L}_- \\ \hbar\widehat{L}_+ & \widehat{L}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar\widehat{L}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_1(r) Y_{l, m - \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ R_2(r) Y_{l, m + \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} =$$

$$= \hbar^2 j(j+1) \begin{pmatrix} R_1(r) Y_{l, m - \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ R_2(r) Y_{l, m + \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}$$

Từ đây ta có :

$$\left(\widehat{L}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar\widehat{L}_z \right) R_1 Y_{l, m - \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) +$$

$$\begin{aligned}
& + \hbar \widehat{L}_- R_2 Y_{l, m + \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) = \hbar^2 j(j+1) R_1 Y_{l, m - \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\
& \hbar \widehat{L}_+ R_1 Y_{l, m - \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) + \left(\widehat{L}^2 + \frac{3}{4} \hbar^2 - \hbar \widehat{L}_z \right) R_2 Y_{l, m + \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) = \\
& = \hbar^2 j(j+1) R_2 Y_{l, m + \frac{1}{2}}(\theta, \varphi).
\end{aligned}$$

Các toán tử $\widehat{L}_+$ và $\widehat{L}_-$ không phụ thuộc vào r nên chúng chỉ tác dụng lên hàm $Y(\theta, \varphi)$. Ta biết rằng $\hat{j} = \hat{L} + \hat{S}$ và từ bài toán 80 ta có :

$$\begin{aligned}
\hat{j}_+ \psi_{j, m} &= \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \psi_{j, m+1} \\
\hat{j}_- \psi_{j, m+1} &= \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \psi_{j, m}
\end{aligned}$$

Nếu đặt $\hat{S} = 0$ thì $\hat{j} = \hat{L}$ và khi đó ta tìm được :

$$\begin{aligned}
\hat{L}_+ Y_{l, m}(\theta, \varphi) &= \hbar \sqrt{(l-m')(l+m'+1)} Y_{l, m'+1} \\
\hat{L}_- Y_{l, m'+1} &= \hbar \sqrt{(l-m')(l+m'+1)} Y_{l, m'}
\end{aligned}$$

với $m' = m - \frac{1}{2}$ thì ta có :

$$\begin{aligned}
\hat{L}_+ Y_{l, m - \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) &= \hbar \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} Y_{l, m + \frac{1}{2}} \\
\hat{L}_- Y_{l, m + \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) &= \hbar \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} Y_{l, m - \frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

Chú ý thêm rằng :

$$\hat{L}_z Y_{l, m - \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) = \left(m - \frac{1}{2}\right) \hbar Y_{l, m - \frac{1}{2}}(\theta, \varphi)$$

$$\hat{L}_z Y_{l, m + \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) = \left(m + \frac{1}{2}\right) \hbar Y_{l, m + \frac{1}{2}}(\theta, \varphi)$$

$$\hat{L}^2 Y_{l, m \pm \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l, m \pm \frac{1}{2}}(\theta, \varphi)$$

ta tìm được

$$\left[l(l+1) - j(j+1) + m + \frac{1}{4}\right] R_1 + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} R_2 = 0$$

$$\sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2} R_1 + \left[l(l+1) - j(j+1) - m + \frac{1}{4}\right] R_2 = 0.$$

Từ định thức của hệ phương trình bằng không ta có

$$j = l \pm \frac{1}{2}.$$

Trường hợp $j = l + \frac{1}{2}$ ta nhận được :

$$-\left(l + \frac{1}{2} - m\right) R_1 + \sqrt{l + \frac{1}{2} - m} \sqrt{l + \frac{1}{2} - m} R_2 = 0$$

$$\sqrt{l + \frac{1}{2} - m} \sqrt{l + \frac{1}{2} + m} R_1 - \left(l + \frac{1}{2} + m\right) R_2 = 0$$

hay

$$R_1 = \sqrt{l + \frac{1}{2} + m} R(r), \quad R_2 = \sqrt{l + \frac{1}{2} - m} R(r).$$

Trường hợp $j = l - \frac{1}{2}$ ta có :

$$\begin{aligned} \left(l + \frac{1}{2} + m\right) R_1 + \sqrt{l + \frac{1}{2} - m} \sqrt{l + \frac{1}{2} + m} R_2 &= 0 \\ \sqrt{l + \frac{1}{2} - m} \sqrt{l + \frac{1}{2} + m} R_1 + \left(l + \frac{1}{2} - m\right) R_2 &= 0 \end{aligned}$$

hay

$$R_1 = \sqrt{l + \frac{1}{2} - m} R(r), R_2 = -\sqrt{l + \frac{1}{2} + m} R(r)$$

Hàm sóng $\psi_{ljm}(r, \theta, \varphi)$ của hạt có dạng :

$$\begin{aligned} \psi_{l, j = l + \frac{1}{2}, m}(r, \theta, \varphi) &= R(r) \begin{cases} \sqrt{l + m + \frac{1}{2}} Y_{l, m - \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{l - m + \frac{1}{2}} Y_{l, m + \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{cases} \\ \psi_{l, j = l - \frac{1}{2}, m}(r, \theta, \varphi) &= R(r) \begin{cases} \sqrt{l - m + \frac{1}{2}} Y_{l, m - \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ -\sqrt{l + m + \frac{1}{2}} Y_{l, m + \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{cases} \end{aligned}$$

93. Trạng thái của electron trong nguyên tử được xác định bởi bốn số lượng tử n, l, m, m_s với :

$$\begin{aligned} m_s &= +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} & (m_s \text{ có hai giá trị}) \\ m &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l & (m \text{ có } 2l + 1 \text{ giá trị}) \\ l &= 0, 1, 2, \dots, n - 1 & (l \text{ có } n \text{ giá trị}) \\ n &= 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

- a) Số electron cực đại khi n, l, m đã cho và m_l thay đổi là 2.
- b) Số electron cực đại khi n, l đã cho và m, m_x thay đổi là $2(2l + 1)$.
- c) Ứng với một giá trị của n đã cho thì l có n giá trị $l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$. Số electron cực đại ứng với n đã cho sẽ là :

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l + 1) = 2(1 + 3 + 5 + 7 + \dots + 2n - 1) =$$

$$= 2 \left\{ \frac{1 + (2n - 1)}{2} \cdot n \right\} = 2n^2.$$

94. Hai electron là hệ hai hạt đồng nhất có spin $1/2$. Khi không có từ trường ngoài tác dụng và tương tác giữa các electron không phụ thuộc vào spin thì hàm sóng hai hạt electron được biểu diễn dưới dạng :

$$\psi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2, s_{1z}, s_{2z}) = \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(s_{1z}, s_{2z}),$$

trong đó $s_{1z} = m_1 \hbar, s_{2z} = m_2 \hbar$ với

$$m_1 = \pm \frac{1}{2}, m_2 = \pm \frac{1}{2}.$$

Hàm ψ_a có thể viết dưới dạng :

$$\psi_a = \phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi_a(m_1, m_2) = \phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi_s(m_1, m_2).$$

Hàm $\phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ là hàm đối xứng, $\phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ là hàm phản đối xứng, $\chi_s(m_1, m_2)$ là hàm spin đối xứng và $\chi_a(m_1, m_2)$ là hàm spin phản đối xứng của hệ hai hạt electron. Gọi $\psi_n(\vec{r}_1), \psi_m(\vec{r}_2)$ là hàm sóng của electron thứ nhất và thứ hai, $\alpha(m_1)$ là hàm riêng của $\widehat{S}_1^2$ và $\widehat{S}_{1z}$, $\beta(m_2)$ là hàm riêng của $\widehat{S}_2^2$ và $\widehat{S}_{2z}$, $\chi(m_1, m_2)$ là hàm riêng của

$$\widehat{S}^2 = (\widehat{S}_1 + \widehat{S}_2)^2 \text{ và } \widehat{S}_z = \widehat{S}_{1z} + \widehat{S}_{2z}, \text{ ta có :}$$

$$\widehat{H}(\vec{r}_1)\psi_n(\vec{r}_1) = E_n(\psi_n(\vec{r}_1), \quad \widehat{H}(\vec{r}_2)\psi_m(\vec{r}_2) = E_m\psi_m(\vec{r}_2),$$

$$\widehat{S}_1^2\alpha = s_1(s_1+1)\hbar^2\alpha = \frac{3}{4}\hbar^2\alpha, \quad \widehat{S}_{1z}\alpha = m_1\hbar\alpha = \pm\frac{\hbar}{2}\alpha,$$

$$\widehat{S}_2^2\beta = s_2(s_2+1)\hbar^2\beta = \frac{3}{4}\hbar^2\beta, \quad \widehat{S}_{2z}\beta = m_2\hbar\beta = \pm\frac{\hbar}{2}\beta,$$

$$\widehat{S}^2\chi = S(S+1)\hbar^2\chi, \quad S = 0, 1, \quad \widehat{S}_z\chi = m_s\hbar\chi \text{ với}$$

$$m_s = m_1 + m_2 = -1, 0, 1.$$

Các hàm $\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ và $\chi(m_1, m_2)$ có dạng :

$$\phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_n(\vec{r}_1)\psi_m(\vec{r}_2) - \psi_n(\vec{r}_2)\psi_m(\vec{r}_1)\} \text{ khi } S = 1$$

$$\phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_n(\vec{r}_1)\psi_m(\vec{r}_2) + \psi_n(\vec{r}_2)\psi_m(\vec{r}_1)\} \text{ khi } S = 0$$

$$\chi_s(m_1, m_2) = \begin{cases} \alpha\left(\frac{1}{2}\right)\beta\left(\frac{1}{2}\right) & \text{khi } S = 1, m_s = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\alpha\left(\frac{1}{2}\right)\beta\left(-\frac{1}{2}\right) + \alpha\left(-\frac{1}{2}\right)\beta\left(\frac{1}{2}\right)\right\} & \text{khi } S = 1, m_s = 0 \\ \alpha\left(-\frac{1}{2}\right)\beta\left(-\frac{1}{2}\right) & \text{khi } S = 1, m_s = -1 \end{cases}$$

$$\chi_a(m_1, m_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\alpha\left(\frac{1}{2}\right)\beta\left(-\frac{1}{2}\right) - \alpha\left(-\frac{1}{2}\right)\beta\left(\frac{1}{2}\right)\right\}$$

$$\text{khi } s = 0, m_s = 0.$$

95. Toán tử Haminton của dao động tử phi điều hoà có dạng :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(x),$$

trong đó

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

là toán tử Haminton của dao động tử điều hoà và

$$\hat{V}(x) = \varepsilon_1 \left(\frac{x}{x_0} \right)^3 + \varepsilon_2 \left(\frac{x}{x_0} \right)^4 \text{ là thế nhiễu loạn.}$$

Trong gần đúng bậc không ta có :

$$\hat{H}_0 \psi_n^0(x) = E_n^0 \psi_n^0$$

ở đây

$$\psi_n^0(x) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \quad \xi = \frac{x}{x_0}, \quad A_n = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$$

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

Năng lượng của dao động tử phi điều hoà trong gần đúng bậc nhất của lý thuyết nhiễu loạn được xác định bằng công thức :

$$E_n = E_n^0 + E_n^{(1)},$$

trong đó $E_n^{(1)} = V_{nn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{0*}(x) V(x) \psi_n^0(x) dx$

$$= A_n^2 x_0 \left\{ \varepsilon_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi), \xi^3 H_n(\xi) d\xi + \right. \\ \left. + \varepsilon_2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) \xi^4 H_n(\xi) d\xi \right\}.$$

Ta biết (xem bài toán 56)

$$\xi H_n = nH_{n-1} + \frac{1}{2}H_{n+1}$$

hay thay n bằng $n + k$ với $k = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ ta có :

$$\xi H_{n+k} = (n+k)H_{n+k-1} + \frac{1}{2}H_{n+k+1}.$$

Dễ dàng thấy rằng :

$$\xi^2 H_n = \xi(\xi H_n) = n\xi H_{n-1} + \frac{1}{2}\xi H_{n+1}.$$

$$= \left(n + \frac{1}{2}\right)H_n + (n-1)nH_{n-2} + \frac{1}{4}H_{n+2}.$$

$$\xi^3 H_n = \xi(\xi^2 H_n) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\xi H_n + n(n-1)\xi H_{n-2} + \frac{1}{4}\xi H_{n+2} =$$

$$= \frac{3}{2}n^2 H_{n-1} + n(n-1)(n-2)H_{n-3} +$$

$$+ \frac{3}{4}(n+1)H_{n+1} + \frac{1}{8}H_{n+3}$$

$$\xi^4 H_n = \frac{3}{2}n^2 \xi H_{n-1} + n(n-1)(n-2)\xi H_{n-3} +$$

$$+ \frac{3}{4}(n+1)\xi H_{n+1} + \frac{1}{8}\xi H_{n+3} = \frac{3}{4}(2n^2 + 2n + 1)H_n +$$

$$+ \frac{1}{4}(2n+3)H_{n+2} + \frac{1}{16}H_{n+4} +$$

$$+ n(n-1)(n-2)(n-3)H_{n-4} + n(n-1)(2n-1)H_{n-2}$$

Đặt các biểu thức của $\xi^3 H_n(\xi)$ và $\xi^4 H_n(\xi)$ vào các tích phân ở

trên và dùng điều kiện trực giao chuẩn hoá của hàm sóng :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^{0*}(x) \psi_n^0(x) dx = A_m A_n x_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_m(\xi) H_n(\xi) d\xi = \delta_{m,n}$$

ta tìm được :

$$E_n^{(1)} = \frac{3}{4} \varepsilon_2 (2n^2 + 2n + 1), n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

96. Thế năng của electron trong trường điện tích hạt nhân phân bố đều trong thể tích $V_0 = \frac{4\pi}{3} R^3$ có dạng :

$$U(r) = \begin{cases} - \left[\int_{r' < r} \frac{\rho dV'}{|\vec{r}' - \vec{r}|} + \int_{r' > r} \frac{\rho dV'}{|\vec{r}' - \vec{r}|} \right] & \text{khi } 0 \leq r \leq R \\ -\frac{Ze^2}{r} & \text{khi } r \geq R \end{cases}$$

trong đó $\rho = \frac{Ze^2}{V_0} = \text{const}$ là mật độ điện tích hạt nhân, $\rho dV'$ là điện tích

hạt nhân ở trong thể tích dV' . Ta tính $U(r)$ khi $0 \leq r \leq R$. Chú ý rằng :

$$|\vec{r}' - \vec{r}| = \sqrt{(\vec{r}' - \vec{r})^2} = \sqrt{r'^2 + r^2 - 2rr'\mu}$$

$$\mu = \cos\theta = \cos(\vec{r}', \vec{r}).$$

$$dV' = 2\pi r'^2 dr' \sin\theta d\theta = -2\pi r'^2 dr' d\mu \text{ ta có :}$$

$$U(r) = \frac{2\pi Ze^2}{V_0} \left\{ \int_{r' < r} r'^2 dr' \int_1^{-1} \frac{d\mu}{\sqrt{r'^2 + r^2 - 2rr'\mu}} + \int_r^R r'^2 dr' \int_1^{-1} \frac{d\mu}{\sqrt{r'^2 + r^2 - 2rr'\mu}} \right\}$$

Ta biết : $r' > r$

$$\int_1^{-1} \frac{d\mu}{\sqrt{r'^2 + r^2 - 2r'r\mu}} = \frac{2\sqrt{r'^2 + r^2 - 2r'r\mu}}{-2r'r} \bigg|_1^{-1} =$$

$$= -\frac{\sqrt{(r'+r)^2} - \sqrt{(r'-r)^2}}{r'r}$$

Khi $r' > r$ thì $\sqrt{(r'-r)^2} = r' - r$ và khi $r' < r$ thì $\sqrt{(r'-r)^2} = r - r'$
nên ta được :

$$\int_1^{-1} \frac{d\mu}{\sqrt{r'^2 + r^2 - 2r'r\mu}} = \begin{cases} -\frac{2}{r'} & \text{khi } r' > r \\ -\frac{2}{r} & \text{khi } r' < r \end{cases}$$

Thế năng $U(r)$ khi $0 \leq r \leq R$ được viết lại như sau :

$$U(r) = -\frac{4\pi Ze^2}{V_0} \left\{ \int_0^r \frac{r'^2 dr'}{r} + \int_r^R \frac{r'^2 dr'}{r'} \right\}$$

$$(r' < r) \quad (r' > r)$$

$$= -\frac{Ze^2}{R} \left\{ \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R^2} \right\}$$

Thế năng của electron trong trường điện tích khối của hạt nhân có dạng :

$$U(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{R} \left\{ \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R^2} \right\} & \text{khi } 0 \leq r \leq R \\ -\frac{Ze^2}{r} & \text{khi } r \geq R. \end{cases}$$

Toán tử Haminton của electron trong trường hợp không nhiễu loạn (trường hợp hạt nhân có điện tích điểm Ze) sẽ là :

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \left(-\frac{Ze^2}{r} \right).$$

Toán tử Haminton của electron trường hợp có nhiễu loạn (trường hợp điện tích hạt nhân phân bố đều trong hình cầu bán kính R) có dạng :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r)$$

Thế nhiễu loạn :

$$\hat{V}(r) = \hat{H} - \hat{H}_0 = U(r) - \left(-\frac{Ze^2}{r} \right)$$

$$\hat{V}(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{R} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R^2} \right) - \left(-\frac{Ze^2}{r} \right) & \text{khi } 0 \leq r \leq R \\ 0 & \text{khi } r \geq R. \end{cases}$$

Khi không nhiễu loạn, hàm sóng và năng lượng của electron ở trạng thái cơ bản có dạng :

$$\psi_0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}, E_0 = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2}$$

trong đó
$$a = \frac{\hbar^2}{Zme^2} \frac{5,29.10^{-9} \text{ cm}}{Z}.$$

Theo lý thuyết nhiễu loạn, hiệu chỉnh của phép gần đúng bậc nhất vào mức cơ bản bằng :

$$E_0^{(1)} = \int \psi_0^*(r) \hat{V}(r) \psi_0(r) dV = \frac{1}{\pi a^2} \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}} \hat{V}(r) 4\pi r^2 dr.$$

Khi $r \geq R$ thì $V(r) = 0$ nên ta có :

$$E_o^{(1)} = \frac{1}{\pi a^3} \int_0^R e^{-\frac{2r}{a}} \left\{ \frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{R} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R^2} \right) \right\} 4\pi r^2 dr.$$

Đối với mọi nguyên tố trong bảng tuần hoàn Mendêlêep $R \leq 10^{-12}$ cm nên khi $Z = Z_{\max} = 100$ thì $\frac{a}{R} \sim 50$. Vì vậy trong

miền $0 \leq r \leq R$ có thể coi $e^{-\frac{2r}{a}} \sim 1$. Khi đó ta có :

$$E_o^{(1)} \approx \frac{1}{\pi a^3} \int_0^R \left\{ \frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{R} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R^2} \right) \right\} 4\pi r^2 dr$$

$$E_o^{(1)} \approx \frac{2}{5} \frac{Ze^2}{a} \left(\frac{R}{a} \right)^2.$$

Năng lượng của electron trong gần đúng bậc nhất của lý thuyết nhiễu loạn bằng :

$$E \approx E_o + E_o^{(1)} = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2} \left\{ 1 - \frac{4}{5} \left(\frac{R}{a} \right)^2 \right\}.$$

97. Khi không nhiễu loạn ta có :

$$\hat{H}_o \psi_m^o = \frac{\hat{L}_z^2}{2I} \psi_m^o = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{d^2}{d\varphi^2} \psi_m^o = E_m^o \psi_m^o$$

trong đó :

$$\psi_m^o(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad E_m^o = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Khi có nhiễu loạn thì $\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{V}$ trong đó $\hat{V}$ là thế năng của mômen lưỡng cực ở trong điện trường đều. Ta biết :

$$\vec{D} = c_1 \vec{r}_1 + c_2 \vec{r}_2 = |c|(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) = |c|\vec{e}; \quad c_1 = |c|, \quad c_2 = -|c|$$

$$\begin{aligned}\hat{V} &= c_1 \phi(\vec{r}_1) + c_2 \phi(\vec{r}_2) = |c| \{ \phi(\vec{r}_1 + \vec{e}) - \phi(\vec{r}_1) \} = \\ &= |c| \vec{\nabla} \phi = \vec{D} \nabla \phi = -\vec{D} \vec{E}\end{aligned}$$

trong đó ϕ là thế tĩnh điện và $\vec{E} = -\nabla \phi$ là cường độ điện trường.

Đặt $\vec{E}$ dọc theo trục x, $\vec{D}$ làm thành với trục x một góc φ . Khi đó ta có :

$$\hat{V}(\varphi) = -\vec{D} \vec{E} = -D.E \cos \varphi = -\frac{D.E}{2} (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}).$$

$$V_{m'm} = \int_0^{2\pi} \psi_{m'}^0(\varphi) V(\varphi) \psi_m^0(\varphi) d\varphi = \frac{DE}{2} \{ \delta_{m', m+1} + \delta_{m', m-1} \}.$$

Các hiệu chỉnh của mức E_m^0 là :

$$E_m^{(1)} = V_{mm} = 0$$

$$E_m^{(2)} = \sum_{m'} \frac{|V_{m'm}|^2}{E_m^0 - E_{m'}^0} = \frac{D^2 E^2}{\hbar^2} I \frac{1}{(4m^2 - 1)}, \quad m \neq 1.$$

($m' \neq m$)

98. a) Trong từ trường ngoài đủ mạnh thì ta bỏ qua tương tác giữa $\hat{L}$ và $\hat{S}$. Khi đó mômen từ quỹ đạo $\frac{e\hat{L}}{2\mu c}$ và mômen spin $\frac{e\hat{S}}{\mu c}$ tương tác với từ trường ngoài $\vec{B}$ một cách độc lập. Khi không có nhiễu loạn ($\vec{B} = 0$) electron có năng lượng E_{nl}^0 và ở trạng thái được mô tả bằng hàm sóng :

$$\psi_{n/l/m_s}^0(\mathbf{r}, \theta, \varphi; m_s) = R_{nl}(r) P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \chi(m_s).$$

Trong gần đúng bậc nhất của lý thuyết nhiễu loạn phân hiệu chính năng lượng của electron được xác định bằng công thức :

$$E_{n/l, m, m_s}^{(1)} = \int \psi_{n/l, m, m_s}^{0*}(\mathbf{r}, \theta, \varphi, m_s) \hat{U} \psi_{n/l, m, m_s}^0(\mathbf{r}, \theta, \varphi, m_s) dV$$

$$E_{m/l, m, m_s}^{(1)} = -\frac{e\hbar B}{2\mu c}(m + em_s),$$

trong đó $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$; $m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$.

mỗi mức $E_{n/l}^0$ khi không nhiễu loạn bây giờ tách thành $(2l + 1) + 2 = 2l + 3$ mức. Sự tách mức này gọi là hiệu ứng Pasen Baka. Khi $B > 30000$ oextét ta quan sát được sự tách mức này ở Li và Na.

b) Khi tính đến liên kết $\vec{L} - \vec{S}$ ta có :

$$\hat{U} = -\vec{B} \frac{e}{2\mu c} \left\{ \hat{\vec{L}} + 2\hat{\vec{S}} \right\} = -\frac{e}{2\mu c} \vec{B} \left\{ \hat{\vec{j}} + \hat{\vec{S}} \right\} = -\vec{B} \hat{\vec{M}}$$

trong đó $\hat{\vec{j}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$. Toán tử $\hat{\vec{M}}$ có thể viết :

$$\hat{\vec{M}} = \frac{e}{2\mu c} (\hat{\vec{j}} + \hat{\vec{S}}) = \hat{G} \hat{\vec{j}}$$

Ta xác định toán tử $\hat{G}$. Dễ dàng thấy rằng

$$\hat{\vec{M}} \hat{\vec{j}} = \frac{e}{2\mu c} (\hat{j}^2 + \hat{\vec{S}} \hat{\vec{j}}) = \hat{G} \hat{j}^2$$

$$\begin{aligned} \hat{G} \hat{j}^2 \psi_{l, s, m, j} &= \hat{G} \hbar^2 j(j+1) \psi_{l, s, m, j} = \frac{e}{2\mu c} (\hat{j}^2 + \hat{\vec{S}} \hat{\vec{j}}) \psi_{l, s, m, j} = \\ &= \frac{e}{2\mu c} \left\{ \hbar^2 j(j+1) + \hat{\vec{S}} \hat{\vec{j}} \right\} \psi_{l, s, m, j} \end{aligned}$$

Từ đây ta có :

$$\hat{G} = \frac{e}{2\mu c} \left\{ 1 + \frac{\hat{\hat{J}}\hat{\hat{S}}}{\hbar^2 j(j+1)} \right\}$$

Chú ý rằng :

$$\hat{\hat{L}}\hat{\hat{S}} = \frac{\hat{j}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2}{2}, \quad \hat{\hat{J}}\hat{\hat{S}} = \hat{\hat{L}}\hat{\hat{S}} + \hat{S}^2 = \frac{\hat{j}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2}{2}$$

ta viết được :

$$\hat{G} = \frac{e}{2\mu c} \left\{ 1 + \frac{\hat{j}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2}{2\hbar^2 j(j+1)} \right\}$$

$$\hat{M} = \frac{e}{2\mu c} \left\{ 1 + \frac{\hat{j}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2}{2\hbar^2 j(j+1)} \right\} \hat{j}_z$$

Toán tử $\hat{U}$ bây giờ được viết lại như sau :

$$\hat{U} = -\hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{M}} = -\hat{B}\hat{M}_z = -\frac{eB}{2\mu c} \left\{ 1 + \frac{\hat{j}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2}{2\hbar^2 j(j+1)} \right\} \hat{j}_z$$

Hiệu chính bậc nhất mức năng lượng được xác định từ công thức :

$$E_{lsjm_j}^{(1)} = \int \psi_{lsjm_j}^{o*} \hat{U} \psi_{lsjm_j}^o dV = -g\mu_o B m_j$$

trong đó $\mu_o = \frac{e\hbar}{2\mu c}$ và $g = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{j(j+1)}$

Thừa số g gọi là thừa số Landé. Số lượng tử m_j chạy $2j + 1$ giá trị. Vì vậy khi chưa nhiễu loạn một mức năng lượng E_{nlsj}^o bây giờ

tách thành $(2j + 1)$ mức. Nói chung, sự tách mức năng lượng khi đặt nguyên tử trong từ trường gọi là hiệu ứng Zeeman (Zeeman).

99. Toán tử Haminton của hệ hai electron trong nguyên tử hay ion,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

trong đó $\hat{H}_0$ là toán tử Haminton khi không nhiễu loạn.

$$\hat{H}_0 = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{r_1} \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_2} \right)$$

và $\hat{V} = \frac{e^2}{r_{12}}$ là thế năng nhiễu loạn (r_i là khoảng cách từ electron

thứ i ($i = 1, 2$) đến tâm hạt nhân và r_{12} là khoảng cách giữa hai electron).

Hàm sóng hệ hai electron là hàm phản đối xứng.

$$\psi_a(\vec{r}_1, s_{1z}, \vec{r}_2, s_{2z}) = \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(m_{s1}, m_{s2})$$

Phương trình Schrödinger đối với hàm $\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$:

$$\hat{H}\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Ta tìm $\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ trong gần đúng bậc không (khi $\hat{V} = 0$)

$$H_0\phi^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E^0\phi^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Ta biết

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} \right) \psi_n(\vec{r}_i) = E_n \psi_n(\vec{r}_i), \quad i = 1, 2$$

Đặt

$$\phi_1^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_n(\vec{r}_1) \psi_m(\vec{r}_2), \quad \phi_2^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_n(\vec{r}_2) \psi_m(\vec{r}_1)$$

ta có :

$$\hat{H}_o \phi_1^o = (E_n + E_m) \phi_1^o = E^o \phi_1^o$$

$$\hat{H}_o \phi_2^o = (E_n + E_m) \phi_2^o = E^o \phi_2^o.$$

Mức E^o suy biến bội 2 (ứng với hai hàm ϕ_1^o, ϕ_2^o).

Hàm $\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ trong gần đúng bậc không có dạng :

$$\phi^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C_1 \phi_1^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + C_2 \phi_2^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Ta có :

$$\hat{H} \phi^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C_1 \hat{H} \phi_1^o + C_2 \hat{H} \phi_2^o = E(C_1 \phi_1^o + C_2 \phi_2^o).$$

Nhân ϕ_i^{o*} cả hai vế rồi tích phân ta có :

$$C_1 H_{11} + C_2 H_{12} = E C_1$$

$$C_1 H_{21} + C_2 H_{22} = E C_2,$$

trong đó

$$H_{ik} = \int \phi_i^{o*}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) (\hat{H}_o + \hat{V}) \phi_k^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

$$H_{ik} = E^o \delta_{ik} + V_{ik} \text{ với } V_{ik} = \int \phi_i^{o*} \hat{V} \phi_k^o d\vec{r}_1 d\vec{r}_2.$$

Đặt $E = E^o + E'$ ta có :

$$(V_{11} - E') C_1 + V_{12} C_2 = 0$$

$$V_{21} C_1 + (V_{22} - E') C_2 = 0$$

$$V_{11} = \int \phi_1^{o*} \hat{V} \phi_1^o d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \int |\psi_n(\vec{r}_1)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} |\psi_m(\vec{r}_2)|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

$$V_{22} = \int \phi_2^{o*} \hat{V} \phi_2^o d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \int |\psi_n(\vec{r}_2)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} |\psi_m(\vec{r}_1)|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

$$V_{11} = V_{22} = K \text{ (thay biến } \vec{r}_2 \rightarrow \vec{r}_1 \text{ thì } V_{22} \rightarrow V_{11})$$

$$\begin{aligned} V_{12} &= \int \phi_1^{*\circ} \hat{V} \phi_2^{\circ} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \\ &= \int \psi_n^*(\vec{r}_1) \psi_m(\vec{r}_1) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_m(\vec{r}_1) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_n^*(\vec{r}_2) \psi_n(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \\ V_{21} &= \int \phi_2^{*\circ} \hat{V} \phi_1^{\circ} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \\ &= \int \psi_m^*(\vec{r}_1) \psi_n(\vec{r}_1) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_n^*(\vec{r}_2) \psi_m(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \end{aligned}$$

$$V_{12} = V_{21} = J \text{ (thay } r_2 \rightarrow r_1 \text{ thì } V_{21} \rightarrow V_{12})$$

Để có nghiệm C_i ($i = 1, 2$) khác không ta phải có :

$$\begin{vmatrix} (K - E') & J \\ J & (K - E') \end{vmatrix} = 0$$

Từ đây suy ra :

$$E' = K \pm J ; E = E^{\circ} + E' = E^{\circ} + K \pm J$$

Đặt $E' = K + J$ vào phương trình

$$(K - E')C_1 + JC_2 = 0,$$

ta tìm được $C_1 = C_2$. Đặt $E' = K - J$ vào phương trình trên ta có C_1

$$= -C_2. \phi_s^{\circ} = C_1 (\phi_1^{\circ} + \phi_2^{\circ}), , E = E^{\circ} + K + J$$

$$\phi_a^{\circ} = C_1 (\phi_1^{\circ} - \phi_2^{\circ}), E = E^{\circ} + K - J$$

Từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng ϕ° ta tìm được $C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Hàm

sóng ψ_a của hệ hai electron trong nguyên tử (hay ion) có dạng :

$$\begin{cases} \psi_a(\bar{r}_1, \bar{r}_2, m_{s_1}, m_{s_2}) = \phi_a^0(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \chi_s(m_{s_1}, m_{s_2}) \\ E = E^0 + K - J \end{cases}$$

$$\begin{cases} \psi_a(\bar{r}_1, \bar{r}_2, m_{s_1}, m_{s_2}) = \phi_s^0(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \chi_a(m_{s_1}, m_{s_2}) \\ E = E^0 + K + J, \end{cases}$$

trong đó χ_s và χ_a là hàm spin đối xứng và phản đối xứng của hệ hai electron.

100. Gọi $\psi_n(\xi)$ là hàm riêng của $\hat{H}$ tương ứng với trị riêng E_n .
Ta có :

$$\hat{H} \psi_n(\xi) = E_n \psi_n(\xi).$$

Ta khai triển hàm $\psi(\xi)$ theo hệ hàm $\psi_n(\xi)$

$$\psi(\xi) = \sum_n c_n \psi_n(\xi)$$

Từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng

$$\int |\psi(\xi)|^2 d\xi = 1,$$

suy ra :

$$\sum_n |C_n|^2 = 1.$$

Dễ dàng thấy rằng :

$$I = \int \psi^*(\xi) \hat{H} \psi(\xi) d\xi = \sum_n |C_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_n |C_n|^2 = E_0$$

hay

$$E_0 \leq I = \int \psi^*(\xi) \hat{H} \psi(\xi) d\xi$$

Để tìm E_0 chỉ cần tìm giá trị cực tiểu của I . Thường chọn hàm $\psi(\xi, \alpha, \beta, \dots)$ phụ thuộc vào các thông số $\alpha, \beta, \dots$ khi đó $I(\alpha, \beta, \dots)$

là hàm của α, β . Từ điều kiện $\frac{\partial I}{\partial \alpha} = 0 \dots$ ta tìm được $\alpha = \alpha_0, \beta = \beta_0$,

.... ứng với giá trị cực tiểu của I và do đó ta xác định được E_0 .

101. Từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{\beta^2}} dx = A^2 \beta \sqrt{\pi} = 1,$$

ta tìm được $A^2 = \frac{1}{\beta \sqrt{\pi}}$. Ta tính $I(\beta)$:

$$\begin{aligned} I(\beta) &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right\} \psi(x) dx = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) U(x) \psi(x) dx \end{aligned}$$

Đặt $\alpha = \frac{1}{\beta^2}$ và chú ý rằng

$$K_0 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$K_2 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{\partial K_0}{\partial \alpha} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}$$

$$K_4 = \int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{\partial K_2}{\partial \alpha} = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}}$$

ta xác định được $I(\beta)$,

a) Khi $U(x) = U_0 x^4$ và hàm thử $\psi(x) = Ae^{-\frac{x^2}{2\beta^2}}$ ta có :

$$I(\beta) = \frac{\hbar^2}{4m\beta^2} + \frac{3}{4}U_0\beta^4$$

Từ điều kiện cực tiểu của $I(\beta)$ $\left(\frac{\partial I}{\partial \beta} = 0\right)$ ta tìm được :

$$\beta^2 = \beta_0^2 = \left(\frac{\hbar^2}{6mU_0}\right)^{1/3}$$

b) Khi $U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ và hàm thử $\psi(x) = Ae^{-\frac{x^2}{2\beta^2}}$ ta có :

$$I(\beta) = \frac{\hbar^2}{4m\beta^2} + \frac{1}{4}m\omega^2\beta^2.$$

Năng lượng của hạt ở trạng thái cơ bản là :

$$E_0 = I_{\min} = \frac{\hbar^2}{4m\beta_0^2} + \frac{3}{4}U_0\beta_0^4 = \frac{3}{4}\left\{\frac{3}{4}\frac{\hbar^4}{m^2}U_0\right\}^{1/3}.$$

Từ điều kiện $\frac{\partial I}{\partial \beta} = 0$, ta được $\beta^2 = \beta_0^2 = \frac{\hbar}{m\omega}$.

Năng lượng và hàm sóng của dao động tử điều hoà một chiều ở trạng thái cơ bản sẽ là :

$$E_0 = I_{\min} = \frac{\hbar^2}{4m\beta_0^2} + \frac{1}{4}m\omega^2\beta_0^2 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$\psi_0(x) = A e^{-\frac{x^2}{2\beta_0^2}} \quad A = \frac{1}{\sqrt{\beta_0} \sqrt{\pi}}, \quad \beta_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

102. Toán tử Haminton của nguyên tử hiđrô có dạng :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r},$$

trong đó :

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}$$

Từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng ta xác định A

$$\int \psi^*(r) \psi(r) r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi = 4\pi A^2 \int_0^\infty e^{-2\beta r} r^2 dr = 1$$

Thực hiện phép tính tích phân từng phần :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-2\beta r} r^2 dr &= \frac{1}{-2\beta} \int_0^\infty r^2 d(e^{-2\beta r}) = \frac{1}{(2\beta)} \int_0^\infty e^{-2\beta r} r dr = \\ &= -\frac{2}{(2\beta)^2} \int_0^\infty r d(e^{-2\beta r}) = \frac{2}{(2\beta)^2} \int_0^\infty e^{-2\beta r} dr = \frac{2}{(2\beta)^3}, \end{aligned}$$

ta tìm được $A^2 = \beta^3/\pi$.

Ta tính $I(\beta)$

$$I(\beta) = \int_0^\infty \psi^*(r) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} \right\} \psi(r) 4\pi r^2 dr$$

Chú ý rằng $\psi(r) = A e^{-\beta r}$, $\frac{\partial \psi(r)}{\partial \theta} = \frac{\partial \psi(r)}{\partial \varphi} = 0$, ta được

$$I(\beta) = \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} - e^2 \beta$$

Từ điều kiện cực tiểu của $I(\beta)$ ta nhận được

$$\beta = \beta_0 = \frac{1}{a} \text{ trong đó } a = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

Năng lượng và hàm sóng của electron ở trạng thái cơ bản trong nguyên tử hydro sẽ là :

$$E_0 = I_{\min} = \frac{\hbar^2 \beta_0^2}{2m} - e^2 \beta_0 = -\frac{e^2}{2a}$$

$$\psi_0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}.$$

103. a) Phương trình Schrödinger của hạt có dạng :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right\} \psi(x,t).$$

Đặt $\psi(x, t) = A(x, t) e^{\frac{i}{\hbar} S(x, t)}$ vào phương trình Schrödinger, ta tìm được :

$$A \left\{ \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2}{2m} + U(x) \right\} - i\hbar \left\{ \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\left[A \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial x} \right]}{2m} \right\} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} = 0$$

b) Trong gần đúng bậc không đối với $\hbar$ của phương trình Schrödinger ta có :

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2}{2m} + U(x) = 0$$

Ta biết rằng trong cơ học cổ điển xung lượng của hạt là $\frac{\partial S}{\partial x}$.

Hàm $H = \frac{\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2}{2m} + U(x)$ gọi là hàm Haminton của hạt và phương trình.

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H = 0$$

gọi là phương trình Haminton – Jacôbi.

c) Trong gần đúng bậc nhất đối với $\hbar$ của phương trình Srôđingơ ta tìm được :

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2}{2m} + U(x) = 0$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left\{ A \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial A}{\partial x} \cdot \frac{\partial S}{\partial x} \right\} = 0$$

Nhân hai vế của phương trình thứ hai với $2A$ ta có :

$$\frac{\partial(A^2)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(A^2 \frac{\partial S}{\partial x} \right) = 0$$

Ta biết $\rho(x) = |\psi(x)|^2 = A^2$ là mật độ xác suất tìm thấy hạt ở vị

trí x , $v = \frac{\partial S}{\partial x}$ là vận tốc của hạt trong cơ học cổ điển. Phương trình

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v) = 0$$

là phương trình liên tục trong cơ học cổ điển. Đối với trạng thái dừng ta có :

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H = -E = \text{const}, \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

hay

$$\frac{\partial S}{\partial x} = \pm \sqrt{2m[E - U(x)]} = \pm p(x)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(A^2 \frac{p}{m} \right) = 0 \text{ với } p = \sqrt{2m[E - U(x)]}$$

Từ các phương trình này ta có :

$$S = -Et \pm \int p(x) dx$$

$$A = \frac{\text{const}}{\sqrt{p}}$$

Hàm sóng $\psi(x, t)$ của hạt có dạng :

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

$$\psi(x) = \frac{B}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x) dx} + \frac{C}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x) dx}$$

hay

$$\psi(x) = \frac{B'}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x) dx} + \frac{C'}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x) dx}$$

Từ điều kiện $\psi(x_1) = 0$ suy ra $C = -B$ và từ điều kiện $\psi(x_2) = 0$ ta có $C' = -B'$. Khi đó ta có :

$$\psi(x) = \frac{a}{\sqrt{p}} \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x) dx \right\}$$

$$\psi(x) = \frac{b}{\sqrt{p}} \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x) dx \right\},$$

trong đó $a = 2Bi$, $b = 2B'i$. Trong miền $x_1 \leq x \leq x_2$ ta phải có đẳng thức sau :

$$\psi(x) = \frac{a}{\sqrt{p}} \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x) dx \right\} = \frac{b}{\sqrt{p}} \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x) dx \right\}$$

Ta biết

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x) dx + \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x) dx = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \alpha$$

hay

$$\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x) dx = \alpha - \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x) dx$$

Ta tìm giá trị có thể có của α để đẳng thức trên thoả mãn.

Ta có :

$$\begin{aligned} \alpha \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x) dx \right\} &= b \sin \left\{ \alpha - \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x) dx \right\} \\ &= b \sin \alpha \cdot \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x) dx \right\} - b \cos \alpha \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x) dx \right\} \end{aligned}$$

Đẳng thức này đúng với mọi giá trị của x trong miền $x_1 \leq x \leq x_2$ chỉ khi $b \sin \alpha = 0$ và $a = -b \cos \alpha$ hay $\alpha = n\pi$ và $a = (-1)^{n+1} b$ với n là những số nguyên ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$). Điều kiện lượng tử hoá được xác định bằng công thức :

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = n\pi\hbar$$

hay

$$\oint p(x) dx = \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx + \int_{x_2}^{x_1} p(-x) d(-x) = 2 \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = 2\pi n\hbar$$

Công thức này gọi là quy tắc lượng tử hoá Bo – Sommeccphen (Bohr – Somerfeld).

d) Chuyển từ Cơ học lượng tử về Cơ học cổ điển nếu những số hạng chứa $\hbar$ phải rất bé so với những số hạng không chứa $\hbar$, nghĩa là :

$$\left| \frac{A}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 \right| \gg \left| \hbar \frac{A}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right|$$

Chú ý rằng $|p| = \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right) = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\hbar}{\tilde{\lambda}}$ với $\tilde{\lambda} = \frac{\lambda}{2\pi}$ ta tìm được :

$$p^2 \gg \hbar \left| \frac{dp}{dx} \right| \text{ hay } \left| \frac{d\tilde{\lambda}}{dx} \right| \ll 1.$$

Đó là điều kiện áp dụng gần đúng giả cổ điển.

104. Ta có :

$$\begin{aligned} C(\vec{q}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int \phi(r) e^{-i\vec{q}\vec{r}} d\vec{r} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{ikr}}{r} e^{-iqr \cos \theta} r^2 \sin \theta d\theta dr d\phi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty r dr e^{ikr} \int_{-1}^1 e^{-iqr \cos \theta} d(\cos \theta) \\
&= \frac{i}{(2\pi)^2 q} \int_0^\infty e^{ikr} \left\{ e^{-iqr} - e^{iqr} \right\} dr \\
&= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{i}{(2\pi)^2 q} \left\{ \int_0^\infty e^{i(k-q)-\alpha} r dr - \int_0^\infty e^{i(k+q)-\alpha} r dr \right\},
\end{aligned}$$

trong đó α là thông số thực và dương. Thực hiện phép tính tích phân rồi cho $\alpha \rightarrow 0$ ta tìm được :

$$C(q) = \frac{2}{(2\pi)^2 (q^2 - k^2)}$$

Vậy ta có thể viết :

$$\phi(r) = \frac{e^{ikr}}{r} = \int \frac{2}{(2\pi)^2 (q^2 - k^2)} e^{iq\vec{r}} d\vec{q}.$$

105. Hàm $\varphi(\vec{r})$ được tìm dưới dạng :

$$\varphi(\vec{r}) = \int d\vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(\vec{r}')$$

Ta biết

$$\begin{aligned}
(\nabla^2 + k^2) \varphi(\vec{r}) &= \int d\vec{r}' (\nabla^2 + k^2) G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') = \\
&= \frac{2m}{\hbar^2} U(\vec{r}) \psi(\vec{r})
\end{aligned}$$

Chú ý rằng :

$$\frac{2m}{\hbar^2} \int d\vec{r}' \delta(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') = \frac{2m}{\hbar^2} U(\vec{r}) \psi(\vec{r})$$

ta có :

$$(\nabla^2 + k^2)G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{2m}{\hbar^2} \delta(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} d\vec{q}$$

$$\int e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} d\vec{q}$$

Đề dạng thấy rằng hàm $G(\vec{r} - \vec{r}')$ có dạng :

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')}}{q^2 - k^2} d\vec{q}$$

$$\text{Chú ý rằng : } \frac{e^{ikr}}{r} = \frac{2}{(2\pi)^2} \int \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}}}{q^2 - k^2} d\vec{q}$$

ta có :

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

$$\text{và} \quad \varphi(\vec{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\vec{r}'$$

Ta biết $U\psi = U(\psi^0 + \varphi)$. Nếu U bé thì ta bỏ qua số hạng bậc hai $U\varphi$. Khi đó ta có :

$$\varphi(\vec{r}) \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi_k^0(\vec{r}') d\vec{r}'$$

Gọi a là vùng tác dụng của trường. Khi $|\vec{r}| > a$ thì $U(\vec{r}') = 0$.

Xét khi $r \gg a$ nghĩa là xét trường hợp $|\vec{r}| \gg |\vec{r}'|$. Khi đó ta có :

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = \sqrt{(\vec{r} - \vec{r}')^2} = \sqrt{r^2 - 2\vec{r}\vec{r}' + r'^2} \approx r - \frac{\vec{r}\vec{r}'}{r}$$

$$\varphi(\vec{r}) \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^0(\vec{r}') d\vec{r}'$$

ở đây $\vec{k}' = k \frac{\vec{r}}{r}$. Hàm sóng $\psi(\vec{r})$ được viết dưới dạng :

$$\psi(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}^0(\vec{r}) = \frac{e^{ikr}}{r} f(\vec{k}, \vec{k}')$$

trong đó

$$f(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^0(\vec{r}') d\vec{r}'$$

là biên độ tán xạ và $\psi_{\vec{k}}^0(\vec{r}') = e^{i\vec{k}\vec{r}'}$ là hàm sóng hạt tự do.

106. Hàm sóng $e^{ikr\cos\theta}$ không phụ thuộc vào ϕ nên ta khai triển hàm $e^{ikr\cos\theta}$ theo $R_{kl}(r)P_l(\cos\theta)$

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l R_{kl}(r) P_l(\cos\theta)$$

Nhân cả hai vế cho $\sin\theta P_{l'}(\cos\theta)$ rồi tích phân theo θ ta có :

$$\begin{aligned} \int P_{l'}(\cos\theta) \sin\theta e^{ikr\cos\theta} d\theta &= \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} C_l R_{kl}(r) \int_0^{\pi} P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \sin\theta d\theta = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} C_l R_{kl}(r) \frac{2\delta_l}{2l+1} = \frac{2}{2l'+1} C_{l'} R_{kl'}(r). \end{aligned}$$

Đặt $x = \cos\theta$ ta có :

$$\frac{2}{2l'+1} C_{l'} R_{kl'}(r) = \int_{-1}^1 e^{ikrx} P_{l'}(x) dx$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{ikr} \int_{-1}^1 P_l(x) d(e^{ikrx}) = \frac{1}{ikr} [P_l(x)e^{ikrx}] \Big|_{-1}^1 - \frac{1}{ikr} \int_{-1}^1 e^{ikrx} \frac{dP_l}{dx} dx \\
&= \frac{1}{ikr} \{P_l(1)e^{ikr} - P_l(-1)e^{-ikr}\} - \frac{1}{(ikr)^2} \int_{-1}^1 \left(\frac{dP_l}{dx}\right) d(e^{ikrx})
\end{aligned}$$

Khi $r \rightarrow \infty$ thì các số hạng tỉ lệ với $\frac{1}{r^2}$, $\frac{1}{r^3}$, v.v... rất bé so với

số hạng tỉ lệ với $\frac{1}{r}$. Vì vậy khi $r \rightarrow \infty$ gần đúng ta có :

$$\frac{2}{2l+1} C_l R_{kl}(r) \approx \frac{1}{ikr} \{P_l(1)e^{ikr} - P_l(-1)e^{-ikr}\}.$$

Chú ý rằng :

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l ; l = 0, 1, 2, \dots$$

$$P_0(x) = 1, P_1(x) = x, P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1),$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) \text{ v.v...}$$

$$P_l(1) = 1, P_l(-1) = (-1)^l.$$

Vậy khi $r \rightarrow \infty$ ta có :

$$C_l R_{kl}(r) \approx \frac{2l+1}{2ikr} \{e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}\}.$$

Chú ý rằng

$$i^l (-i)^l = 1, (-1)^l = i^{2l}, i^l = e^{\frac{i\pi l}{2}}, (-i)^l = e^{-\frac{i\pi l}{2}} \text{ ta có :}$$

$$\begin{aligned}
C_l R_{kl}(r) &\approx \frac{2l+1}{2ikr} i^l \left\{ (-1)^l e^{ikr} - i^l e^{-ikr} \right\} \\
&= \frac{2l+1}{2ikr} e^{\frac{i\pi l}{2}} \left\{ e^{i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} \right\} \\
&= \frac{2l+1}{kr} e^{\frac{i\pi l}{2}} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)
\end{aligned}$$

Biết được $C_l R_{kl}(r)$ khi $r \rightarrow \infty$ ta tìm được :

$$e^{ikz} = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} e^{\frac{i\pi l}{2}} (2l+1) P_l(\cos\theta) \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)$$

107. Nghiệm tổng quát của phương trình Schrödinger của hạt

tán xạ có dạng : $\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l R_{kl}(r) P_l(\cos\theta)$

Khi $r \rightarrow \infty$ thì hàm bán kính $R_{kl}(r)$ có dạng đơn giản

$$\begin{aligned}
R_{kl}(r) &= \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right) \\
&= \frac{1}{2ikr} \left\{ e^{i\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)} \right\}
\end{aligned}$$

trong đó δ_l là dịch chuyển pha (đối với hạt tự do $\delta_l = 0$). Nghiệm tiệm cận $\psi(r, \theta)$ khi $r \rightarrow \infty$ có dạng :

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l P_l(\cos\theta) \frac{1}{2ikr} \left\{ e^{i\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)} \right\}$$

Mặt khác nghiệm này được viết dưới dạng :

$$\psi(r, \theta) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

Khai triển $f(\theta)$ theo $P_l(\cos\theta)$:

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} D_l P_l(\cos\theta)$$

và chú ý rằng :

$$e^{ikz} = \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\theta) \left\{ e^{i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} \right\} (2l+1) e^{\frac{i\pi l}{2}}$$

ta có :

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta) &= \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\theta) \\ &\left\{ (2l+1) e^{\frac{i\pi l}{2}} \left[e^{i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} \right] + 2ki D_l e^{ikr} \right\} = \\ &= \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} C_l P_l(\cos\theta) \left\{ e^{i\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)} \right\} \end{aligned}$$

So sánh các hệ số của e^{ikr} và e^{-ikr} ở hai vế ta tìm được :

$$C_l e^{-i\left(\delta_l - \frac{\pi l}{2}\right)} = (2l+1) e^{\frac{i\pi l}{2} + i\frac{\pi l}{2}}$$

$$C_l e^{-i\frac{\pi l}{2} + i\delta_l} = (2l+1) + 2ikD_l$$

Từ đây suy ra

$$D_l = \frac{2l+1}{2ik}(e^{2i\delta_l} - 1),$$

Vậy

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2ik}(e^{2i\delta_l} - 1)P_l(\cos(\theta))$$

trong đó :

$$f_l(\theta) = \frac{2l+1}{2ik}(e^{2i\delta_l} - 1)P_l(\cos \theta)$$

là biên độ tán xạ riêng phần.

108. a) Tiết diện tán xạ toàn phần :

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega, \quad d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$$

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{1}{4k^2} \int \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)P_l(\cos(\theta)) \right|^2 d\Omega \\ &= \frac{2\pi}{4k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} \left\{ (2l+1)(2l'+1)(e^{2i\delta_l} - 1)(e^{-2i\delta_{l'}} - 1) \times \right. \\ &\quad \left. \times \int_0^{\pi} P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta)\sin\theta d\theta \right\} \end{aligned}$$

Từ điều kiện trực giao và chuẩn hoá của các đa thức $P_l(\cos\theta)$:

$$\int_0^{\pi} P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta)\sin\theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

ta có :

$$\sigma = \frac{4\pi}{4k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)(e^{-2i\delta_l} - 1)$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \sum_l \sigma_l$$

trong đó

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

b) Khi $\theta = 0$ ta có :

$$f_l(0) = \frac{2l+1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(1).$$

Chú ý rằng $P_l(1) = 1$ và $e^{2i\delta_l} - 1 = 2ie^{i\delta_l} \sin \delta_l$ ta có :

$$f_l(0) = \frac{2l+1}{k} \sin \delta_l \cos \delta_l + i \frac{(2l+1)}{k} \sin^2 \delta_l,$$

Phần ảo của $f_l(0)$ là :

$$I_m f_l(0) = \frac{2l+1}{k} \sin^2 \delta_l. \text{ Vậy ta có :}$$

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k} I_m f_l(0).$$

109. a) Kí hiệu $\vec{v}_i$ và $\vec{v}'_i$ ($i = 1, 2$) là vận tốc của hạt i trước và sau va chạm đối với hệ phòng thí nghiệm, $\vec{u}_i$ và $\vec{u}'_i$ ($i = 1, 2$) là vận tốc của hạt i trước và sau va chạm đối với hệ khối tâm, $\vec{v}_C$ là vận tốc khối tâm C của hệ hai hạt đối với hệ phòng thí nghiệm (h. 3.14). Từ định luật bảo toàn xung lượng của hệ hai hạt và định lí cộng vận tốc ta có :

$$\vec{v}_c = \frac{m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_1 \vec{v}'_1 + m_2 \vec{v}'_2}{m_1 + m_2} = \text{const}$$

$$\vec{v}_i = \vec{v}_c + \vec{u}_i, \quad \vec{v}'_i = \vec{v}_c + \vec{u}'_i \quad (i = 1, 2).$$

Vì $\vec{v}_2 = 0$ nên ta có :

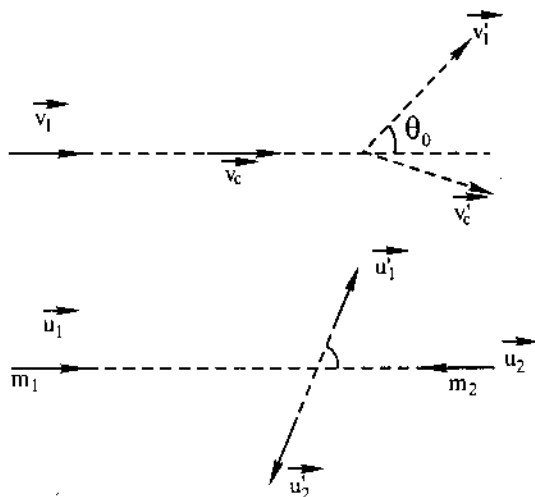
$$\vec{v}_c = \frac{m_1 \vec{v}_1}{m_1 + m_2}, \quad \vec{u}_1 = \vec{v}_1 - \vec{v}_c = \frac{m_2 \vec{v}'_1}{m_1 + m_2},$$

$$\vec{u}_2 = \vec{v}_2 - \vec{v}_c = -\frac{m_1 \vec{v}_1}{m_1 + m_2}$$

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_c + \vec{u}'_1 = \frac{m_1 \vec{v}_1}{m_1 + m_2} + \vec{u}'_1 \dots (1)$$

Các vectơ $\vec{v}_c, \vec{v}_1$ và $\vec{u}_1$ cùng chiều. Trong hệ khối tâm ta có :

$$m_1 \vec{u}_1 + m_2 \vec{u}_2 = m_1 \vec{u}'_1 + m_2 \vec{u}'_2 = 0$$



Hình 3.14

Chiếu phương trình (1) lên phương $\vec{v}_c$ và lên phương vuông góc với $\vec{v}_c$, ta được :

$$v'_1 \cos \theta_o = \frac{m_1}{m_1 + m_2} v_1 + u'_1 \cos \theta$$

$$v'_1 \sin \theta_o = 0 + u'_1 \sin \theta$$

Từ hai đẳng thức này suy ra :

$$\operatorname{tg} \theta_o = \frac{\sin \theta}{\frac{m_1}{m_1 + m_2} \left(\frac{v_1}{u'_1} \right) + \cos \theta}$$

Đối với tán xạ đàn tính thì $|u'_1| = |u_1|$ và ta có :

$$\frac{v_1}{u'_1} = \frac{v_1}{u_1} = \frac{m_1 + m_2}{m_2}$$

Biết được $\frac{v_1}{u'_1}$ ta tìm được

$$\operatorname{tg} \theta_o = \frac{\sin \theta}{\gamma + \cos \theta}, \gamma = \frac{m_1}{m_2}$$

b) Gọi N là mật độ dòng hạt tới (số hạt tới trong một đơn vị thời gian đi qua một đơn vị diện tích đặt vuông góc với dòng tới), dN là số hạt tán xạ trong góc khối $d\Omega_o$ đối với hệ phòng thí nghiệm và trong góc khối $d\Omega$ đối với hệ khối tâm, ta có :

$$d\sigma = \frac{dN}{N} = \sigma_o(\theta_o, \varphi_o) d\Omega_o = \sigma(\theta, \varphi) d\Omega$$

Ta biết $d\Omega_o = \sin \theta_o d\theta_o d\varphi_o$ và $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$

Nếu chọn $\varphi_o = \varphi$ thì ta được :

$$\sigma_o(\theta_o) = \frac{\sin \theta d\theta}{\sin \theta_o d\theta_o} \sigma(\theta)$$

Chú ý rằng

$$d(\operatorname{tg} \theta_o) = \frac{1}{\cos^2 \theta_o} d\theta_o = d\left(\frac{\sin \theta}{\gamma + \cos \theta}\right) = \frac{1 + \gamma \cos \theta}{(\gamma + \cos \theta)^2} d\theta$$

$$\cos \theta_o = \frac{1}{(1 + \operatorname{tg}^2 \theta_o)^{1/2}} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\sin \theta}{\gamma + \cos \theta}\right)^2}} =$$

$$= \frac{\gamma + \cos \theta}{\sqrt{\gamma^2 + 2\gamma \cos \theta + 1}}$$

$$\frac{d\theta}{d\theta_o} = \frac{\gamma^2 + 2\gamma \cos \theta + 1}{1 + \gamma \cos \theta}$$

$$\frac{\sin \theta_o}{\sin \theta} = \frac{\cos \theta_o}{\gamma + \cos \theta} = \frac{1}{\sqrt{\gamma^2 + 2\gamma \cos \theta + 1}}$$

ta có :

$$\sigma_o(\theta) = \frac{(1 + 2\gamma \cos \theta + \gamma^2)}{1 + \gamma \cos \theta} \sigma(\theta).$$

110. a) Biên độ tán xạ $f(\theta, \varphi)$ có dạng :

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar} \int e^{i\vec{q}\vec{r}'} U(\vec{r}') d\vec{r}',$$

trong đó $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$. Thay biến $\vec{r}' \rightarrow \vec{r}$ ta có :

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar} \int e^{i\vec{q}\vec{r}} U(\vec{r}) d\vec{r}; \quad d\vec{r} = dx dy dz$$

Khi $U(\vec{r}) = U_o \delta(\vec{r})$ ta được :

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar} U_0$$

Ta biết rằng

$$d\sigma = |f|^2 d\Omega \text{ và } \sigma = \int d\sigma = \int |f|^2 d\Omega \text{ nên ta có :}$$

$$d\sigma = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} U_0 \right)^2 d\Omega, \quad \sigma = \left(\frac{mU_0}{2\pi\hbar^2} \right)^2 4\pi = \frac{m^2 U_0^2}{\pi\hbar^2}$$

b) Trong trường hợp thế năng U có dạng đối xứng cầu $U = U(r)$ thì ta có :

$$d\vec{r} \equiv dV = r^2 \sin\theta' d\theta' d\varphi dr, \quad \vec{q}\vec{r} = qr \cos\theta'$$

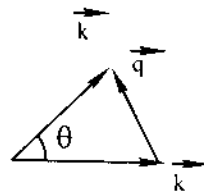
$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^2 U(r) dr \int_0^\pi e^{iqr \cos\theta'} \sin\theta' d\theta' \\ &= +\frac{m}{2\pi\hbar^2} 2\pi \int_0^\infty r^2 U(r) dr \int_{-1}^1 e^{iqr \cos\theta'} d(\cos\theta') \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty r U(r) \sin(qr) dr \end{aligned}$$

Gọi θ là góc tán xạ (góc tạo thành giữa $\vec{k}'$ và $\vec{k}$) (h.3.15). Trong tán xạ đàn tính thì $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$ và ta có :

$$q = 2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right).$$

Khi thế năng U có dạng đơn giản :

$$U = \begin{cases} -U_0 & \text{khi } 0 \leq r \leq R \\ 0 & \text{khi } r > R. \end{cases}$$



Hình 3.15

ta được :

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{2mU_o}{\hbar^2 q} \int_0^R r \sin(qr) dr \\ &= -\frac{2mU_o}{\hbar^2 q^2} \int_0^R r d(\cos qr) \\ &= \frac{2mU_o}{\hbar^2 q^3} \{ \sin qR - qR \cos qR \} \end{aligned}$$

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega = \left(\frac{2mU_o}{\hbar^2 q^3} \right)^2 \{ \sin qR - qR \cos qR \}^2 d\Omega,$$

trong đó $q = 2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$ và $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$

Tiết diện tán xạ của hạt :

$$\sigma = \int d\sigma = \left(\frac{2mU_o R^3}{\hbar^2} \right)^2 \int \left\{ \frac{\sin qR - qR \cos qR}{(qR)^3} \right\}^2 d\Omega$$

Chú ý rằng :

$$\sin\theta d\theta = 2 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) d\theta = \frac{q dq}{k^2}$$

và đặt $X = qR$ ta có :

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2} \left(\frac{2mU_o R^2}{\hbar^2} \right)^2 \int_0^{2kR} \frac{(\sin X - X \cos X)^2}{X^5} dX$$

Để tính σ ta xét tích phân I sau :

$$I = \int_a^b \frac{(\sin X - X \cos X)^2}{X^5} dX.$$

dễ thấy rằng :

$$\int_0^{2kR} \frac{(\sin X - X \cos X)^2}{X^5} dX = \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ b \rightarrow 2kR}} I$$

Dùng hệ thức :

$$(\sin X - X \cos X)^2 = \frac{1}{2}(1 - \cos 2X) + \frac{X^2}{2}(1 + \cos 2X) - X \sin 2X$$

và chú ý rằng

$$\int \frac{\cos(\alpha X)}{X^n} dX = -\frac{\cos(\alpha X)}{(n-1)X^{n-1}} - \frac{\alpha}{n-1} \int \frac{\sin(\alpha X)}{X^{n-1}} dX$$

$$\int \frac{\sin(\alpha X)}{X^n} dX = -\frac{\sin(\alpha X)}{(n-1)X^{n-1}} + \frac{\alpha}{n-1} \int \frac{\cos(\alpha X)}{X^{n-1}} dX,$$

ta có :

$$\begin{aligned} I = \frac{1}{2} & \left\{ \int_a^b \frac{dx}{x^5} + \int_a^b \frac{dx}{x^3} - \int_a^b \frac{\cos(2x)}{x^5} dx + \int_a^b \frac{\cos(2x)dx}{x^3} - 2 \int_a^b \frac{\sin(2x)}{x^4} dx \right\} \\ \int_a^b \frac{\cos(2x)}{x^5} dx &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2} \frac{\cos 2a}{a^4} - \frac{1}{2} \frac{\cos(2b)}{b^4} + \right. \\ & \quad \left. + \frac{1}{3} \frac{\sin 2b}{b^3} - \frac{1}{3} \frac{\sin 2a}{a^3} - \frac{2}{3} \int_a^b \frac{\cos(2x)}{x^3} dx \right\} \\ \int_a^b \frac{\sin(2x)}{x^4} dx &= \frac{1}{3} \frac{\sin 2a}{a^3} - \frac{1}{3} \frac{\sin 2b}{b^3} + \frac{2}{3} \int_a^b \frac{\cos(2x)dx}{x^3} \end{aligned}$$

Trong tích phân I các số hạng chứa tích phân $\int_a^b \frac{\cos(2x)}{x^3} dx$ triệt

tiêu lẫn nhau và cuối cùng ta có :

$$I = \frac{1}{4} \left\{ \frac{\sin 2b}{b^3} - \frac{\sin^2 b}{b^4} - \frac{1}{b^2} \right\} + K,$$

trong đó

$$K = \frac{1}{8a^4} - \frac{\cos 2a}{8a^4} + \frac{1}{4a^2} - \frac{\sin 2a}{4a^3}$$

Khi $a \rightarrow 0$ thì ta có :

$$\cos 2a = 1 - \frac{(2a)^2}{2!} + \frac{(2a)^4}{4!} - \frac{(2a)^6}{6!} + \dots$$

$$\sin 2a = 2a - \frac{(2a)^3}{3!} + \frac{(2a)^5}{5!} - \dots$$

$$\lim_{a \rightarrow 0} K = \frac{1}{4}$$

$$\lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ b \rightarrow 2kR}} I = \frac{1}{4} \left\{ 1 - \frac{1}{(2kR)^2} + \frac{\sin(4kR)}{(2kR)^3} - \frac{\sin^2(2kR)}{(2kR)^4} \right\}$$

Tiết diện tán xạ σ của hạt sẽ là :

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2} \left(\frac{mU_0 R^2}{\hbar^2} \right)^2 \left\{ 1 - \frac{1}{(2kR)^2} + \frac{\sin(4kR)}{(2kR)^3} - \frac{\sin^2(2kR)}{(2kR)^4} \right\}$$

c) Khi $U = -U_0 e^{-\frac{r}{r_0}}$ ta có :

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty r U(r) \sin(qr) dr \\ &= \frac{2mU_0}{\hbar^2 q} \int_0^\infty e^{-\frac{r}{r_0}} r \sin(qr) dr \end{aligned}$$

Đặt $x = \frac{r}{r_0}$ và $\alpha = qr_0$ ta được :

$$f(\theta) = \frac{2mU_0}{\hbar^2 q} r_0^2 \int_0^\infty e^{-x} x \sin(\alpha x) dx$$

Chú ý rằng

$$\sin \alpha x = \frac{1}{2i} (e^{i\alpha x} - e^{-i\alpha x})$$

$$\int_0^\infty x e^{(i\alpha-1)x} dx = \frac{1}{(i\alpha-1)} \int_0^\infty x d[e^{(i\alpha-1)x}] = \frac{1}{(i\alpha-1)^2}$$

$$\int_0^\infty x e^{-(i\alpha+1)x} dx = \frac{1}{-(i\alpha+1)} \int_0^\infty x d[e^{-(i\alpha+1)x}] = \frac{1}{(i\alpha+1)^2}$$

ta có

$$\int_0^\infty x e^{-x} \sin(\alpha x) dx = \frac{2\alpha}{(1+\alpha^2)^2} = \frac{2qr_0}{(1+q^2 r_0^2)^2}$$

$$f(\theta) = \frac{4mU_0 r_0^3}{\hbar^2 (1+q^2 r_0^2)^2}, \quad q = 2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right).$$

Tiết diện tán xạ của hạt :

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin\theta d\theta.$$

Đặt $y = 1 + q^2 r_0^2$ và chú ý rằng :

$$\sin\theta d\theta = 2 \sin\frac{\theta}{2} \cos\frac{\theta}{2} d\theta = \frac{q dq}{k^2}$$

$$dy = 2r_0^2 q dq$$

Ta tìm được :

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2 r_0^2} \left(\frac{4mU_0 r_0^3}{\hbar^2} \right)^2 \int_1^{1+4k^2 r_0^2} y^{-4} dy$$

$$\sigma = \frac{16\pi m^2 U_0^2}{3k^2 \hbar^4} r_0^4 \left(1 - \frac{1}{1+4k^2 r_0^2} \right)$$

d) Khi $U(r) = \frac{A}{r} e^{-\lambda r}$ ta có :

$$f(\theta) = -\frac{2mA}{\hbar^2 q} \int_0^\infty e^{-\lambda r} \sin(qr) dr$$

Thay $\sin(qr) = \frac{1}{2i} \{e^{iqr} - e^{-iqr}\}$ và thực hiện phép tính tích phân ta nhận được :

$$f(\theta) = -\frac{2mA}{\hbar^2} \frac{1}{\lambda^2 + q^2}$$

Tiết diện tán xạ của hạt :

$$\begin{aligned} \sigma &= \int |f(\theta)|^2 d\Omega = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin\theta d\theta \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \int_0^{2k} |f(q)|^2 q dq = \frac{2\pi}{k^2} \left(\frac{2mA}{\hbar^2} \right)^2 \int_0^{2k} \frac{q dq}{(\lambda^2 + q^2)^2} \\ &= \frac{\pi}{k^2} \left(\frac{2mA}{\hbar^2} \right)^2 \int_{\lambda^2}^{\lambda^2 + 4k^2} \frac{dy}{y^2} = \frac{4\pi m^2 A^2}{k^2 \hbar^4} \left\{ \frac{1}{\lambda^2} - \frac{1}{\lambda^2 + 4k^2} \right\} \\ \sigma &= \frac{16\pi m^2 A^2}{\hbar^4 (\lambda^2 + 4k^2) \lambda^2} \end{aligned}$$

Đối với trường Culông $U(r) = \frac{Ze^2}{r}$ thì ta đặt $A = Ze^2$ và $\lambda = 0$.

Khi đó ta có :

$$f(\theta) = -\frac{2mZe^2}{\hbar^2 q^2}$$

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega = \left(\frac{2mZe^2}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{q^4} d\Omega$$

$$d\sigma = \frac{m^2 Z^2 e^4}{4\hbar^4 k^4 \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} d\Omega$$

Đó là công thức Rôzephô.

c) Trường hợp $U(r) = U_0 e^{-\frac{r^2}{a^2}}$ ta có :

$$f(\theta) = -\frac{2mU_0}{\hbar^2 q} \int_0^\infty r e^{-\frac{r^2}{a^2}} \sin(qr) dr$$

Xét tích phân I

$$I = \int_0^\infty r e^{-\frac{r^2}{a^2}} \sin(qr) dr$$

$$I = -\frac{1}{2} a^2 \int_0^\infty \sin(qr) d\left(e^{-\frac{r^2}{a^2}}\right)$$

$$= -\frac{a^2}{2} \left\{ e^{-\frac{r^2}{a^2}} \sin(qr) \right\}_0^\infty - \int_0^\infty e^{-\frac{r^2}{a^2}} d(\sin qr)$$

$$= \frac{2\pi^2}{k^2 a^2} \left\{ \frac{ma^3 U_0}{2\hbar^2} \right\}^2 \int_0^{2a^2 k^2} e^y dy$$

$$\sigma = 2 \left(\frac{\pi U_0 m a^2}{2k\hbar^2} \right)^2 \{1 - e^{-2a^2 k^2}\}.$$

111. Thế năng tương tác của điện tích e_1 với nguyên tử có dạng :

$$U(r) = \frac{Zee_1}{r} - ee_1 \int \frac{\rho(\vec{r}') d\vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}.$$

trong đó $d\vec{r}' = dx'dy'dz'$.

Biên độ tán xạ $f(\theta, \psi)$ sẽ là :

$$f(\theta, \psi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\vec{q}\vec{r}} U(\vec{r}) d\vec{r}$$

$$= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} Ze_1 e I_1 + \frac{me_1 e}{2\pi\hbar^2} I_2$$

trong đó

$$I_1 = \int \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}}}{r} d\vec{r}$$

$$I_2 = \int e^{i\vec{q}\vec{r}} d\vec{r} \int \frac{\rho(\vec{r}') d\vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

Ta tính I_1 và I_2 sau đó xác định $f(\theta, \psi)$

$$I_1 = \int \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}}}{r} d\vec{r} = \int \frac{e^{iqr\cos\theta}}{r} r^2 \sin\theta d\theta d\phi dr$$

$$= -2\pi \int_0^\infty r dr \int_{-1}^1 e^{iqr\cos\theta} d(\cos\theta)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{2\pi}{iq} \int_0^{\infty} \{e^{iqr} - e^{-iqr}\} dr \\
&= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{2\pi}{iq} \int_0^{\infty} e^{-\alpha r} (e^{iqr} - e^{-iqr}) dr, \alpha > 0 \\
&= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{2\pi}{iq} \left(-\frac{1}{iq - \alpha} - \frac{1}{iq + \alpha} \right) = \frac{4\pi}{q^2}
\end{aligned}$$

$$I_2 = \int d\vec{r}' \rho(\vec{r}') \int \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}$$

Đặt $\vec{R} = \vec{r} - \vec{r}' \rightarrow \vec{r} = \vec{R} + \vec{r}'$. Khi tính tích phân theo $\vec{r}$ thì ta coi $\vec{r}'$ là cố định. Vì vậy $d\vec{r} = d\vec{R}$. Khi đó ta có

$$\begin{aligned}
I_2 &= \int d\vec{r}' \rho(\vec{r}') \int \frac{e^{i\vec{q}\vec{R}} e^{i\vec{q}\vec{r}'}}{|\vec{R}|} d\vec{R} = \\
&= \int d\vec{r}' \rho(\vec{r}') e^{i\vec{q}\vec{r}'} \int \frac{e^{i\vec{q}\vec{R}}}{|\vec{R}|} d\vec{R}.
\end{aligned}$$

Ta biết rằng :

$$\int \frac{e^{i\vec{q}\vec{R}}}{|\vec{R}|} d\vec{R} = \frac{4\pi}{q^2}$$

và nếu thay biến $\vec{r}'$ bằng $\vec{r}$ thì ta có : $I_2 = \frac{4\pi}{q^2} F(\theta)$

trong đó $F(\theta) = \int \rho(\vec{r}) e^{i\vec{q}\vec{r}} d\vec{r}$

Nếu ρ có phân bố đối xứng cầu $\rho(\vec{r}) = \rho(r)$ thì hàm $F(\theta)$ có dạng :

$$F(\theta) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} dr r^2 \rho(r) \int_0^{\pi} e^{iqr \cos \theta} \sin \theta d\theta = \frac{4\pi}{q} \int_0^{\infty} r \rho(r) \sin(qr) dr$$

Khi hàm ρ có dạng $\rho(r) = \rho_0 e^{-\frac{r}{a}}$ thì ta có :

$$F(\theta) = \frac{4\pi\rho_0}{q} \int_0^{\infty} r e^{-\frac{r}{a}} \sin(qr) dr$$

Đặt $x = \frac{r}{a}$, $\alpha = qa$ và chú ý rằng :

$$\int_0^{\infty} x e^{-x} \sin(\alpha x) dx = \frac{2\alpha}{(1+\alpha^2)^2},$$

ta tìm được :

$$F(\theta) = \frac{8\pi a^3 \rho_0}{(1+a^2 q^2)^2}$$

Dùng tính chất trung hoà về điện của nguyên tử :

$$\int \rho(r) dV = \int \rho(r) \cdot 4\pi r^2 dr = 8\pi a^3 \rho_0 = Z$$

ta có :

$$F(\theta) = \frac{Z}{(1+a^2 q^2)^2}$$

Biên độ tán xạ $f(\theta)$ có dạng :

$$f(\theta) = -\frac{2me_1 e Z}{\hbar^2 q^2} \left[1 - \frac{1}{(1+a^2 q^2)^2} \right]$$

Tiết diện tán xạ vi phân dσ :

$$d\sigma = \frac{4m^2 e_1^2 e^2 Z^2}{\hbar^2 q^4} \left[1 - \frac{1}{(1+a^2 q^2)^2} \right]^2 d\Omega,$$

trong đó $q = 2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$, $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$.

Phần IV

VẬT LÝ THỐNG KÊ

A- ĐỀ BÀI

§1. KHÔNG GIAN PHA – ĐỊNH LÝ LIUVIN (Liouville)

1. Vẽ quỹ đạo pha đối với một hạt có khối lượng m , chuyển động theo quán tính với vận tốc v_0 .
2. Vẽ quỹ đạo pha của một dao động tử điều hoà một chiều.
3. Vẽ quỹ đạo pha đối với dao động tử lượng tử, nghiệm đúng giả thiết lượng tử của Bo ($\int p dq = nh$)
4. Vẽ quỹ đạo pha của một hạt chuyển động với vận tốc không đổi giữa hai vách của một ngăn. Kích thước của ngăn dọc theo hướng chuyển động bằng $2a$.
5. Xác định quỹ đạo pha của một hạt khối lượng m và có điện tích $-e$ chuyển động dưới tác dụng của lực hút từ một hạt cố định có điện tích $+e_1$. Vị trí ban đầu là r_0 , vận tốc ban đầu là $v_0 = 0$.

6. Vẽ quỹ đạo pha của chuyển động một chiều của các chất điểm trong trường trọng lực có gia tốc $g = \text{const}$ và kiểm nghiệm lại định lí Liuvin.

7. Hãy kiểm nghiệm lại định lí Liuvin với các chất điểm chuyển động theo quán tính.

8. Nghiệm lại định lí Liuvin đối với chuyển động của 3 hạt trong trường trọng lực không đổi. Trạng thái ban đầu của chúng được cho bởi các điểm pha

$$A(p_0, z_0); B(p_0, z_0 + a); C(p_0 + b, z_0)$$

9. Nghiệm lại định lí Liuvin đối với trường hợp va chạm đàn hồi của hai hạt chuyển động theo đường thẳng.

10. Nghiệm lại định lí Liuvin đối với 3 dao động tử điều hoà tuyến tính sau :

$$x_1 = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m\omega^2}} \cos \omega t; x_2 = \sqrt{\frac{2(\varepsilon + \Delta\varepsilon)}{m\omega^2}} \cos \omega t$$

$$x_3 = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m\omega^2}} \cos(\omega t + \delta)$$

$$p_1 = -\sqrt{2m\varepsilon} \sin \omega t; p_2 = -\sqrt{2m(\varepsilon + \Delta\varepsilon)} \sin \omega t$$

$$p_3 = -\sqrt{2m\varepsilon} \sin(\omega t + \delta),$$

trong đó m, ε, ω là khối lượng, năng lượng, tần số riêng $\Delta\varepsilon$ và δ là các hằng số.

11. Xác định quỹ đạo pha của hạt tự do khi có lực ma sát tỉ lệ với vận tốc và tìm sự biến thiên theo thời gian của thế tích pha.

12. Xác định sự biến thiên quỹ đạo pha của một dao động tử điều hoà tuyến tính khi có lực ma sát nhỏ tác dụng.

13. Hãy tìm biểu thức của thể tích không gian pha của một phân tử khí lí tưởng đơn nguyên tử phụ thuộc vào năng lượng của phân tử.

14. Hãy chứng minh rằng thể tích của không gian pha Γ của khí lí tưởng đơn nguyên tử gồm N hạt chứa trong thể tích V bằng :

$$\Gamma = \text{const } V^N (2m)^{3N/2} E^{3N/2}$$

trong đó m là khối lượng của một hạt và E là năng lượng của hệ N hạt.

15. Tính thể tích pha Γ đối với

a) Dao động tử điều hoà

b) Hạt chuyển động tương đối tính trong thể tích V có năng lượng liên hệ với xung lượng bằng hệ thức

$$E = c \sqrt{p^2 + m^2 c^2}$$

16. Tìm thể tích pha đối với hạt khi chuyển động trong thể tích V có năng lượng liên hệ với xung lượng bằng hệ thức $\varepsilon = Cp$, với C là hằng số.

17. a) Tìm số trạng thái có năng lượng đã cho trong bài 16.

b) Hệ gồm N dao động tử cổ điển độc lập có tần số là ω . Hãy áp dụng phép gần đúng cổ điển để tính số trạng thái của hệ ! Tìm hệ thức giữa năng lượng và nhiệt độ của hệ nếu sử dụng kết quả vừa nhận được.

§2. CÁC HÀM PHÂN BỐ CỔ ĐIỂN

18. Một hệ có thể ở trong N trạng thái với những xác suất bằng nhau. Tính xác suất để hệ ở một trạng thái xác định nào đó.

19. Hãy tìm hàm phân bố theo góc đối với một điểm quay đều trên đường tròn.

20. Hãy chứng minh rằng xác suất $dW(x)$ tìm thấy điểm dao động điều hoà trong khoảng xác định dx trên đường dao động giữa hai trị biên $+a$ và $-a$ có dạng

$$dW(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{a^2 - x^2}} dx$$

21. Cho hệ bao gồm từ N hạt như nhau độc lập thống kê. Giả sử xác suất để một trong các hạt rơi vào trạng thái p là P . Xác định xác suất để cho n hạt rơi vào trạng thái này.

22. Trong bài 21, ta coi rằng $N \gg n$. Xét hai trường hợp
a) $N \rightarrow \infty$; b) $n \rightarrow N$.

23. Tính $\bar{x}$, $\overline{x^2}$ và $\overline{\Delta x^2}$ trong phân bố Gaoxơ (Gauss) chuẩn hoá
$$\omega(x) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-ax^2}.$$

24. Trong thể tích V có N hạt khí lí tưởng tuân theo phân bố vi chính tắc với năng lượng E . Tính thể tích pha, entropi S và nhiệt độ T đối với hệ đã cho, tìm phương trình trạng thái.

25. Viết phân bố Gipxơ (Gibbs) theo năng lượng đối với dao động tử điều hoà tuyến tính cổ điển và tính giá trị trung bình năng lượng của nó.

26. Khí lí tưởng bao gồm N hạt ở trong hệ điều nhiệt có nhiệt độ T . Tìm xác suất để cho khí có giá trị năng lượng E trong khoảng $E, E + dE$.

27. Tìm biểu thức của entropi qua tích phân trạng thái.

28. Biểu diễn nhiệt dung của hệ qua tích phân trạng thái.

29. Tìm biểu thức của thế nhiệt động Gipxơ qua tích phân trạng thái.

30. Tìm biểu thức của Entanpi qua tích phân trạng thái.

31. Cho một hệ khí lí tưởng bao gồm N phân tử đơn nguyên tử. Giả sử rằng ở nhiệt độ T hệ được mô tả bằng phân bố chính tắc. Tìm giá trị có xác suất lớn nhất của năng lượng toàn phần E của hệ và chứng tỏ rằng biểu thức nhận được trùng với trung bình theo phân bố chính tắc.

32. Từ phân bố chính tắc Gipsơ hãy suy ra phân bố Macxoen – Bônxoman (Maxwell – Boltzmann) đối với hệ bất kì đặt trong trường lực.

33. Thiết lập phân bố theo các thành phần vận tốc đối với một hạt khí lí tưởng.

34. Viết biểu thức của *số phân tử* có độ lớn vận tốc nằm trong khoảng từ v , $v + dv$.

35. Tìm giá trị trung bình, giá trị toàn phương trung bình, giá trị có xác suất cực đại của vận tốc khí lí tưởng.

36. Tính số hạt N của khí lí tưởng có vận tốc nằm trong khoảng $0 \leq v \leq v_{xs}$.

37. Sử dụng phân bố chính tắc Gipsơ suy ra phân bố Macxoen – Bônxoman theo năng lượng của các phân tử khí lí tưởng.

38. Tính số phân tử khí có động năng của chuyển động tịnh tiến lớn hơn động năng trung bình.

39. Tìm số phân tử có giá trị đã cho của thành phần vận tốc dọc theo một trục nào đó $v_{//}$ và thành phần vuông góc với trục đó là $v_{\perp}$.

40. Tính năng lượng xác định lớn nhất ϵ_{xs} của các phân tử khí lí tưởng. Chứng minh rằng $\epsilon_{xs} \neq \frac{1}{2} m v_{xs}^2$.

41. Trong một bình lớn có thể tích V chứa N hạt khí lí tưởng ở nhiệt độ T . Tìm phân bố góc của hạt bay ra môi trường ngoài là chân

không trong một đơn vị thời gian qua một lỗ hổng nhỏ ở thành bình. Diện tích lỗ hổng là S .

42. So sánh số phân tử oxy (O_2) ở $27^\circ C$ có hình chiếu vận tốc v_x từ 500 m/s đến 501 m/s và có môđun vận tốc từ 500 m/s đến 501 m/s.

43. Tìm số phân tử khí va chạm vào 1 cm^2 thành bình trong một đơn vị thời gian và có vận tốc giữa v và $v + dv$.

44. Chứng minh rằng số va chạm của phân tử vào 1 cm^2 thành bình sau 1s có thể được viết dưới dạng $r = \frac{n\bar{v}}{4}$ trong đó $\bar{v}$ là vận tốc trung bình của phân tử, n là số phân tử.

45. Hãy tìm xem có bao nhiêu phân tử hydro ở nhiệt độ $300^\circ K$ có vận tốc nằm trong khoảng 1800 m/s đến 1810 m/s.

46. Tính phân phân tử nitơ ở nhiệt độ $273^\circ K$ có vận tốc trong khoảng 250 m/s đến 255 m/s.

47. Ở độ cao nào ở $0^\circ C$, áp suất không khí giảm đi 3 lần?

48. Tìm độ cao trung bình của cột không khí ở trên mặt đất (ở $0^\circ C$).

49. Tính thế năng trung bình của các phân tử khí lí tưởng ở trong bình trụ cao h (ở $0^\circ C$).

50. So sánh số toàn phần các phân tử khí ở trên mặt đất trong cột không khí có đáy 1 cm^3 với số phân tử trong cột cao 1000m, 10000m và 80000m (ở $0^\circ C$).

51. Tìm trọng lượng của cột không khí, xác định áp suất trên mặt đất.

52. Viết phân bố Macxoen – Bônxơman đối với khí lí tưởng bao quanh một khối hấp dẫn có bán kính R . Hãy xét xem việc áp dụng

phân bố đó vào trường hợp này có hợp lí không ?

§3. ỨNG DỤNG CÁC HÀM PHÂN BỐ GIPXƠ VÀO CÁC HỆ THỰC

53. Cho một hệ khí lí tưởng đơn nguyên tử gồm N hạt như nhau ở trong thể tích V .

- 1) Tính tích phân trạng thái đối với khí lí tưởng.
- 2) Tính năng lượng tự do đối với khí lí tưởng.
- 3) Lập phương trình trạng thái của khí lí tưởng.

54. Thành lập phương trình trạng thái của khí lí tưởng đơn nguyên tử trong đó năng lượng và xung lượng của các hạt khí đó liên hệ với nhau bằng hệ thức $\epsilon = cp^4$.

55. Tìm năng lượng tự do F và phương trình trạng thái của khí lí tưởng đơn nguyên tử tương đối tính. Năng lượng và xung lượng của nó thoả mãn hệ thức $\epsilon = cp$.

56. Tìm năng lượng tự do F và nội năng U của cột khí lí tưởng có chiều cao h và diện tích đáy σ ở trong trường trọng lực một chiều có gia tốc g , có nhiệt độ T , nếu biết số hạt khí là N , khối lượng hạt là m .

57. Trong một bình lập phương có cạnh là L chứa một khí lí tưởng N hạt ở nhiệt độ T . Bình khí được đặt trong trường trọng lực có gia tốc g . Tìm áp suất đặt lên mặt trên của bình lập phương.

58. Hỗn hợp của hai khí lí tưởng gồm N_1 hạt có khối lượng m_1 và N_2 hạt có khối lượng m_2 chứa trong một bình hình trụ có chiều cao h và diện tích đáy σ . Bình khí được đặt trong trường trọng lực có gia tốc g . Tìm áp suất đặt lên mặt trên của bình và vị trí của khối tâm.

59. Chứng minh rằng động năng của chuyển động quay của phân tử 2 nguyên tử có các khối lượng là m_A và m_B đối với khối tâm của chúng cho bằng hệ thức :

$$\epsilon_1 = \frac{1}{2I} \left(p_\theta^2 + \frac{p^2}{\sin^2 \theta} \right)$$

Trong đó I là mô men quán tính đối với khối tâm phân tử, P_θ và P_φ là xung lượng suy rộng ứng với các tọa độ cầu θ và φ .

60. Tính tổng thống kê, entropi và nhiệt dung ứng với chuyển động quay của phân tử hai nguyên tử.

61. Cho hệ khí lí tưởng gồm N phân tử đơn nguyên tử. Giả sử rằng ở nhiệt độ T , hệ được mô tả bằng phân bố chính tắc. Tìm giá trị xác suất lớn nhất của năng lượng toàn phần E của hệ và chứng tỏ rằng biểu thức nhận được phù hợp với giá trị trung bình trong phân bố chính tắc.

62. Tìm sự biến thiên entropi khi hỗn hợp hai khí khác nhau có cùng một nhiệt độ và áp suất nhưng có thể tích khác nhau V_1 và V_2 .

63. Tìm nội năng của khí lí tưởng ở trong hình trụ bán kính R và chiều cao h , quay xung quanh trục của nó với vận tốc góc ω .

64. Đại lượng $\frac{1}{2} q_i \frac{\partial H}{\partial q_i}$ được gọi là virian đối với bậc tự do thứ i .

Chứng minh rằng giá trị trung bình của virian của một bậc tự do bằng $\frac{1}{2} kT$, nếu $H \rightarrow \infty$ khi $q \rightarrow \pm \infty$.

65. Sử dụng định lí về phân bố đều của động năng theo bậc tự do và định lí virian dưới dạng :

$$q_i \frac{\partial H}{\partial q_i} = p_i \frac{\partial H}{\partial p_i},$$

tính năng lượng trung bình của dao động tử điều hoà tuyến tính.

66. Tính năng lượng trung bình của dao động tử có thế năng $U = ax^4$ theo định lý virian.

67. Sử dụng định lý virian, tìm năng lượng trung bình của hạt chuyển động trong trường lực có thế năng

$$U(q) = \alpha q^{2n} \quad (n \text{ là số tự nhiên}).$$

68. Tìm nhiệt dung mol của vật rắn, nếu coi dao động của các nguyên tử là phi điều hoà. Hàm Haminton của dao động tử phi điều hoà tuyến tính có dạng,

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + \alpha q^2 - \beta q^4 \text{ trong đó } \beta \ll \frac{\alpha^2}{kT}.$$

69. Tìm phần nhiệt dung gây ra sự phi điều hoà của dao động của phân tử hai nguyên tử, nếu thế năng của nó có dạng :

$$U = \frac{\alpha}{2} q^2 + \beta q^3 + \gamma q^4.$$

Trong đó các hệ số α, β, γ , là các hằng số.

70. Các phân tử của một chất khí loãng tương tác với nhau theo định luật :

$$U = \begin{cases} \infty & \text{nếu } r \leq r_0 \\ -U_0 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 & \text{nếu } r > r_0. \end{cases}$$

Xác định nhiệt dung C_v của khí đó.

71. Chứng minh rằng phương trình Van-de-Vanxơ (Van der Waals) có thể viết dưới dạng :

$$\left(\pi + \frac{3}{\omega^2} \right) (3\omega - 1) = 8\tau,$$

trong đó $\omega = V/V_c$, $\pi = p/p_c$, $\tau = T/T_c$

V_c, p_c, T_c lần lượt là thể tích, áp suất và nhiệt độ tới hạn.

72. Tính các thông số tới hạn của hơi nước nếu

$$a = 2,03 \text{ at.m}^6/\text{kmol}^2, \quad b = 0,0183 \text{ m}^3/\text{kmol}.$$

$$R = 5 \cdot 10^3 \text{ J/kmol.K}$$

73. Tính năng lượng E , nhiệt dung C_v , entropi S và thế nhiệt động Gípơ ϕ của khí Van de Vanxơ.

74. Biểu diễn entropi S và thế nhiệt động ϕ của khí Van de Vanxơ qua các hằng số tới hạn.

75. Tính hệ số nén đẳng nhiệt χ của hiđrô ở nhiệt độ 800K và áp suất 10 at. Coi $a = 5,65 \text{ at.m}^6/\text{kmol}^2$, $b = 0,031 \text{ m}^3/\text{kmol}$.

76. Tìm sự biến thiên nhiệt độ khi giãn nở khí Van de Vanxơ có nhiệt dung không đổi vào chân không từ thể tích V_1 đến thể tích V_2 .

77. Tìm phương trình của quá trình đoạn nhiệt đối với khí Van de Vanxơ có nhiệt dung C_v không đổi.

78. Xác định $\beta(T)$ đối với chất khí mà các hạt của nó đẩy nhau theo định luật $U_{12} = \frac{\alpha}{r^n}$ ($n > 3$).

79. Phương trình trạng thái của khí thực có thể trình bày dưới dạng quan trọng sau :

$$\frac{pV}{RT} = 1 + \frac{B_1}{V} + \frac{B_2}{V^2} + \frac{B_3}{V^3} + \dots$$

gọi là phân tích virian của phương trình trạng thái. Chứng tỏ rằng phương trình Van de Vanxơ có thể trình bày dưới dạng phân tích virian với các hệ số :

$$B_1 = b - \frac{a}{RT}, \quad B_2 = b^2, \quad B_3 = b^3.$$

80. Các hệ số virian thứ hai có thể viết :

$$B_2 = -\frac{1}{2} \int f(r) d^3r$$

$$B_3 = \frac{1}{3} \int f(r_{12})f(r_{23})f(r_{31})d^3r_2d^3r_3.$$

trong đó $f(r) = e^{\frac{-U(r)}{kT}} - 1$ là hàm Mayer (Mayer).

Tính B_2 đối với khí quả cầu rắn.

81. Nhiệt dung riêng của chì và nhôm ở nhiệt độ 20°C , thể tích không đổi tương ứng là $126\text{J/kg}\cdot^\circ\text{C}$ và $896\text{J/kg}\cdot^\circ\text{C}$. Tính nhiệt dung kilomol đối với các kim loại này và so sánh với kết quả nhận được từ định luật Dulong – Petit (Dulong – Petit).

82. Tìm năng lượng tự do và phương trình trạng thái của khí lí tưởng đặt trong một bình dẹt bằng một pittông di động có khối lượng M (Pittông được xét như vật thể có một bậc tự do theo phương trục z).

83. Giả sử rằng trong kim loại luôn luôn có một lượng nào đó của các electron tự do. Nếu coi rằng định luật phân bố đều năng lượng theo bậc tự do thì nhiệt dung phân tử của natri tinh thể có một electron tự do đối với mỗi nguyên tử là bằng $4,5R$. Hãy rút ra kết quả này.

§4. CÁC HÀM PHÂN BỐ LƯỢNG TỬ

84. Giả sử chất khí lượng tử tuân theo thống kê Bôzơ – Anhxtanh (Bose – Einstein) và Fecmi – Đirac (Fecmi – Dirac) và giả sử độ suy biến $g(\epsilon)$ không đổi và bằng g . Đặt :

$$B = \exp(\alpha) ; F(B) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} dx}{B \mp 1}$$

và

$$G(B) = \frac{1}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{x^{3/2} dx}{Be^x \pm 1}$$

Chúng minh rằng ta có

$$N = \frac{(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} gVF(B)$$

$$\bar{E} = \frac{3}{2} NkT \frac{G(B)}{F(B)}$$

85. Chứng minh rằng đối với phân bố Bose – Anhxtanh, đạo hàm của thế hoá học theo nhiệt độ luôn luôn âm.

86. Tính tổng thống kê của hệ N dao động tử điều hoà một chiều độc lập.

87. Tính năng lượng trung bình và nhiệt dung của N dao động tử điều hoà tuyến tính độc lập.

88. Tính năng lượng tự do và entropi của hệ N dao động tử điều hoà tuyến tính độc lập.

89. Tính năng lượng trung bình và nhiệt dung của hệ bao gồm từ N dao động tử điều hoà hai chiều độc lập có các mức năng lượng $\epsilon_n = h\nu(n + 1)$ suy biến $n + 1$ lần.

90. Tính tổng thống kê của con quay lượng tử (rôtao). Xét các trường hợp giới hạn nhiệt độ thấp và nhiệt độ cao

$$T \gg T_d = \frac{h^2}{8\pi^2 Ik}$$

91. Tìm năng lượng trung bình và nhiệt dung của hệ N hạt không

tương tác có thể ở trong hai trạng thái lượng tử không suy biến ϵ_0 và ϵ_1 .

92. Tìm sự liên hệ giữa áp suất và mật độ năng lượng đối với khí Bôzơ lượng tử trong trường hợp không tương đối.

93. Phổ năng lượng của các photon có dạng

$$E(q) = \hbar cq.$$

trong đó q là vectơ sóng ; $q = |\vec{q}|$. Tính năng lượng tự do và entropi của khí photon.

94. Tính các hàm nhiệt động F , S , E , p của bức xạ điện từ.

95. Tính nhiệt dung của khí photon C_V .

96. Tìm phương trình đoạn nhiệt của khí photon.

97. Tính xác suất để cho ở nhiệt độ phòng ($kT = 0,025\text{eV}$) electron chiếm các trạng thái nằm cao hơn mức Fermi $0,1\text{eV}$ và thấp hơn mức Fermi $-0,1\text{eV}$.

98. Tìm xác suất để electron trong kim loại có năng lượng bằng năng lượng Fermi.

99. Chứng minh rằng

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial f}{\partial E} \right) dE = -1$$

100. Tìm độ chênh lệch giữa năng lượng (theo đơn vị kT) của electron nằm trên mức Fermi và các electron nằm trên mức có xác suất bị chiếm là 0,20 và 0,80.

101. Tìm năng lượng cực đại của electron trong kim loại ở 0K .

102. Giá trị thực nghiệm của mức Fermi đối với liti ở $T = 0\text{K}$ bằng $3,5\text{eV}$. Giá trị nào của khối lượng hiệu dụng phải thay vào công thức để có sự phù hợp giữa các giá trị lý thuyết và thực nghiệm của mức Fermi.

103. Xác định nhiệt độ Fecmi của electron trong natri trên mức Fecmi. Biết rằng nồng độ của electron tự do của natri là $2,5 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$.

104. Tìm điều kiện ứng dụng thống kê cổ điển và giải thích ý nghĩa vật lý của nó.

105. Tính nhiệt độ suy biến của hiđrô, nếu số hạt trong một đơn vị thể tích bằng số hạt ở điều kiện tiêu chuẩn.

106. Số nguyên tử hiđrô trong một đơn vị thể tích phải bằng bao nhiêu để thống kê lượng tử có tác dụng ở nhiệt độ phòng ($T = 300\text{K}$). Mật độ khí bằng bao nhiêu trong trường hợp này ?

107. Xác định nồng độ của khí electron tự do trong tinh thể để cho nhiệt độ suy biến của khí electron trong nó bằng 0°C .

108. Tính số toàn phần của trạng thái lượng tử của khí ở nhiệt độ T . Chứng minh rằng nếu số hạt khí nhỏ hơn nhiều so với số trạng thái thì điều kiện sau thoả mãn

$$\left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} \gg n$$

109. Xác định số trạng thái $D(\epsilon)d\epsilon$, xung lượng giới hạn p_F và năng lượng Fecmi E_F ở độ không tuyệt đối đối với khí electron siêu tương đối bao gồm N hạt ở trong thể tích V . ($\epsilon = cp$).

110. Tìm số va chạm trong một đơn vị thời gian với một đơn vị diện tích thành bình của khí electron ở độ không tuyệt đối.

111. Chứng minh rằng ở nhiệt độ cao khi $T \gg T_c$, nội năng của vật rắn tuân theo công thức.

$$U = \frac{3}{4} N h \nu_{\max} + 3NkT + \frac{9}{8} NkT_c$$

$$\left(v_{\max} = \frac{v}{a} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/3} \right)$$

112. Áp dụng phân bố chính tắc lượng tử, chứng minh công thức xác định độ từ hoá của chất thuận từ là :

$$I = n_0 \frac{j(j+1)\mu^2}{3KT} H$$

113. Tìm công thức cho độ cảm thuận từ tương ứng.

§5. LÝ THUYẾT THĂNG GIÁNG

114. Chứng minh rằng độ lệch toàn phương trung bình của các đại lượng cộng được độc lập đối với giá trị cân bằng, bằng tổng các giá trị trung bình của các bình phương độ lệch của đại lượng này đối với từng phần riêng biệt.

115. Chứng minh rằng thăng giáng tương đối của một hàm trạng thái cộng được bất kì của hệ tỉ lệ nghịch với căn bậc hai của số phần độc lập của hệ.

116. Tìm thăng giáng toàn phương trung bình của vận tốc khí lí tưởng.

117. Hãy tính thăng giáng toàn phương trung bình của hệ khí lí tưởng.

118. Tính thăng giáng tương đối của năng lượng trong hệ đẳng nhiệt theo phân bố chính tắc.

119. Tính thăng giáng tương đối của năng lượng của tinh thể ở nhiệt độ cao và nhiệt độ thấp.

120. Tìm sự phụ thuộc nhiệt độ của độ lệch toàn phương trung

· bình của vật rắn tuân theo định luật Đơbai (Debye).

121. Chứng minh rằng $\overline{\Delta x^3} = \overline{x^3} - \overline{x}^3 - 3\overline{x}(\Delta x)^2$.

122. Chứng minh rằng đối với phân bố Gaoxơ ta có hệ thức $\overline{x^4} = 3(\overline{x^2})^2$

123. Sử dụng phân bố Gipxơ đối với hệ có số hạt biến thiên biểu diễn $\overline{\Delta N^2}$ qua $\left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)_{T,V}$ (μ là thế hoá học).

124. Sử dụng kết quả bài 123 tìm $\overline{\Delta n_i^2}$ đối với các hạt tuân theo phân bố Fecmi.

125. Tìm thăng giáng năng lượng và số hạt lượng tử của trường điện từ có tần số đã cho.

126. Tính thăng giáng toàn phương trung bình và thăng giáng tương đối của năng lượng dao động tử điều hoà (để thuận tiện ta chọn năng lượng trạng thái cơ bản bằng không). Cũng tính như trên đối với tập hợp N dao động tử điều hoà như nhau. Xét trường hợp giới hạn nhiệt độ cao.

127. Xác định trung bình của bình phương điện tích của một tụ điện có điện dung C, được nối với một nguồn điện nào đó.

128. Tính thăng giáng toàn phương trung bình của dòng điện trong mạch có cuộn tự cảm ở nhiệt độ T.

129. Xác định khoảng cách trung bình khí khuếch tán được sau thời gian t. Khí bao gồm các phân tử lớn phát ra từ một nguồn điểm vào chất lỏng có hệ số ma sát nội η ở nhiệt độ T. Bán kính phân tử r.

130. Nếu coi khí lí tưởng là một tập hợp các hạt Braonơ (Brown) tuân theo các định luật của thủy động học của chất lỏng

lí tưởng đẳng nhiệt, hãy rút ra phương trình Anhxtanh – Phóc – Plăng ($E - E - P$). Trường ngoài được đặc trưng bằng thế năng $U(\vec{r})$. Lực ma sát coi là tỉ lệ bậc nhất đối với vận tốc. Bỏ qua lực quán tính.

131. Sử dụng phương trình $E - F - P$ ở trên, xác định trung bình bình phương độ dịch chuyển của các hạt Braonơ chuyển động trong trường trọng lực với gia tốc g .

§6. THUYẾT ĐỘNG HỌC CÁC KHÍ

132. Chứng minh rằng khi có trường ngoài $U(\vec{r})$, nghiệm dừng của phương trình động học Bônxôman là hàm phân bố Macxoen – Bônxôman.

133. Xuất phát từ phương trình động học Bônxôman hãy rút ra phân bố Macxoen theo vận tốc của các phân tử khí cân bằng khi không có trường ngoài.

134. Rút ra phân bố Bônxôman đối với mật độ khí lí tưởng ở trong trường trọng lực đồng nhất từ phương trình động học Bônxôman.

135. Trong quả cầu bán kính a có chứa N hạt khí lí tưởng cân bằng ở nhiệt độ T . Ở thời điểm ban đầu $t = 0$, khí bắt đầu giãn nở tự do vào chân không. Xác định mật độ hạt $\rho(\vec{r}, t)$ nếu bỏ qua va chạm.

136. Xác định hệ số truyền nhiệt của khí êlectrôn trong kim loại dựa trên các giả thiết sau :

a) Tất cả các êlectrôn chuyển động với vận tốc v như nhau.

b) Mỗi êlectrôn tán xạ đẳng hướng (chẳng hạn bởi tâm tạp chất trong kim loại) sau quãng thời gian τ như nhau đối với tất cả các êlectrôn.

c) Sau tán xạ, năng lượng của mỗi electron đúng bằng năng lượng trung bình u của nó ở điểm xảy ra tán xạ.

137. Hàm phân bố không cân bằng của electron trong dây dẫn khi có mật điện trường E_x và gradien nhiệt độ $\frac{dT}{dx}$ rút ra từ phương trình Bônxơman trong phép gần đúng thời gian hồi phục τ là :

$$f = f_0(\epsilon) + \tau \left[\left(\frac{du}{dT} + \frac{\epsilon - \mu}{T} \right) \frac{dT}{dx} + eE_x \right] \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}.$$

trong đó $f_0(\epsilon)$ là hàm phân bố Fecmi – Dirac.

Hãy rút ra phương trình truyền nhiệt và biểu thức đối với hệ số truyền nhiệt λ qua tích phân theo năng lượng của hạt mang nếu coi thời gian hồi phục τ chỉ phụ thuộc vào năng lượng $\epsilon = \frac{p^2}{2m}$.

138. Tìm số va chạm, thời gian trung bình giữa hai va chạm liên tiếp và quãng đường tự do trung bình của các phân tử khí loãng. Coi các phân tử khí là các quả cầu va chạm đàn hồi bán kính a .

139. Tìm quãng đường tự do trung bình đối với phân tử khí nito N_2 ở điều kiện tiêu chuẩn (0°C và 1at). Nếu coi $a = 1,90\text{\AA}$.

140. Khi nghiên cứu các hiện tượng nhiệt điện trong kim loại và bán dẫn, ta thường chọn dòng điện $\vec{j}$, dòng nhiệt $\vec{Q} = \vec{\omega} + \frac{\eta}{\epsilon_0} \vec{j}$

(trong đó $\vec{\omega}$ là mật độ dòng năng lượng, η là thế điện hoá của các hạt mang) là các dòng nhiệt động. Hãy tìm lực liên hiệp với dòng với điều kiện là nguyên lí đối xứng của hệ số động học của Onxage được thoả mãn.

141. Sử dụng nguyên lý đối xứng Onxage, biểu diễn các hệ số động học đối với tinh thể đẳng hướng qua hệ số dẫn điện σ , thể nhiệt điện động vi phân α , hệ số truyền nhiệt χ .

B - LỜI GIẢI

1. $p = mv_0$. Vì v_0 không đổi, suy ra p không đổi. Vậy quỹ đạo pha là đường thẳng song song với trục q .

2. Hàmintoniên của dao động tử điều hoà có dạng :

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{kq^2}{2}.$$

Từ phương trình chính tắc Haminton.

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}; \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q},$$

ta rút ra

$$\ddot{q} + \omega^2 q = 0 \text{ với } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

Phương trình vi phân tuyến tính thuần nhất này có nghiệm :

$$q = q_0 \sin \omega t,$$

từ đó ta tính được : $p = p_0 \cos \omega t$ với $p_0 = m\omega q_0$.

Khử thời gian t trong các phương trình đối với p và q ta có :

$$\frac{q^2}{q_0^2} + \frac{p^2}{p_0^2} = 1.$$

Vậy quỹ đạo pha là elip có tâm ở gốc toạ độ, các bán trục hướng theo các trục p và q .

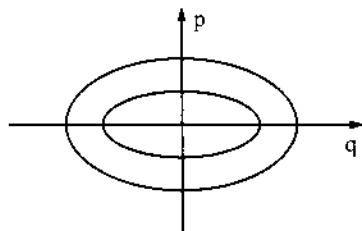
3. Thay các kết quả của bài trên vào tích phân :

$$\int p dq = nh,$$

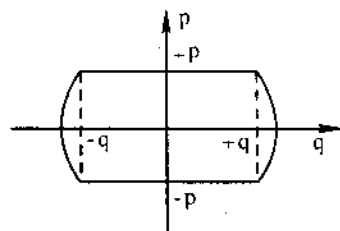
ta tính được các bán trục p_0 và q_0 . Từ đó ta có phương trình elip :

$$\frac{p^2}{\frac{m^2 h^2}{\pi}} + \frac{q^2}{\frac{n^2 h^2}{\pi m \omega}} = 1.$$

Các bán trục bây giờ phụ thuộc vào n_0 . Vậy các quỹ đạo bị lượng tử hoá (h. 4.1).



Hình 4.1



Hình 4.2

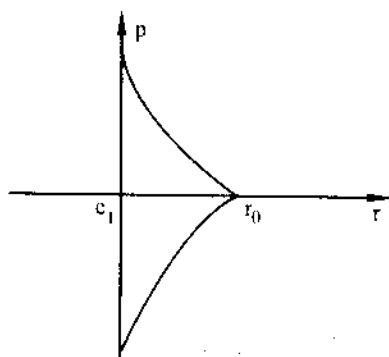
4. Ở bên trong vách ngăn, hạt chuyển động theo quán tính và phần quỹ đạo pha tương ứng là đường thẳng. Khi phản xạ đàn hồi p biến thành $-p$, hạt chuyển động ngược lại, quỹ đạo pha là đường thẳng cách đường trên một khoảng $2p$.

Trong thực tế do tác dụng của lực giả đàn hồi $-kq$, động năng chuyển thành thế năng $\frac{kq^2}{2}$ và trong không gian pha phần tương ứng của quỹ đạo pha là một cung elip (h.4.2).

5. Để đơn giản, ta chọn gốc toạ độ ở vị trí đặt điện tích cố định e_1 . Gọi r là khoảng cách từ điện tích $-e$ đến điện tích e_1 .

Theo định luật Culông ta có :

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{ee_1}{r^2}$$



Hình 4.3

Thay $dt = \frac{m}{p} dr$ vào phương trình trên và tích phân nó, ta dễ dàng thu được

$$p = \pm \sqrt{2mce_1 \left(\frac{1}{r} \right) - \left(\frac{1}{r_0} \right)},$$

trong đó m là khối lượng của điện tích e , p là xung lượng tương ứng.

Trên hình 4.3, nhánh trên ứng với chuyển động của hạt từ r_0 tới gốc toạ độ. Nhánh thứ hai ứng với chuyển động của hạt từ e_1 đến r_0 .

6. Hàm Haminton của chất điểm có khối lượng m chuyển động trong trường trọng lực có dạng :

$$H = \frac{p^2}{2m} + mg(h - q)$$

(chọn gốc toạ độ ở độ cao h , trục q hướng từ trên xuống dưới).

Từ định luật bảo toàn cơ năng

$$\frac{p^2}{2m} + mg(h - q) = \frac{p_o^2}{2m} + mg(h - q_o),$$

trong đó p_o, q_o là toạ độ và xung lượng ở thời điểm t_o nào đó ; p, q là toạ độ và xung lượng ở thời điểm bất kì t , ta rút ra phương trình mô tả quỹ đạo pha :

$$p^2 - p_o^2 = 2m^2 g(q - q_o)$$

Vậy quỹ đạo pha là các parabol có đỉnh nằm trên trục q . Để kiểm nghiệm lại định lí Liuvin, ta xét thể tích chiếm bởi các điểm pha ở thời điểm t_o . Đó là hình chữ nhật $abcd$ có các toạ độ $q_o, q_o + dq_o$; p_o và $p_o + dp_o$. Ở thời điểm t , thể tích pha là hình bình hành $a'b'c'd'$ (h. 4.4). Diện tích của hình chữ nhật và hình bình hành tương ứng là $dp_o dq_o$ và $dp dq$. Trong đó :

$$dq = q_{b'} - q_a,$$

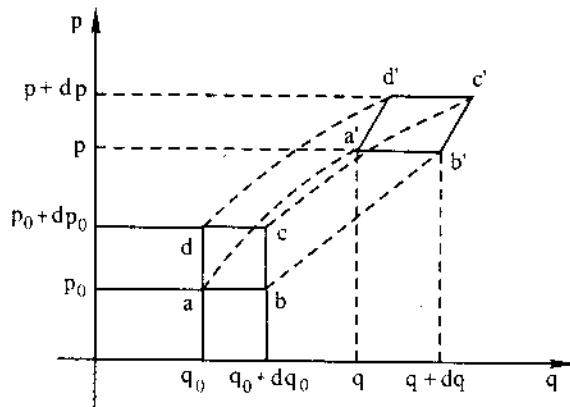
$$dp = p_{d'} - p_a,$$

Theo các phương trình của động lực học chất điểm :

$$p_{a'} = p_o - mg\Delta t ; q_{a'} = q_o + \frac{p_o}{m}\Delta t - g\frac{\Delta t^2}{2}$$

$$p_{d'} = p_o + dp_o - mg\Delta t ; q_{b'} = q_o + dq_o + \frac{p_o}{m}\Delta t - g\frac{\Delta t^2}{2}$$

$$\Delta t = t - t_o.$$



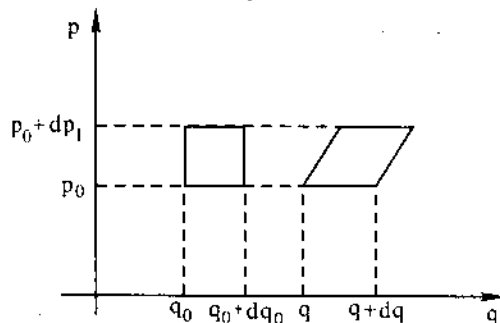
Hình 4.4

Do đó ta dễ dàng rút ra : $dq = dq_0$; $dp = dp_0$.

Vậy $dpdq = dp_0 dq_0$.

Điều đó nói lên độ lớn của yếu tố thể tích pha được bảo toàn.

7. Thể tích pha là diện tích hình vuông ở thời điểm ban đầu và hình bình hành có cùng cạnh đáy, cùng chiều cao với hình chữ nhật ở thời điểm t (h. 4.5).



Hình 4.5

$$dp_0 dq_0 = dp(t) dq(t)$$

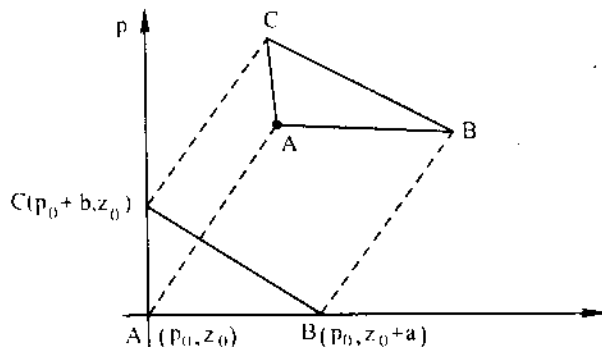
8. Các đỉnh tam giác $A(p_0, z_0)$; $B(p_0, z_0 + a)$; $C(p_0 + b, z_0)$ sau khoảng thời gian t sẽ chiếm các vị trí $A'(p_1, z_1)$ với $p_1 = p_0 - mgt$

$$z_1 = z_0 + \frac{p_0}{m}t - \frac{gt^2}{2}, \quad B'(p_2, z_2) \text{ với } p_2 = p_0 - mgt$$

$$z_2 = z_1 + a,$$

$$C'(p_3, z_3) \text{ với } p_3 = p_1 + b, z_3 = z_1 + \frac{bt}{m} \quad (\text{h. 4.6})$$

Diện tích của hình tam giác ở vị trí mới được tính theo tọa độ của các đỉnh là :



Hình 4.6

$$S = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} p_1 & z_1 & 1 \\ p_2 & z_2 & 1 \\ p_3 & z_3 & 1 \end{vmatrix} = \frac{1}{2} ab = S_0$$

Như vậy hình dạng của miền chứa các điểm pha thay đổi nhưng độ lớn của diện tích của các miền đó không đổi.

9. Các định luật bảo toàn năng lượng và xung lượng cho ta các hệ thức sau :

$$\vec{p}'_1 = \frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} \vec{p}_1 + \frac{2m_2}{m_1 + m_2} \vec{p}_2$$

$$\vec{p}'_2 = -\frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} \vec{p}_2 + \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \vec{p}_1$$

p_1, p_2 và p'_1, p'_2 là xung lượng của hai quả cầu trước và sau va chạm. Từ đó ta dễ dàng tính được Jacôbiên

$$J = \frac{D(p'_1, p'_2, q'_1, q'_2)}{D(p_1, p_2, q_1, q_2)} = 1,$$

nghĩa là thể tích pha bảo toàn.

10. Lấy toạ độ suy rộng là X_1, X_2, X_3 và xung lượng suy rộng là p_1, p_2, p_3 . Sử dụng công thức tính diện tích tam giác trong bài 8, ta dễ dàng có :

$$S = m \sqrt{\epsilon} \Delta \epsilon \sin \delta \epsilon$$

Vậy S là hằng số. Điều đó chứng minh tính đúng đắn của định lí Liouvin.

11. Từ các phương trình chuyển động :

$$\dot{v} + \frac{\gamma}{m} v = 0$$

$$\ddot{q} + \frac{\gamma}{m} \dot{q} = 0,$$

trong đó γ là hệ số ma sát, m là khối lượng của hạt ta rút ra :

$$v = v_0 e^{-\frac{t}{\tau}}, \quad v = v_0 e^{-\frac{t}{\tau_0}}$$

$$q = q_0 + v_0 \tau (1 - e^{t/\tau})$$

$$\text{với } \tau = m/\gamma.$$

Từ đó $q + v\tau = q_0 + v_0\tau$, nghĩa là trên mặt phẳng q, v các quỹ đạo pha tạo thành họ đường thẳng có hệ số góc là $-\frac{1}{\tau}$.

Khi không có ma sát $\frac{1}{\tau} = 0$, các quỹ đạo song song với trục q .
Jacôbiên của phép biến đổi là

$$J = \frac{D(q, v)}{D(q_0, v_0)} = e^{-t/\tau}.$$

Do đó thể tích pha giảm theo hàm mũ của thời gian.

12. Phương trình chuyển động là

$$\ddot{q} + \frac{1}{\tau} \dot{q} + \omega_0^2 q = 0.$$

Theo điều kiện đầu bài $\frac{1}{\tau} \ll \omega_0$,

do đó ta dễ dàng tìm được nghiệm của phương trình vi phân tuyến tính đồng nhất trên

$$q = e^{-t/2\tau} (q_0 \cos \omega_0 t + \frac{v_0}{\omega_0} \sin \omega_0 t)$$

(Ta đã tính đến ở thời điểm ban đầu $q = q_0$ và $v = v_0$). Lấy đạo hàm bậc nhất phương trình trên, ta có :

$$\frac{v}{\omega_0} = e^{-t/2\tau} \left(\frac{v_0}{\omega_0} \cos \omega_0 t - q_0 \sin \omega_0 t \right)$$

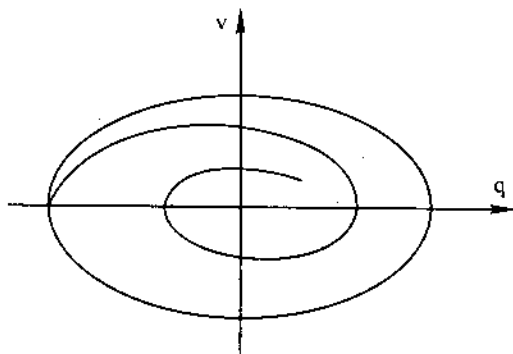
Bình phương hai phương trình trên và cộng lại, ta được :

$$q^2 + \frac{v^2}{\omega_0^2} = \left(\dot{q}_0^2 + \frac{v_0^2}{\omega_0^2} \right) e^{-\frac{t}{\tau}}$$

Nghĩa là các điểm pha dịch chuyển dọc theo elip có bán trục giảm dần theo thời gian. Đó là đường xoắn ốc elliptic vòng quanh gốc toạ độ (h. 4.7).

Thể tích pha cũng biến thiên theo định luật mũ

$$J = e^{-t/\tau}.$$



Hình 4.7

13. Không gian pha μ của một phân tử khí lí tưởng là không gian 6 chiều có các toạ độ x, y, z, p_x, p_y, p_z . Thể tích nguyên tố của không gian đó là $d\Gamma = dx dy dz dp_x dp_y dp_z$ hay $d\Gamma = d\Gamma_q d\Gamma_p$, với $d\Gamma_q = dx dy dz = dV$, trong đó dV là yếu tố thể tích thực chiếm bởi chất khí,

$$V = \int_V dx dy dz$$

Bởi vì năng lượng của một phân tử khí lí tưởng đơn nguyên tử chỉ là động năng

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$$

Do đó nguyên tố thể tích $d\Gamma_p$ có thể xét một cách đơn giản như là thể tích của tầng cầu tạo thành bởi hai thành cầu có bán kính từ p đến $p + dp$. Nghĩa là

$$d\Gamma_p = d\left(\frac{4}{3}\pi p^3\right) = 4\pi p^2 dp,$$

$$\text{vì } p^2 = 2mE \text{ nên}$$

$$d\Gamma_p = 4\pi \cdot 2mE \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m}{E}} dE$$

Vậy $d\Gamma = dV d\Gamma_p = dV \cdot 4\pi \sqrt{2m^3} \sqrt{E} dE$. Từ đó ta tìm được biểu thức của thể tích pha ứng với một phân tử khí lí tưởng :

$$\begin{aligned}\Gamma_o &= 4\pi \sqrt{2} V m^{3/2} \int_0^E \sqrt{E} dE \\ &= \frac{4}{3} \pi (2m)^{3/2} V E^{3/2}.\end{aligned}$$

Ta thấy thể tích pha tăng lên khi năng lượng của phân tử khí lí tưởng tăng lên.

14. Không gian pha của khí lí tưởng đơn nguyên tử gồm N hạt là không gian $6N$ chiều. Thể tích nguyên tố của không gian đó là

$$\begin{aligned}d\Gamma &= d\Gamma_p d\Gamma_q ; \\ d\Gamma_q &= dq_1 dq_2 \dots dq_{3N}, \\ d\Gamma_p &= dp_1 dp_2 \dots dp_{3N}.\end{aligned}$$

Từ đó ta rút ra $\Gamma_q = V^N$. Còn $d\Gamma_p$ là tăng cầu $3N$ chiều nằm giữa hai siêu mặt năng lượng từ p đến $p + dp$ và do đó

$$\Gamma_p \sim (\sqrt{2mE})^{3N}$$

$$\text{Ta nhận xét } \Gamma = \Gamma_q \Gamma_p \sim \Gamma_o^N.$$

15. a) Thể tích pha bằng diện tích giới hạn bởi quỹ đạo pha elip :

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} \leq E,$$

có các bán trục $a = \sqrt{2mE}$; $b = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$

Do đó $\Gamma(E) = \pi ab = \frac{2\pi E}{\omega}$.

b) Ta có $p(E) = \frac{1}{c}\sqrt{E^2 - m^2c^4}$

Từ đó

$$\Gamma(E) = V \frac{4\pi}{3} p^3(E).$$

16. Ta có $\Gamma = \frac{4\pi}{3} V p^3$. Thay $p = \varepsilon/c$ vào, ta được :

$$\Gamma = \frac{4\pi}{3} V \frac{\varepsilon^3}{c^3}.$$

17. a) $\Omega(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{d\Gamma}{d\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{h^3} = \frac{4\pi V \varepsilon^2}{c^3 h^3} d\varepsilon$.

b) Hàm Haminton của hệ có dạng :

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \omega^2 q_i^2 \right),$$

khi đó số trạng thái của hệ

$$\Omega(E) = \frac{\Gamma(E)}{h^N} = \frac{1}{h^N} \int \prod_{i=1}^N dp_i dq_i$$

Đổi biến số

$$\frac{p}{\sqrt{2}} = X_i ; \frac{\omega q_i}{\sqrt{2}} = X_{N+i},$$

khi đó hàm Haminton của hệ có thể viết :

$$H = \sum_{i=1}^{2N} X_i^2$$

Số trạng thái của hệ :

$$\Omega(E) = \frac{1}{(\pi h \nu)^N} \int_{\sum X_i^2 \leq E} \prod_{i=1}^{2N} dX_i$$

$$(\omega = 2\pi\nu).$$

Tích phân biểu diễn thể tích quả cầu $2N$ chiều bán kính E .
 Hãy tính giá trị của tích phân này, ta có

$$I_{2N}(E) = \int \dots \int dX_1 \dots dX_{2N}$$

$$X_1^2 + X_2^2 + \dots + X_{2N}^2 \leq E$$

Ta đổi biến số như sau : đặt $X_i = y_i \sqrt{E}$, thay vào :

$I_{2N}(E) = E^N V_{2N}(1)$, ở đây : $I_{2N}(1) = \int \dots \int dy_1, \dots, dy_{2N}$ và bây giờ tích phân lấy theo vùng giới hạn bởi mặt.

$$y_1^2 + y_2^2 + \dots + y_N^2 = 1$$

Ta có :

$$I_{2N}(1) = \int_{-1}^1 dy_1 \int \dots \int dy_2 \dots dy_{2N} =$$

$$y_2^2 + y_3^2 + \dots + y_N^2 \leq 1 - y_1^2$$

$$= \int_{-1}^1 dy_1 (1 - y_1^2)^{\frac{2N-1}{2}} I_{2N-1}(1) = I_{2N-1}(1) B\left(\frac{1}{2}, \frac{2N+1}{2}\right)$$

Ở đây ta đã dùng định nghĩa của hàm beta

$$B(\alpha, \beta) = \int_0^1 (1-x)^{\beta-1} x^{\alpha-1} dx = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta)}$$

Tiếp tục tính theo cách truy hồi, ta có :

$$I_{2N-1} = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{2N+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{2N}{2}+1\right)} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{2N}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{2N+1}{2}\right)}$$

$$\dots I_1(1) = \frac{\pi^N}{\Gamma(N+1)}.$$

Vì $I_1(1) = 1$, từ đó $I_{2N}(E) = E^N \frac{\pi^N}{\Gamma(N+1)}$ và thay giá trị của tích phân vào, ta có :

$$\Omega(E) = \frac{\pi^N E^N}{(\pi h\nu)^N \Gamma(N+1)} = \frac{1}{N!} \left(\frac{E}{h\nu} \right)^N.$$

Thay kết quả này vào biểu thức đã biết $S = k/n\Omega(E)$, ta thu được

$$S = Nk/n \frac{E}{h\nu} - K/nN$$

$$\text{Vì } \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_v = \frac{1}{T}, \text{ nên } E = NkT.$$

18. Vì các trạng thái tương đương xác suất nên

$$p = \frac{1}{N}.$$

19. Vì quay đều nên $f(\varphi) = \frac{1}{2\pi}$.

20. Vì điểm khảo sát thực hiện dao động điều hoà liên tục dọc trục x theo định luật :

$$x = a \sin \frac{2\pi t}{T}$$

cho nên xác suất để tìm điểm đó trong khoảng dx sẽ được xác định bằng tỉ số của thời gian dt (mà điểm nằm trong khoảng dx) chia cho thời gian mà điểm đi qua được tất cả các vị trí khả dĩ, tức là chia cho nửa chu kì.

Vậy xác suất $dW(x)$ để tìm điểm dao động điều hoà trong khoảng dx sẽ được xác định bằng hệ thức :

$$dW(x) = \frac{2dt}{T} = \frac{2 \frac{dx}{\dot{x}}}{T} = \frac{2dx}{\dot{x}T}$$

Thay vận tốc $\dot{x}$ theo công thức $\dot{x} = \frac{2\pi}{T} a \cos \frac{2\pi t}{T}$, ta được

$$dW(x) = \frac{dx}{\pi a \cos \frac{2\pi t}{T}} = \frac{1}{\pi \sqrt{a^2 - x^2}} dx$$

Hàm phân bố là

$$f(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{a^2 - x^2}}.$$

21. Bởi vì các hạt là độc lập thống kê nên xác suất để cho n hạt rơi vào trạng thái p là $p^n (1 - p)^{N-n}$.

Số phương án có thể chọn n hạt bất kì trong N hạt bằng số tổ hợp N chập n . Do đó xác suất toàn phần để cho n hạt đã chọn bất kì đồng thời ở trong trạng thái p bằng :

$$\omega_N(n) = C_N^n p^n (1-p)^{N-n} = \frac{N!}{(N-n)!n!} p^n (1-p)^{N-n}$$

Đó là phân bố nhị thức.

22. a) Đối với trường hợp $N \gg n$, ta có :

$$\omega_N(n) = \frac{N(N-1)\dots(N-n+1)}{n!} p^n (1-p)^N \approx \frac{(\bar{n})^n}{n!} \left(1 - \frac{\bar{n}}{N}\right)^N,$$

trong đó $\bar{n} = pN$ là số hạt trung bình trong trạng thái p . Khi $N \rightarrow \infty$ ta có :

$$\omega(n) = \lim_{N \rightarrow \infty} \omega_N(n) = \frac{(\bar{n})^n e^{-\bar{n}}}{n!}.$$

Đó chính là phân bố Poatxông.

b) Bây giờ giả sử không chỉ N mà cả n là lớn. Điều đó có nghĩa là $\bar{n}$ và n có thể coi là lớn (so với đơn vị) còn hiệu $n - \bar{n} \ll \bar{n}$. Lấy lôgarit phân bố Poatxông và dùng công thức steeling

$$\ln n! \approx n \ln n - n, \text{ ta có } \omega(n) = \text{conste } e^{-\frac{(n-\bar{n})^2}{2n^2}}.$$

Hằng số tìm được bằng điều kiện chuẩn hoá. Vì n rất lớn, ta có thể thay thế tổng bằng tích phân và xác định hằng số chuẩn hoá, khi đó ta có :

$$\omega(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi n^2}} e^{-\frac{(n-\bar{n})^2}{2n^2}}$$

Đó là phân số Gaoxơ.

23.

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{\frac{a}{\pi}} x e^{-ax^2} dx.$$

Hàm dưới dấu tích phân là hàm lẻ, hai cận là đối xứng nên tích phân bằng không. Vậy $\bar{x} = 0$

$$\bar{x}^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{\frac{a}{\pi}} x^2 e^{-ax^2} dx$$

Hàm dưới dấu tích phân là hàm chẵn, hai cận là đối xứng nên

$$\bar{x}^2 = 2 \int_0^{\infty} \sqrt{\frac{a}{\pi}} x^2 e^{-ax^2} dx.$$

Dùng tích phân Poatxông ta rút ra

$$\bar{x}^2 = \frac{1}{2a}; \quad \overline{\Delta x^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 = \frac{1}{2a}.$$

24. Thể tích không gian pha của N hạt khí lí tưởng bằng

$$\Gamma(E, V) = A_N V^N E^{3N/2},$$

trong đó hằng số A_N không phụ thuộc vào thể tích, E là năng lượng của một hạt và V là thể tích chứa khí

$$S = k/n\Gamma = k/nA_N + kN/nV + \frac{3}{2}kN/nE$$

Nhiệt độ của khí lí tưởng được xác định bằng hệ thức.

$$T = \left[\left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_V \right]^{-1} = \frac{2E}{3kN}.$$

Bởi vì thông số ngoài là thể tích cho nên lực suy rộng là áp suất.

$$p = T \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_E = kNT \frac{1}{V}.$$

Từ đó $pV = kNT$.

25. Hàm Haminton của dao động tử điều hoà cổ điển có dạng :

$$H = \varepsilon = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

Phân bố chính tắc Gipsơ cho năng lượng được xác định từ hệ thức.

$$dW = \frac{1}{Z} e^{-\varepsilon/kT} dp dx$$

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{p^2}{2mkT} + \frac{m\omega^2 x^2}{2kT}\right)} dp dx = \frac{2\pi kT}{\omega}$$

$$\text{Khi đó } dW = \frac{\omega}{2\pi kT} e^{-\left(\frac{p^2}{2mkT} + \frac{m\omega^2 x^2}{2kT}\right)} dp dx$$

$$\text{hay } dW = \frac{1}{kT} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} d\varepsilon. \text{ Từ đó } \bar{\varepsilon} = \frac{1}{kT} \int_0^{\infty} \varepsilon e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} d\varepsilon = kT$$

26. Theo phân bố chính tắc, mật độ xác suất pha có dạng.

$$\omega(p, q) = e^{-\frac{F-H(p,q)}{\theta}}$$

Mật độ xác suất của các giá trị năng lượng đã cho được tính theo công thức

$$W(E) = \int e^{-\frac{F-H(p,q)}{\theta}} \delta[(E-H(p,q))] dp dq$$

$$= e^{-\frac{F-E}{\theta}} \Omega(E),$$

trong đó $\Omega(E) = \frac{\partial \Gamma(E)}{\partial E}$ là thừa số chuẩn hoá trong phân bố vi chính tắc.

Theo bài 14 ta có

$$\Gamma(E, V) = \int_{H(p,q) < E} dp dq = A_N V^N E^{3N/2}$$

$$\Omega(E) = \frac{\partial \Gamma}{\partial E} = A_N V^N \frac{3N}{2} E^{\frac{3N}{2}-1}$$

với $A_N = \frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma\left(\frac{3N}{2} + 1\right)} (2m)^{3N/2}$ (bài 17).

Từ đó ta có

$$W(E) = A e^{-E/kT} \Omega(E).$$

Tính A từ điều kiện chuẩn hoá và thay vào ta có

$$dW(E) = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3N}{2}\right)} \left(\frac{E}{kT}\right)^{3N/2} e^{-\frac{E}{kT}} \frac{dE}{E}.$$

27. Như ta đã biết năng lượng tự do của hệ liên hệ với tích phân trạng thái bằng hệ thức :

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = k \ln Z + kT \frac{\partial \ln Z}{\partial T}$$

$$S = k \left(\ln Z + \frac{\partial \ln Z}{\partial \ln T} \right).$$

28. Theo định nghĩa $C_V = T \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V$

$$C_V = kT \left[2 \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \ln T} \right)_V + T \left(\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial T^2} \right)_V \right].$$

$$\begin{aligned}
 29. \phi &= F + pV = -kT \ln Z + kT \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \ln V} \right)_T \\
 &= kT \left[\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \ln V} \right)_T - \ln Z \right].
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 30. H &= U + pV = \psi + TS + pV \\
 &= kT \left[\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \ln T} \right)_V + \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \ln V} \right)_T \right].
 \end{aligned}$$

31. Theo bài 26, ta có

$$W(E) \sim e^{-E/kT} E^{\frac{3N}{2}-1}$$

Lấy đạo hàm theo E và đặt bằng không, ta có

$$-\frac{1}{kT} e^{-\frac{E}{kT}} E^{\frac{3N}{2}-1} + \left(\frac{3N}{2} - 1 \right) e^{-\frac{E}{kT}} E^{\frac{3N}{2}-2} = 0$$

Từ đó ta rút ra :

$$E_{xs} = \left(\frac{3N}{2} - 1 \right) kT \approx \frac{3N}{2} kT = \bar{E}$$

(ở đây $N \gg 1$)

32. Hệ cổ điển ở nhiệt độ T được diễn tả bằng hàm Haminton

$$H = T(p) + U(q),$$

trong đó T(p) là động năng và U(q) là thế năng.

Phân bố chính tắc Gipsơ :

$$\omega(p, q) = A e^{-H/kT}$$

có thể tách thành hai phần theo toạ độ và xung lượng

$$\omega(p) = A_1 e^{-T(p)/kT}$$

$$\omega(q) = A_2 e^{-U(q)/kT}$$

A, A_1, A_2 là các hằng số chuẩn hoá.

$$33. d\omega(v_x, v_y, v_z) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2kT}} dv_x dv_y dv_z$$

Vì ở đây :

$$H = T(p) = \frac{mv_x^2}{2} + \frac{mv_y^2}{2} + \frac{mv_z^2}{2}.$$

Thay vào $\omega(q)$ của bài 32 và tính hằng số chuẩn hoá ta được kết quả trên.

34. Từ kết quả của bài 33 ta thay $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$ và chuyển sang toạ độ cầu, ta có :

$$\int_{\text{lớp cầu nằm giữa } v \text{ và } v+dv} dv_1 dv_2 dv_3 = 4\pi v^2 dv$$

$$d\omega(v) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} 4\pi v^2 dv$$

$$dN(v) = Nd\omega(v) = 4\pi N \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^2 dv$$

35. Sử dụng kết quả của bài 34, ta có :

$$\bar{v} = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} 4\pi \int_0^\infty e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^3 dv.$$

Nhờ tích phân Poatxông, ta dễ dàng có :

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$$

Tương tự, ta có $\sqrt{v^2} = \sqrt{\frac{3kT}{m}}$ và $V_{xs} = \sqrt{\frac{2kT}{m}}$.

36. Từ bài 34 ta đã có :

$$dN(v) = 4\pi N \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^2 dv.$$

Gọi số hạt khí lí tưởng có vận tốc nằm trong khoảng $0 \leq v \leq v_{xs}$ là $\mathcal{N}$, ta có :

$$\mathcal{N} = 4\pi N \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \int_0^{V_{xs}} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^2 dv$$

$$\mathcal{N} = 4\pi N \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{3/2} \int_0^{V_{xs}} e^{-\alpha v^2} v^2 dv,$$

với $v_{sx} = \sqrt{\frac{2kT}{m}} = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}$

Tính tích phân từng phần, ta được :

$$\int_0^{1/\sqrt{\alpha}} e^{-\alpha v^2} v^2 dv = -\frac{1}{2\alpha^{3/2}} e^{-1} + \frac{1}{2\alpha} \int_0^{1/\sqrt{\alpha}} e^{-\alpha v^2} dv$$

Đặt $t = \sqrt{\alpha} \cdot v$, ta có :

$$\frac{1}{2\alpha} \int_0^{1/\sqrt{\alpha}} e^{-\alpha v^2} dv = \frac{1}{2\alpha^{3/2}} \int_0^1 e^{-t^2} dt.$$

$$\text{Vậy } \mathcal{N} = \frac{2N}{\sqrt{\pi}} \left[\int_0^1 e^{-t^2} dt - e^{-1} \right]$$

Sử dụng công thức tích phân sai số

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt = \text{erf}(x), \text{ ta có}$$

$$\mathcal{N} = N \left[\text{erf}(1) - \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-1} \right]$$

Tra bảng, ta dễ dàng có $\frac{\mathcal{N}}{N} \approx 43\%$.

37. Từ kết quả của bài 34 thay $\varepsilon = \frac{mv^2}{2}$, ta thu được

$$dW(\varepsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi}(kT)^3} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon$$

38. Sử dụng kết quả bài 37, ta có

$$\mathcal{N} = \frac{2n}{\sqrt{\pi}(kT)^3} \int_{\varepsilon}^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon.$$

Tính toán giống bài 36 ta có :

$$\mathcal{N} = \frac{\sqrt{6}}{\pi} N e^{-3/2} + 1 - \text{erf}\left(\sqrt{\frac{3}{2}}\right) \approx 0,39N.$$

39. Chọn hệ toạ độ trụ có trục z hướng theo $v_{//}$, ta có

$$dv_x dv_y dv_z = \rho d\rho d\varphi dz = v_{\perp} dv_{\perp} dv_{//} d\varphi.$$

Thay vào biểu thức đã có trong bài 33 và tích phân theo φ từ 0 đến 2π .

$$d\omega(v_{//}, v_{\perp}) = 2\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{m(v_{\perp}^2 + v_{//}^2)}{2kT}} v_{\perp} dv_{\perp} dv_{//}$$

Số phân tử dn tương ứng là :

$$dn = 2\pi \left(\frac{m}{\pi kT} \right)^{3/2} n e^{-\frac{m(v_{\perp}^2 + v_{\parallel}^2)}{2kT}} v_{\perp} dv_{\perp} dv_{\parallel}.$$

40. Theo bài 37, ta có :

$$dW(\varepsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi}(kT)^3} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = f(\varepsilon) d\varepsilon$$

Lấy đạo hàm bậc nhất của hàm $f(\varepsilon)$ theo ε và đặt bằng không ta có :

$$e^{-\varepsilon/kT} \left(-\frac{1}{kT} \right) \sqrt{\varepsilon} + \frac{1}{2\sqrt{\varepsilon}} e^{-\varepsilon/kT} = 0,$$

do đó $\varepsilon = \frac{kT}{2}$. Vì đạo hàm bậc hai của hàm phân bố tại điểm này nhỏ hơn không nên :

$$\varepsilon_{xs} = \frac{kT}{2}$$

Theo bài 35 $v_{xs} = \sqrt{\frac{2kT}{m}}$. Vậy $\varepsilon_{xs} \neq \frac{1}{2} m v_{xs}^2$.

41. Từ bài 33 ta có :

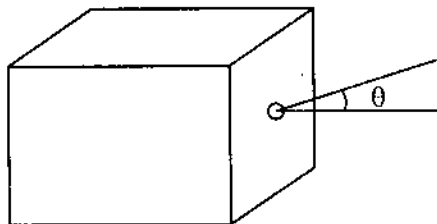
$$d\omega(v_x, v_y, v_z) = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2kT}} dv_x dv_y dv_z.$$

Khi chuyển sang tọa độ cầu $dv_x dv_y dv_z = v^2 \sin\theta d\theta d\phi dv$ và tích phân theo $d\phi$ từ 0 đến 2π , ta có :

$$d\omega(v, \theta) = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} 2\pi v^2 dv d\theta$$

Gọi mật độ hạt trong bình là $n = \frac{N}{V}$.

Các hạt bay qua lỗ theo hướng θ trong một đơn vị thời gian nằm trong hình trụ đáy là S , đường sinh là v (chiều cao là $v \cos \theta$), (h. 4.8).



Hình 4.8

Vậy số hạt có thể bay ra ngoài bình theo hướng θ sẽ là :

$$dN(\theta, v) = nSv \cos \theta d\omega(v, \theta)$$

$$dN(\theta, v) = nS \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} 2\pi v^3 \sin \theta \cos \theta dv d\theta$$

Tích phân theo tất cả các giá trị vận tốc từ 0 đến ∞ ta được :

$$dN(\theta, v) = 2\pi nS \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^3 dv \sin \theta \cos \theta d\theta$$

Ta đã biết

$$4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^3 dv = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} = \bar{v}.$$

Vậy

$$dN(\theta) = \frac{1}{2} nS \bar{v} \sin \theta \cos \theta d\theta.$$

42. Số phân tử ôxi có hình chiếu vận tốc trong quãng

$$v_x, v_x + \Delta v_x \text{ là } \Delta n = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} e^{-\frac{mv_x^2}{2kT}} \Delta v_x.$$

Thay $T = (27 + 273)^\circ\text{K} = 300^\circ\text{K}$

$$\Delta v_x = 1 \text{ m/s};$$

ta được $\frac{\Delta n}{n} \approx 2,89 \cdot 10^{-4}.$

Số phân tử có độ lớn vận tốc trong khoảng $v, v + \Delta v$ là

$$\Delta n = 4\pi n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} \Delta v.$$

Thay số vào ta cũng có :

$$\frac{\Delta n}{n} \approx 3,32 \cdot 10^{-4}.$$

43. Số phân tử trong một đơn vị thể tích có vận tốc v , theo hướng φ và θ là :

$$dn = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^2 \sin\theta d\theta d\varphi dv,$$

trong đó $dV = v^2 \sin\theta d\theta d\varphi dv$ là yếu tố thể tích trong tọa độ cầu. Theo bài 41, số phân tử có vận tốc đã cho đập vào 1cm^2 thành bình dưới góc θ, φ trong 1 giây là

$$dn_1 = v \cos\theta dn$$

Số phân tử có vận tốc đã cho va chạm vào thành bình dưới một góc bất kì là

$$\begin{aligned} dn_2 &= n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} v^3 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta \cos\theta d\theta \\ &= n\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} v^3 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv. \end{aligned}$$

Tích phân theo góc θ lấy từ 0 đến $\frac{\pi}{2}$ và khi $\theta > \frac{\pi}{2}$ các phân tử đi khỏi thành bình.

44. Số va chạm của các phân tử có vận tốc v_x vào 1cm^2 thành bình trong 1 giây bằng số các phân tử có vận tốc v_x nằm trong hình trụ thể tích v_x . Gọi số va chạm là dv , ta có :

$$dv = v_x dn_x = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} v_x e^{-\frac{mv_x^2}{2kT}} dv_x$$

Số va chạm toàn phần v vào 1cm^2 thành bình trong một giây là :

$$v = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} \int_0^\infty v_x e^{-\frac{mv_x^2}{2kT}} dv_x = \frac{n}{4} \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} = \frac{n\bar{v}}{4}.$$

45. Tương tự bài 42, ta gọi số phân tử hiđrô có vận tốc trong khoảng $v, v + \Delta v$ là $\Delta n(v)$, với $\Delta v = 10\text{m/s}$, ta có

$$\frac{\Delta n}{n} \approx 5,1 \cdot 10^{-3}.$$

46. Tương tự bài trên $\frac{\Delta n}{n} \approx 1,09 \cdot 10^{-2}.$

47. Theo công thức phong vũ biểu áp suất của không khí ở nhiệt độ cao h là :

$$p_h = p_o e^{-mgh/kT},$$

vì

$$\frac{p_h}{p_o} = \frac{1}{3} \quad h = \frac{kT}{mg} \ln 3 \approx 8,6\text{km}.$$

48. Theo phân bố Bônxơman trong trường lực :

$$\bar{Z} = \frac{\int_0^{\infty} ze^{-mgh/kT} dz}{\int_0^{\infty} e^{-mgh/kT} dz} \approx 7,85 \text{ km.}$$

49. Thế năng trong trường trọng lực là $u = mgz$ với z là độ cao trên mặt đất. Vậy :

$$\bar{u} = \frac{\int_0^h mgze^{-mgz/kT} dz}{\int_0^h e^{-mgz/kT} dz} = kT \left(1 - \frac{mgh}{e^{mgh/kT} - 1} \right).$$

50. Số phân tử trong cột không khí có độ cao h là

$$\begin{aligned} n(h) &= \int_0^h n(z) dz = \int_0^h n_0 e^{-mgz/kT} dz = \\ &= n_0 \frac{kT}{mg} \left(1 - e^{-mgh/kT} \right). \end{aligned}$$

Thay các chiều cao tương ứng

$h = \infty$	$n_{\infty} = 35 \text{ mol}$
$h = 1000 \text{ m}$	$n(1000)/n_{\infty} = 0,12$
$h = 10000 \text{ m}$	$n(10000)/n_{\infty} = 0,72$
$h = 80000 \text{ m}$	$n(80000)/n_{\infty} \approx 0,99995$

51. Sử dụng kết quả bài 50, $n_{\infty} = 35 \text{ mol}$.

Phân tử lượng của không khí là 29. Khối lượng của cột không khí là

$$m = \mu n_{\infty} = 1015g \approx 1kg$$

Trọng lượng

$$P = mg = 9,8N.$$

52. Thế năng của một phân tử riêng rẽ có khối lượng m nằm cách tâm hấp dẫn M một khoảng r là

$$U(r) = \gamma \frac{mM}{r} \quad R \leq r \leq \infty$$

(γ là hằng số hấp dẫn). Một cách hình thức, phân bố Bônxơman có thể viết : $n(r) = A \exp \left\{ \frac{\gamma m M}{k T r} \right\}$.

Thành thử $n(\infty) = A \neq 0$

và
$$\int_R^{\infty} n(r) 4\pi r^2 dr = \infty.$$

Vậy hệ không thể ở trạng thái cân bằng nhiệt và việc áp dụng phân bố Bônxơman ở đây là không hợp lí.

53. 1) Hàm Haminton của khí lí tưởng là :

$$H = \sum_{k=1}^N \left[\frac{p_k^2}{2m} + U_k(q) \right]$$

$$U_k(q) = \begin{cases} 0 & \text{với } q \text{ ở bên trong } V \\ \infty & \text{với } q \text{ ở ngoài } V. \end{cases}$$

Tích phân trạng thái có dạng :

$$Z = \frac{1}{N!} Z_k^N$$

$$Z_k = \int e^{-\frac{u}{kT}} dx dy dz \int e^{-\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2mkT}} dp_x dp_y dp_z = \\ = V(2\pi mkT)^{3/2}$$

là tích phân trạng thái đối với một hạt khí lí tưởng.

$$2) F = -kT/\ln Z = -kTN \left[\frac{3}{2} \ln(2\pi mkT) + \ln V - \ln N \right].$$

$$3) p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = \frac{NkT}{V}.$$

$$4) S = \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = Nk/\ln V + \frac{3}{2} Nk/\ln T + S_0.$$

$$\text{với } S_0 = \frac{3}{2} Nk/\ln(2\pi km) + \frac{3}{2} kN - kN/\ln N.$$

$$5) U = F + TS = \frac{3}{2} NkT.$$

$$6) C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \frac{3}{2} kN = \frac{3}{2} R.$$

54. Tích phân trạng thái Z của một hạt có dạng :

$$Z = V \int_0^\infty e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} 4\pi p^2 dp = \pi V C^{3/4} \int_0^\infty e^{-\varepsilon/kT} \varepsilon^{-\frac{1}{4}} d\varepsilon$$

Kí hiệu $\alpha = \frac{1}{kT}$ và $n = -\frac{1}{4}$, ta nhận được tích phân

$$\int_0^\infty e^{-\alpha \varepsilon} \varepsilon^n d\varepsilon = \frac{\Gamma(n+1)}{\alpha^{n+1}},$$

trong đó $\Gamma(n+1)$ là hàm gamma Ôle (Euler) xác định bằng tra bảng. Tích phân trạng thái Z của khí lí tưởng là :

$$Z = V^N \left[\pi e^{-3/4} \Gamma\left(\frac{3}{4}\right) \right]^N \left(\frac{kT}{N!} \right)^{3N/4}$$

Phương trình trạng thái của chất khí là :

$$p = kT \left(\frac{\partial Z}{\partial V} \right)_T = \frac{NkT}{V}.$$

55. Ta có tích phân trạng thái

$$Z = \frac{1}{N!} Z_k^N \text{ với}$$

$$Z_k = V \int_0^\infty e^{-\varepsilon/kT} 4\pi p^2 dp = 4\pi V \int_0^\infty e^{-\varepsilon/kT} p^2 dp$$

$$p = \frac{\varepsilon}{c}, dp = \frac{d\varepsilon}{c}, p^2 = \frac{\varepsilon^2}{c^2}$$

$$Z_k = \frac{4\pi}{c^3} V \int_0^\infty e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \varepsilon^2 d\varepsilon = \frac{4\pi}{c^3} V \Gamma(3) k^3 T^3,$$

hàm gamma $\Gamma(3) = 2$

$$Z_k = \frac{8\pi V}{c^3} k^3 T^3$$

Vậy
$$Z = \frac{1}{N!} \left(\frac{8\pi V k^3 T^3}{c^3} \right)^N$$

$$F = -kT/\ln Z = kT/\ln N! - NkT/\ln \frac{8\pi V k^3 T^3}{c^3}$$

Vì N lớn, ta dùng công thức Steecling $N! \approx \left(\frac{N}{e}\right)^N$

$$F = NkT(\ln N - \ln c) - NkT \ln \frac{8\pi V k^3 T^3}{c^3}$$

$$F = - NkT \left(\ln \frac{8\pi k^3 T^3 V}{Nc^3} + 1 \right)$$

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = \frac{NkT}{V}.$$

56. Đối với khí lí tưởng đặt trong trường lực, ta có :

$$Z = Z_{Mx} Z_B,$$

trong đó Z_{Mx} là tích phân thống kê tương ứng với phân bố Macxoen còn Z_B là tích phân thống kê tương ứng với phân bố Bônxơman.

Ta đã có

$$Z_{Mx} = \frac{\sigma^N}{N!} (2\pi mkT)^{3N/2}$$

$$Z_B = \left(\int_0^h e^{-\frac{mgz}{kT}} dz \right)^N = \left[\frac{kT}{mg} \left(1 - e^{-\frac{mgh}{kT}} \right) \right]^N$$

Thay $N! \approx \left(\frac{N}{e}\right)^N$ vào Z_{Mx} và Z_B rồi thay cả vào Z , ta có :

$$Z = \left(\frac{e}{N} \right)^N (\sigma)^N (2\pi mkT)^{3N/2} \left[\frac{kT}{mg} \left(1 - e^{-\frac{mgh}{kT}} \right) \right]^N.$$

Từ đó :

$$F = -NkT/n \frac{e}{N} (2\pi mkT)^{3/2} - NkT/n \left[\frac{kT\sigma}{mg} \left(1 - e^{-\frac{mgh}{kT}} \right) \right]$$

$$U = F - T \frac{\partial F}{\partial T} = \frac{5}{2} NkT - \frac{Nmgh}{e^{\frac{mgh}{kT}} - 1}$$

57. Trong tích phân thống kê ở bài trên, ta thay $V = L^3$, $h = L$, ta được :

$$Z = \left(\frac{e}{N} \right)^N (L^2)^N (2\pi mkT)^{3N/2} \left[\frac{kT}{mg} \left(1 - e^{-\frac{mgL}{T}} \right) \right]^N$$

Từ đó ta có

$$F = -NkT/n \frac{e}{N} (2\pi mkT)^{3/2} - NkT/n \left[\frac{kTL^2}{mg} \left(1 - e^{-\frac{mgL}{kT}} \right) \right].$$

Tính $p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T$, với $V = L^3$, ta dễ dàng rút ra

$$p = \frac{2}{3} \frac{NkT}{L^3} \left[1 + \frac{mgL}{2kT} \frac{1}{e^{\frac{mgL}{kT}} - 1} \right]$$

58. Phân phụ thuộc tọa độ của tích phân thống kê Z là :

$$Z = (Z_1)^{N_1} (Z_2)^{N_2},$$

trong đó

$$Z_i = \sigma \int_0^h e^{-\frac{m_i g z}{kT}} dz = \frac{\sigma kT}{m_i g} \left(1 - e^{-\frac{m_i g h}{kT}} \right)$$

$$i = 1, 2.$$

Theo định luật Đantôn $p = p_1 + p_2$; $p_i = - \left(\frac{\partial F_i}{\partial V} \right)_T$, cũng như

các bài trên, ta có :

$$p = \sum_{i=1}^2 \frac{N_i}{\sigma} \frac{m_i g}{e^{\frac{m_i g h}{kT}} - 1}$$

Tương tự bài 56, ta có :

$$\bar{U} = F - T \frac{\partial F}{\partial T} = \sum_{i=1}^2 N_i \left(kT - \frac{m_i g h}{e^{\frac{m_i g h}{kT}} - 1} \right)$$

Ta chọn trục z theo phương của trường lực và kí hiệu z_c là toạ độ khối tâm. Theo định nghĩa, ta có :

$$Mgz_c = \bar{U}$$

với $M = N_1 m_1 + N_2 m_2$ nên :

$$z_c = \frac{1}{(N_1 m_1 + N_2 m_2)g} \sum_{i=1}^2 N_i \left(kT - \frac{m_i g h}{e^{\frac{m_i g h}{kT}} - 1} \right).$$

59. Phân tử AB quay quanh khối tâm C của nó. Năng lượng quay toàn phần bằng tổng năng lượng của chuyển động quay của các nguyên tử khối lượng m_A và m_B quanh trục Oz với vận tốc góc $d\varphi/dt$ (h. 4.9) và năng lượng quay toàn bộ phân tử với vận tốc góc $d\theta/dt$.

Mômen quán tính của phân tử khí đối với khối tâm là :

$$I = m_A r_A^2 + m_B r_B^2 = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} (r_A + r_B)^2,$$

trong đó $r_A = CA$, $r_B = CB$

Mômen quán tính của phân tử đối với trục Oz đi qua khối tâm được biểu diễn bằng hệ thức :

$$I_{\alpha} = m_A(Aa)^2 + m_B(Bb)^2 = m_A(r_A \sin \theta)^2 + m_B(r_B \sin \theta)^2 = I \sin^2 \theta$$

Động năng quay quanh trục Oz, E_{α} là :

$$\begin{aligned} E_{\alpha} &= \frac{1}{2} [m_A (r_A \sin \theta)^2 + m_B (r_B \sin \theta)^2] \frac{d\varphi}{dt} = \\ &= \frac{1}{2} I \sin^2 \theta \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \end{aligned}$$

Động năng quay E_{β} với vận tốc $d\theta/dt$ là :

$$E_{\beta} = \frac{1}{2} m_A \left(r_A \frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} m_B \left(r_B \frac{d\theta}{dt} \right)^2 = \frac{1}{2} I \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2$$

Năng lượng toàn phần ε khi đó có dạng

$$\begin{aligned} \varepsilon &= E_{\alpha} + E_{\beta} \\ &= \frac{1}{2} I (\dot{\theta}^2 + \dot{\varphi}^2 \sin^2 \theta) \end{aligned}$$

Đạo hàm theo θ và φ ta nhận được các xung lượng suy rộng

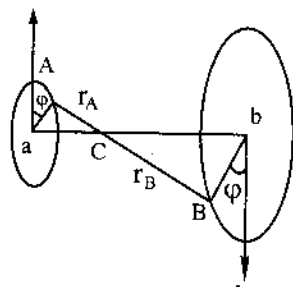
p_{θ} và p_{φ}

$$p_{\theta} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \dot{\theta}} = I \dot{\theta}$$

$$p_{\varphi} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \dot{\varphi}} = I \dot{\varphi} \sin^2 \theta.$$

Thành thử

$$\varepsilon = \frac{1}{2I} \left(p_{\theta}^2 + \frac{p_{\varphi}^2}{\sin^2 \theta} \right).$$



Hình 4.9

60. Từ bài trên ta có

$$\begin{aligned}
 Z &= \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{kT} \left(\frac{p_\theta^2}{2I} + \frac{p_\varphi^2}{2I \sin^2 \theta} \right)} dp_\varphi dp_\theta \\
 &= 2\pi \int_0^\pi d\theta \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{kT} \left(\frac{p_\theta^2}{2I} + \frac{p_\varphi^2}{2I \sin^2 \theta} \right)} dp_\varphi dp_\theta = \\
 &= 2\pi \sqrt{2\pi kTI} \sqrt{2\pi kTI} \int_0^\pi \sin \theta d\theta = \\
 &= 4\pi \cdot 2\pi IkT = 8\pi^2 IkT
 \end{aligned}$$

Năng lượng tự do tương ứng sẽ là :

$$F_q = -kT/\ln Z = -kT/\ln 8\pi^2 IkT.$$

$$\text{Entropi } S_q = - \left(\frac{\partial F_q}{\partial T} \right)_V = k + k/\ln 8\pi^2 IkT$$

$$\text{và nhiệt dung } C_{vq} = T \frac{\partial S_q}{\partial T} = k.$$

61. Theo bài 26 ta có :

$$W(E) = A e^{-E/kT} \Omega(E)$$

với mật độ trạng thái tỉ lệ với $E^{\frac{3N}{2}-1}$. Do đó năng lượng xác suất nhất E_{xs} tương ứng với cực đại của hàm

$$-\frac{1}{kT} e^{-\frac{1}{kT} E^{\frac{3N}{2}-1}} + \left(\frac{3N}{2} - 1 \right) E^{\frac{3N}{2}-2} e^{-\frac{E}{kT}} = 0$$

Do đó ta có :

$$E_{xs} = \left(\frac{3N}{2} - 1 \right) kT \approx \frac{3}{2} NkT, \text{ (vì } N \gg 1 \text{)}.$$

Giá trị trung bình theo phân số chính tắc là :

$$\begin{aligned}\bar{E} &= \frac{\int_0^{\infty} e^{-\frac{E}{kT}} E^{\frac{3N}{2}} dE}{\int_0^{\infty} e^{-\frac{E}{kT}} E^{\frac{3N}{2}-1} dE} = kT \frac{\Gamma\left(\frac{3N}{2} + 1\right)}{\Gamma\left(\frac{3N}{2}\right)} \\ &= \frac{3}{2} NkT.\end{aligned}$$

62. Sử dụng kết quả bài 53 vào từng chất khí trước khi hỗn hợp, ta có :

$$S_1^0 = N_1 k/n \frac{V_1}{N_1} + N_1 f(T)$$

$$S_2^0 = N_2 k/n \frac{V_2}{N_2} + N_2 f(T).$$

Entropi toàn phần trước hỗn hợp là $S^0 = S_1^0 + S_2^0$. Sau khi hỗn hợp mỗi chất khí đều có thể tích là $V_1 + V_2$. Entropi của các khí sau hỗn hợp là :

$$S_1 = N_1 k/n \frac{V_1 + V_2}{N_1} + N_1 f(T)$$

$$S_2 = N_2 k/n \frac{V_1 + V_2}{N_2} + N_2 f(T).$$

Entropi toàn phần sau khi hỗn hợp các khí $S = S_1 + S_2$.

$$\Delta S = S - S^0 = N_1 k/n \frac{V_1 + V_2}{V_1} + N_2 k/n \frac{V_1 + V_2}{V_2} > 0$$

63. Ta đã biết năng lượng tự do của khí lí tưởng

$$F_0 = -NkT \left[\frac{3}{2} \ln(2\pi mkT) + \ln V - \ln N \right]$$

Sự quay của bình tương đương với việc xuất hiện trường ngoài xuyên tâm có thế năng $U = -\frac{1}{2} m\omega^2 r^2$

trong đó r là khoảng cách của hạt đến trục quay.

Khi quay, tổng thống kê của một nguyên tử có dạng :

$$Z = \int_V \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2mkT}} e^{-\frac{U}{kT}} dV$$

Do đó năng lượng tự do của khí lí tưởng là :

$$F = F_0 - NkT/n \int_V e^{-\frac{U}{kT}} dV$$

Tính tích phân

$$\begin{aligned} \int_V e^{-\frac{U}{kT}} dV &= \int_0^R \int_0^h \int_0^h e^{-\frac{m\omega^2 r^2}{2kT}} 2\pi r dr = h\pi \int_0^R e^{-\frac{m\omega^2 r^2}{2kT}} dr^2 \\ &= \pi h \frac{2kT}{m\omega^2} e^{-\frac{m\omega^2 r^2}{2kT}} \Big|_0^R = \frac{\pi h 2kT}{m\omega^2} \left(e^{-\frac{m\omega^2 R^2}{2kT}} - 1 \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Vậy } F &= F_0 - NkT/n \frac{1}{\pi R^2 h} \frac{\pi h 2kT}{m\omega^2} \left(e^{-\frac{m\omega^2 R^2}{2kT}} - 1 \right) \\ &= F_0 - NkT/n \frac{2kT}{m\omega^2 R^2} \left(e^{-\frac{m\omega^2 R^2}{2kT}} - 1 \right) \end{aligned}$$

Từ đó ta có nội năng tương ứng là

$$E = F - T \frac{\partial F}{\partial T} = E_0 - \frac{Nm\omega^2 R^2}{2 \left(1 - e^{-\frac{m\omega^2 R^2}{2kT}} \right)} + NkT.$$

64. Giả sử hệ có f bậc tự do. Tích phân chuẩn hoá đối với phân bố chính tắc có dạng

$$1 = A \int \dots \int \exp\left(-\frac{H}{kT}\right) dq_1 \dots q p_f$$

Lấy tích phân từng phần theo q_1 chẳng hạn, ta có :

$$\begin{aligned} 1 = A \int \dots \int \left[q_1 \exp\left(-\frac{H}{kT}\right) \right]_{-\infty}^{+\infty} dq_2 \dots dp_f \\ + \frac{A}{kT} \int \dots \int q_1 \frac{\partial H}{\partial q_1} \exp\left(-\frac{H}{kT}\right) dq_1 \dots q p_f \end{aligned}$$

Theo điều kiện bài toán thì tích phân thứ nhất bằng không, nên :

$$\overline{q_1 \frac{\partial H}{\partial q_1}} = kT$$

hay tổng quát

$$\frac{1}{2} \overline{q_i \frac{\partial H}{\partial q_i}} = \frac{1}{2} kT.$$

65. Hàm Haminton của dao động tử điều hoà là

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2} q^2$$

Từ đó

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \frac{\partial H}{\partial q} = kq ;$$

$$p \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p^2}{m}, \quad q \frac{\partial H}{\partial q} = kq^2$$

Theo định lý virian

$$\frac{1}{2} p \frac{\partial \overline{H}}{\partial p} = \frac{1}{2} q \frac{\partial \overline{H}}{\partial q} = \frac{1}{2} kT$$

Vậy

$$\frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{k}{2} \overline{q^2} = kT, \text{ nên } \overline{\epsilon} = \overline{H} = kT.$$

66. Vì $U = ax^4$, nên $\frac{\partial H}{\partial x} = 4ax^3$, $\frac{\partial H}{\partial x} = 4ax^3$.

$$\frac{1}{2} x \frac{\partial \overline{H}}{\partial x} = 2ax^4 = 2\overline{U} = \frac{1}{2} kT \Rightarrow \overline{U} = \frac{1}{4} kT$$

Vậy $\overline{E} = \overline{H} = \frac{1}{2} kT + \frac{1}{4} kT = \frac{3}{4} kT$.

67. $U(q) = \alpha q^n$ (n là số tự nhiên), tương tự các bài trên.

$$\frac{\partial U(q)}{\partial q} = 2\alpha n q^{2n-1}, \quad q \frac{\partial U(q)}{\partial q} = 2\alpha n q^{2n} = 2nU(q)$$

$$q \frac{\partial \overline{U(q)}}{\partial q} = 2n \overline{U(q)} = kT \rightarrow \overline{U(q)} = \frac{kT}{2n}$$

$$\overline{E} = \frac{1}{2} kT + \frac{1}{2} \frac{kT}{n} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{n} \right) kT.$$

68. Tích phân trạng thái của hệ dao động tử phi điều hoà có dạng:

$$Z = \frac{1}{N!} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{p^2}{2mkT}} dp \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\alpha q^2}{kT} - \frac{\beta q^4}{kT}} dq \right]^{3N}$$

Ta dễ dàng tính tích phân thứ nhất :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{p^2}{2mkT}} dp = (2\pi mkT)^{1/2}$$

vì $q^2 \leq \frac{kT}{\alpha}$ nên $\frac{\beta q^4}{kT} \ll \frac{\alpha^2 q^4}{(kT)^2} \ll 1$, cho nên ta phân tích hàm mũ trong tích phân thứ hai thành chuỗi và giới hạn ở số hạng tỉ lệ với q^4 , ta được

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\alpha q^2}{kT}} e^{-\frac{\beta q^4}{kT}} dq = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\alpha q^2}{kT}} \left(1 + \frac{\beta q^4}{kT} + \dots \right) dq =$$

$$\sqrt{\frac{\pi kT}{\alpha}} \left(1 + \frac{3}{4} \frac{\beta}{\alpha^2} kT + \dots \right)$$

Ở đây ta đã sử dụng công thức tích phân Poatxông, vậy tích phân trạng thái có dạng :

$$Z = \frac{1}{N!} \left[\pi kT \left(1 + \frac{3}{4} \frac{\beta}{\alpha^2} kT + \dots \right)^{3N} \left(\frac{2m}{\alpha} \right)^{3N/2} \right]$$

Năng lượng của 1 mol vật rắn là :

$$E = kT^2 \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T} \right)_V = 3RT \left(1 + \frac{3}{4} \frac{\beta}{\alpha^2} kT + \dots \right).$$

Nhiệt dung C_V là:

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = 3R \left(1 + \frac{3}{2} \frac{\beta}{\alpha^2} kT + \dots \right).$$

69. Tương tự như bài trên, ta khai triển số hạng phi điều hoà và chỉ giữ lại 2 số hạng đầu tiên, ta có :

$$e^{\beta q^3} \approx 1 + e^{\beta q^3} + \dots ; e^{\gamma q^4} = 1 + \gamma q^4 + \dots$$

$$e^{\beta q^3} \cdot e^{\gamma q^4} \approx 1 + \beta q^3 + \gamma q^4 + \dots$$

Tính toán hoàn toàn giống như trên, ta được :

$$C_V^{\text{ph}} = 2k^2 T \delta \quad \text{với} \quad \delta = \frac{15}{2} \frac{\beta^2}{\alpha^2} - \frac{3}{\alpha^2} \gamma.$$

70. Trong điều kiện gần đúng mật độ nhỏ, tích phân trạng thái của khí thực là :

$$Z = Z_{\text{li}} \left(1 + \frac{N^2}{2V} \beta \right),$$

với $\beta = -8V_o + \frac{8U_o V_o}{kT}$, $V_o = \frac{4\pi r_o^3}{3}$ là thể tích của một phân tử. Kí

hiệu $n = \frac{N}{V}$ và $b = 4NV_o$, ta được :

$$E = E_o - \frac{nbU_o}{1 + nb \left(\frac{U_o}{kT} - 1 \right)}$$

$$C = C_{\text{vli}} - k \left(\frac{nbU_o}{kT} \right)^2 \frac{1}{\left[1 + nb \left(\frac{U_o}{kT} - 1 \right) \right]^2}$$

Ta nhận thấy nhiệt dung giảm theo nhiệt độ.

71. Ta nhận xét rằng tại điểm tới hạn, đường cong Van de Vansơ trở thành đường bậc ba và điểm uốn là điểm tới hạn ứng với nhiệt độ tới hạn T_c , thể tích tới hạn V_c và áp suất tới hạn p_c . Lấy đạo hàm phương trình Van de Vansơ :

$$\left(p + \frac{a}{V^2} \right) (V - b) = RT$$

hạng nhất ta được :

$$\frac{\partial p}{\partial V} = -\frac{RT}{(V - b)^2} + \frac{2a}{V^3} = 0$$

lấy tiếp đạo hàm hạng hai

$$\frac{\partial^2 p}{\partial v^2} = \frac{2RT}{(V-b)^3} - \frac{6a}{V^4} = 0$$

Giải hai phương trình trên ta tìm được

$$V_c = 3b, p_c = \frac{a}{27b^2}, RT_c = \frac{8a}{27b}$$

Ta thay trong phương trình Van de Vanxơ

$$\pi = \frac{p}{p_c}; \omega = \frac{V}{V_c}; \tau = \frac{T}{T_c}$$

ta dễ dàng nhận được :

$$\left(\pi + \frac{3}{\omega^2} \right) (3\omega - 1) = 8\tau.$$

72. Sử dụng kết quả bài trên, ta có :

$$p_c = \frac{a}{27b^2} = \frac{2,03}{27(0,0183)^2} = 225 \text{at}$$

$$V_c = 3b = 3 \cdot 0,0183 = 0,055 \text{m}^3/\text{kmol}$$

$$T_c = \frac{8a}{27Rb} = \frac{8 \cdot 2,03 \cdot 9,81 \cdot 10^4}{27 \cdot 5 \cdot 10^3 \cdot 0,0183} = 643^\circ \text{K}$$

73. Từ tích phân trạng thái

$$Z = Z_h \left(1 + \frac{N^2}{2V} \beta \right)$$

ta tìm được :

$$E_{th} = kT^2 \frac{\partial \ln Z_h}{\partial t} + kT^2 \frac{\partial \ln \left(1 + \frac{N^2 \beta}{2V} \right)}{\partial t}$$

$$\text{Ta đã biết } E_{th} = kT^2 \frac{\partial \ln Z_h}{\partial t} = \frac{3}{2} NkT.$$

Để tính số hạng thứ hai, ta khai triển $\ln\left(1 + \frac{N^2\beta}{2V}\right)$ thành chuỗi

$$\text{và giới hạn ở số hạng đầu tiên } \ln\left(1 + \frac{N^2\beta}{2V}\right) \approx \frac{N^2\beta}{2V} = \frac{N^2}{V} \left(\frac{a}{kT} - 4V_0\right),$$

trong đó V_0 là thể tích của 1 phân tử. Khi đó

$$E_{th} = \frac{3}{2}NkT - \frac{N^2a}{V}$$

Vậy nhiệt dung đẳng tích của khí thực là :

$$C_{vth} = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_v = \frac{3}{2}Nk$$

bằng nhiệt dung của khí lí tưởng.

Tương tự năng lượng tự do là :

$$F_{th} = -kT \ln Z = F_h - \frac{N^2kT}{V} \left(\frac{a}{kT} - b\right)$$

Entropi là :

$$S_{th} = -\left(\frac{\partial F_{th}}{\partial T}\right)_v = S_h - \frac{kN^2b}{V}.$$

Thế nhiệt động Gipsơ :

$$\phi_{th} = E_{th} + pV - TS_{th} = \phi_h - \frac{N^2a}{V} + \frac{TN^2kb}{V}$$

74. Sử dụng kết quả bài 71 và 73, ta có :

$$S = S_h - \frac{kN^2b}{V} = S_h - \frac{N^2k}{V} \frac{kT_c}{8p_c}$$

$$\phi = \phi_h - \frac{N^2a}{V} + \frac{TN^2kb}{V} =$$

$$= \phi_h + \frac{kT_c}{8} \frac{p}{p_c} - \frac{9}{8} \frac{NV_c kT_c}{V}.$$

75. Theo công thức tính hệ số nén đẳng nhiệt

$$\chi = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T.$$

Từ phương trình Van de Vanxơ $\left(p + \frac{a}{V^2} \right) (V - b) = RT$, ta rút

ra:

$$\chi = \frac{1}{RTV(V-b)^2 - \frac{2a}{V^2}} \approx \frac{1}{p} \left(1 - \frac{b}{V} + \frac{a}{pV^2} \right).$$

Bởi vì trong công thức trên V chỉ nằm trong các số hạng hiệu chỉnh nên một cách gần đúng, ta tính nó từ phương trình trạng thái của khí lí tưởng.

$$V = \frac{RT}{p} \text{ với } V = 6,78 \text{ m}^3.$$

Thay các số liệu đã biết vào, ta có $\chi = 0,01 \text{ at}^{-1}$.

76. Ta nhận xét rằng khi dẫn nở chất khí vào chân không năng lượng E của khí không đổi. Theo bài 73, ta có :

$$E = E_h - \frac{N^2 a}{V} = NC_v T - \frac{N^2 a}{V}.$$

$$NC_v T_1 - \frac{N^2 a}{V_1} = NC_v T_2 - \frac{N^2 a}{V_2}.$$

Từ đó

$$T_2 - T_1 = \frac{Na}{C_v} \left(\frac{1}{V_2} - \frac{1}{V_1} \right).$$

77. Ta nhận xét rằng trong quá trình đoạn nhiệt entropi không đổi. Theo bài 73, ta có :

$$S_{th} = S_h + Nk \ln \left(1 - \frac{Nb}{V} \right), \text{ với}$$

$$S_h = Nk \ln V + NC_v \ln T$$

Từ đó

$$NC_v \ln T + Nk \ln V(V - Nb) = \text{const}$$

$$\frac{C_v}{k} \ln T + \ln(V - Nb) = \text{const}$$

$$\ln(V - Nb)^{\frac{C_v}{k}} = \text{const}$$

hay $(V - Nb)^{C_v/k} = \text{const.}$

78. Như ta biết

$$\beta(T) = \frac{1}{2} \int (1 - e^{-\frac{u^2}{kT}}) dV$$

vì $dV = 4\pi r^2 dr$ nên :

$$\beta(T) = \frac{1}{2} \int (1 - e^{-\frac{\alpha}{r^n kT}}) 4\pi r^2 dr$$

Tích phân từng phần trong giới hạn từ 0 đến ∞ ta được :

$$\begin{aligned} \beta(T) &= \frac{1}{2} \frac{4\pi}{3} r^3 (1 - e^{-\frac{\alpha}{r^n kT}}) \Big|_0^\infty - \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{4\pi}{3} \pi r^3 \left(\frac{-\frac{\alpha}{r^n kT}}{n\alpha e^{-\frac{\alpha}{r^n kT}}} \right) dr = \\ &= -\frac{2\pi}{3} \int_0^\infty r^3 \frac{n\alpha}{r^{n+1} kT} e^{-\frac{\alpha}{r^n kT}} dr \end{aligned}$$

Đưa vào kí hiệu : $\frac{\alpha r^{-n}}{kT} = x$, $\frac{\alpha(-n)r^{-(n+1)}}{kT} dr = dx$, ta có :

$$\begin{aligned}\beta(T) &= \frac{2\pi}{3} \left(\frac{\alpha}{kT} \right)^{3/n} \int_0^\infty x^{-\frac{3}{n}} e^{-x} dx \\ &= \frac{2\pi}{3} \left(\frac{\alpha}{kT} \right)^{3/n} \Gamma\left(1 - \frac{3}{n}\right).\end{aligned}$$

79. Ta viết lại phương trình Van de Vanxơ dưới dạng :

$$\frac{pV}{RT} = \frac{V}{V-b} - \frac{a}{VRT}$$

Áp dụng khai triển :

$$\frac{V}{V-b} = 1 + \frac{b}{V} + \frac{b^2}{V^2} + \frac{b^3}{V^3} + \dots,$$

ta có

$$\frac{pV}{RT} = 1 + \frac{B_1}{V} + \frac{B_2}{V^2} + \frac{B_3}{V^3} + \dots$$

trong đó $B_1 = b - \frac{a}{RT}$, $B_2 = b^2$, $B_3 = b^3$.

80. Đối với khí quả cầu rắn, ta có :

$$U(r) = \begin{cases} \infty & \text{khi } r < \sigma \\ 0 & \text{khi } r > \sigma \end{cases}$$

nghĩa là

$$f(r) = \begin{cases} -1 & \text{khi } r < \sigma \\ 0 & \text{khi } r > \sigma, \end{cases}$$

do đó

$$B_2 = -\frac{1}{2} \int_0^\sigma (-1) 4\pi r^2 dr = \frac{2}{3} \pi \sigma^{-3}.$$

81. Nhiệt dung mol của một vật $C_V = CA$, trong đó C là nhiệt dung riêng, A là nguyên tử lượng. Nhiệt dung mol của chì.

$$C'_V = 126.207,21 \approx 26,1 \text{ kJ/kmol.độ}; \text{ của nhôm}$$

$$C''_V = 896.26.98 \approx 24,17 \text{ kJ/kmol.độ}.$$

Nhiệt dung của vật rắn theo định luật Đuylông – Poti (Dulong – Petit) $3R = 3.8,32.10^3 \text{ kJ/kmol.độ} = 24,96 \text{ kJ/kmol.độ}$.

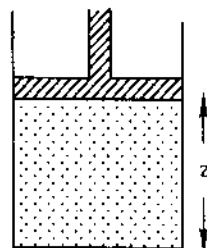
Thành thử nhiệt dung của chì lớn hơn còn nhiệt dung của nhôm gần bằng nhiệt dung vật rắn tính theo định luật Đuylông – Poti.

82. Hàm Haminton của hệ $H' = H(p, q) + H_M$, trong đó $H(p, q)$ là hàm Haminton của chất khí còn H_M là hàm Haminton của pittông (h. 4.10). Hiển nhiên

$$H_M = \frac{p_M^2}{2M} + Mgz,$$

z là độ cao của pittông so với đáy bình. Bởi vì áp suất p của chất khí cân bằng với trọng lượng của pittông nên $Mg = pS$, với S là diện tích của pittông. Bởi vì $Sz = V$ nên $Mgz = pV$

$$\text{và } H'(p, q, p_M, V) = H(p, q) + \frac{p_M^2}{2M} + pV.$$



Hình 4.10

Phân bố chính tắc Gipsơ có dạng :

$$\omega'(p, q, V, p_M) = \exp \left\{ \frac{F - H(p, q) - \frac{p_M^2}{2M} - pV}{kT} \right\}.$$

Tổng thống kê :

$$Z' = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{p_M^2}{2M}} dp_M \int_0^{\infty} e^{-\frac{pV}{kT}} \int_{(p,q)} e^{-\frac{H(p,q)}{kT}} dp dq$$

$$Z' = \sqrt{2\pi MkT} (2\pi mkT)^{3N/2} \int_0^{\infty} e^{-\frac{pV}{kT}} V^N dV$$

$$= N! \sqrt{\frac{M}{m}} (2\pi m)^{\frac{3N+1}{2}} (kT)^{\frac{5N+3}{2}} p^{N-1}$$

Từ đó ta có

$$F = -kT \left[\frac{5N+3}{2} \ln kT - (N+1) \ln p + \text{const} \right]$$

và $V = \frac{(N+1)kT}{p}$, bởi vì $N \gg 1$, ta có phương trình Clapâyron -

Mendêlêep (Clapayron - Mendêlêep) $pV = NkT$.

83. Nếu coi các electron tự do như khí lí tưởng cổ điển thì nhiệt dung mol liên hệ với chuyển động tịnh tiến là $3R/2$. Các nguyên tử dao động của mạng tinh thể có $3N - 6$ bậc tự do và có thể coi như $3N - 6 \approx 3N$ dao động tử điều hoà. Đóng góp của dao động mạng vào nhiệt dung là $3R$. Vậy nhiệt dung nguyên tử của kim loại là $4,5R$.

84. Theo bài 13, thể tích không gian pha ứng với một phân tử khí lí tưởng là :

$$\Gamma_0 = -\frac{4}{3}\pi(2m)^{3/2} v \varepsilon^{3/2}$$

Thể tích không gian pha ứng với khoảng năng lượng $d\varepsilon$ là :

$$d\Gamma_0 = 4\pi V m \sqrt{2m\varepsilon} d\varepsilon$$

Do đó số trạng thái khả dĩ là :

$$\frac{d\Gamma_o}{h^3} = \frac{4\pi V m \sqrt{2m} d\varepsilon}{h^3} = dN(\varepsilon)$$

Số hạt có năng lượng trong khoảng $d\varepsilon$ là :

$$dn = \bar{n}_\varepsilon dN(\varepsilon) = \frac{2\pi V (2m)^{3/2} \varepsilon^{1/2}}{h^3} \bar{n}_\varepsilon d\varepsilon.$$

với

$$\bar{n}_\varepsilon = + \frac{1}{\exp\left\{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right\} \pm 1} g(\varepsilon).$$

$$\text{Đặt } B = \exp\{\alpha\} = \exp\left\{-\frac{\mu}{kT}\right\}$$

thì

$$\bar{n}_\varepsilon = \frac{1}{B \exp\left\{\frac{\varepsilon}{kT}\right\} \pm 1} g(\varepsilon)$$

$$dn = \frac{2\pi V (2m)^{3/2} \varepsilon^{1/2}}{h^3} \frac{d\varepsilon}{B \exp\left\{\frac{\varepsilon}{kT}\right\} \pm 1} g$$

$$N = \int_0^\infty dn = \frac{2\pi V (2m)^{3/2}}{h^3} g \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{B \exp\left\{\frac{\varepsilon}{kT}\right\} \pm 1}$$

Đặt $x = \frac{\varepsilon}{kT}$, ta có :

$$N = \frac{(2\pi m kT)^{3/2}}{h^3} V g \int_0^\infty \frac{x dx}{B \exp x \pm 1} = \frac{(2\pi m kT)^{3/2}}{h^3} g V F(B).$$

Tính tương tự ta có :

$$\bar{E} = \int_0^{\infty} \epsilon dn = \frac{3}{2} NkT \frac{G(B)}{F(B)}.$$

85. Từ kết quả của bài 84 và định luật bảo toàn số hạt, ta có thể viết :

$$\frac{\partial \mu}{\partial T} = - \frac{\frac{\partial N}{\partial T}}{\frac{\partial N}{\partial \mu}} = - \frac{\frac{\partial}{\partial T} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\epsilon} d\epsilon}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} - 1}}{\frac{\partial}{\partial \mu} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\epsilon} d\epsilon}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} - 1}} = - \frac{\int_0^{\infty} \frac{\epsilon - \mu}{kT^2} \frac{e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} \sqrt{\epsilon}}{\left(e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} - 1 \right)^2} d\epsilon}{\int_0^{\infty} \frac{1}{kT} \frac{e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} \sqrt{\epsilon} d\epsilon}{\left(e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} - 1 \right)^2}}$$

Bởi vì đối với Bôzôn $\mu < 0$ ($dn > 0$, $dN(\epsilon) > 0 \rightarrow \mu < 0$) và các biểu thức dưới dấu tích phân là dương cho nên $\frac{\partial \mu}{\partial T} < 0$.

86. Ta có $Z = (Z_{dd})^N$, trong đó

$$Z_{dd} = \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left\{ - \frac{E_n}{kT} \right\}; E_n = h\nu \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$Z_{dd} = \frac{\exp \left\{ - \frac{h\nu}{2kT} \right\}}{1 - \exp \left\{ - \frac{h\nu}{kT} \right\}}$$

Ở đây ta đã tính tổng cấp số nhân vô hạn giảm dần

$\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}n\right\}$ công bội là $q = \exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\}$, số hạng đầu tiên

là $a = 1$ theo công thức :

$$S = \frac{a}{1-q}.$$

87. Năng lượng trung bình :

$$\bar{E} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E \exp\left\{-\frac{E_n}{kT}\right\}}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left\{-\frac{E_n}{kT}\right\}} = \frac{kT^2}{z} \frac{\partial z}{\partial T}$$

$$\bar{E} = N \left[\frac{h\nu}{2} + \frac{h\nu}{\exp\left\{\frac{h\nu}{kT}\right\} - 1} \right].$$

Nhiệt dung

$$C_V = \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_V = Nk \frac{e^{\frac{h\nu}{kT}}}{\left(\exp\left\{\frac{h\nu}{kT}\right\} - 1 \right)^2} \left(\frac{h\nu}{kT} \right)^2.$$

88. Từ bài 87 ta có :

$$F = NkT / n(1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}) + N \frac{h\nu}{2}$$

$$S = - \frac{\partial F}{\partial T} = Nk \left[\frac{h\nu}{kT} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} - \ln(1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}) \right]$$

89. Tổng thống kê của hệ bao gồm N dao động tử hai chiều là :

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) e^{\frac{-h\nu(n+1)}{kT}}$$

Kí hiệu $\frac{h\nu}{kT} = \beta$, ta có :

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) e^{-\beta(n+1)} &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(n+1)} = \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \frac{1}{e^{\beta} - 1} = \frac{e^{\beta}}{(e^{\beta} - 1)^2} \end{aligned}$$

Thành thử biểu thức cuối cùng đối với tổng thống kê có dạng :

$$Z = \frac{e^{\frac{h\nu}{kT}}}{(1 - e^{-h\nu/kT})^2}$$

Do đó năng lượng trung bình và nhiệt dung của hệ được xác định bằng công thức :

$$E = kT^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} = N(h\nu + \frac{2h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1})$$

$$C_V = \frac{1}{2} Nk \left(\frac{h\nu}{kT} \right)^2 \text{Sh}^{-2} \left(\frac{h\nu}{2kT} \right).$$

90. Năng lượng ứng với trạng thái l của rô-ta-tô là :

$$E_l = \frac{h^2}{8\pi^2 I} l(l+1)$$

Bởi vì một trạng thái bất kì của rô-ta-tô suy biến $2l+1$ lần nên :

$$Z_q = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp \left\{ -\frac{E_l}{kT} \right\} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp \left\{ -\frac{h^2 l(l+1)}{8\pi^2 I kT} \right\}.$$

Đối với các nhiệt độ thấp và mômen quán tính I nhỏ, tổng trên thu về 2 số hạng :

$$\lim_{T \rightarrow 0} Z_q = 3e^{-\frac{h}{4\pi^2 I k T}} - 1$$

Còn với $T \gg T_d = \frac{h}{8\pi^2 I k}$ các mức năng lượng coi như liên tục, ta có thể thay đổi tổng bằng tích phân :

$$Z_q = \int_0^{\infty} (2l+1) e^{-\frac{h^2 l(l+1)}{8\pi^2 I k T}} dl = \frac{8\pi^2 I k T}{h^2} = \frac{T}{T_d}$$

91. Tổng thống kê

$$Z = \left(e^{-\frac{\epsilon_0}{kT}} + e^{-\frac{\epsilon_1}{kT}} \right)^N = \left(e^{-\frac{\epsilon_0}{kT}} \left(1 + e^{-\frac{\epsilon_1 - \epsilon_0}{kT}} \right) \right)^N$$

Đặt $T_c = \frac{\epsilon_1 - \epsilon_0}{k}$, ta có $Z = e^{-\frac{N\epsilon_0}{kT}} \left(1 + e^{-\frac{T_c}{T}} \right)^N$

Vậy

$$E = kT^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} = N\epsilon_0 + NkT e^{-\frac{T_c}{T}} \frac{1}{e^{-\frac{T_c}{T}} + 1}$$

$$C_V = Nk_0 \left(\frac{T_c}{T} \right)^2 e^{-\frac{T_c}{T}} \left(1 + e^{-\frac{T_c}{T}} \right)^{-2}$$

92. Theo định nghĩa của thể nhiệt động

$$pV = -\Omega = -kT \sum_i \ln \left(1 - e^{-\frac{\mu - \epsilon_i}{kT}} \right)$$

$$= -KT \int_0^{\infty} \ln \left(1 - e^{\frac{\mu - \epsilon}{kT}} \right) dN(\epsilon),$$

trong đó $dN(\epsilon)$ là số mức nằm trong quãng từ ϵ đến $\epsilon + d\epsilon$. Tích phân theo từng phần, ta nhận được :

$$pV = \int_0^{\infty} \frac{N(\epsilon) d\epsilon}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} - 1}$$

mặt khác

$$E = \int_0^{\infty} \frac{\epsilon \frac{dN}{d\epsilon} d\epsilon}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} - 1}.$$

Nhưng $N(\epsilon) = A\epsilon^n$, trong đó $n = \frac{3}{2}$ đối với các hạt không tương đối nên

$$\epsilon \frac{dN}{d\epsilon} = nN(\epsilon)$$

So sánh biểu thức đối với E và pV , ta có :

$$pV = \frac{E}{n}, pV = \frac{2}{3} E, p = \frac{2}{3} \frac{E}{V}.$$

93. Thế hoá học μ của khí phôtôn bằng không nên

$$F = \mu N - pV = -pV$$

$$\text{Theo bài trên } pV = -kT \sum_i \ln(1 - e^{-\frac{h\nu_i}{kT}})$$

Tổng theo i thực chất là tổng theo tất cả các giá trị của vector sóng q và có thể được thay thế bằng tích phân

$$dN(q) = \frac{4\pi V p^2 dp}{h^3} = \frac{4\pi V \hbar^3 p^2 dp}{h^3} = \frac{4\pi V p^2 dp}{(2\pi)^3}$$

Nếu kể đến hai phương phân cực của photon, ta có

$$\begin{aligned} pV &= -kT \int_0^\infty \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar c q}{kT}} \right)^2 \frac{4\pi q^2}{(2\pi)^3} V dq \\ &= \frac{(kT)^4 V}{\pi^2 (\hbar c)^3} \int_0^\infty \ln(1 - e^{-x}) x^3 dx, \\ &= \frac{(kT)^4 V}{\pi^2 (\hbar c)^3} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx, \text{ trong đó } x = \frac{\hbar c q}{kT}. \end{aligned}$$

Giá trị của tích phân là $\frac{\pi^4}{15}$ nên ta có

$$pV = -F = V \frac{\pi^2 (kT)^4}{45 (\hbar c)^3} = \frac{\sigma}{3} VT^4,$$

trong đó $\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{15 \hbar^3 c^3}$ là hằng số Stêphan – Bôn-xơ-man.

Dễ dàng ta tìm được entropi

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = \frac{4\sigma VT^3}{3}.$$

94. Áp dụng phân bố Bô-xơ – Anh-xtan-gh cho khí photon, ta có số photon thuộc hai loại phân cực khác nhau có tần số từ ν đến $\nu + d\nu$ sẽ bằng

$$dn(\nu) = \frac{\nu 8\pi \nu^2 d\nu}{c^3 \left(\exp \left\{ \frac{\hbar \nu}{kT} \right\} - 1 \right)}$$

Năng lượng của bức xạ ứng với khoảng tần số đó là :

$$dE(\nu) = h\nu dn(\nu) = \frac{8\pi h\nu^2 d\nu}{\left(\exp\left\{\frac{h\nu}{kT}\right\} - 1\right) c^3}$$

Tích phân trong khoảng từ 0 đến ∞ và sử dụng công thức tích phân của bài 93, ta được

$$E = aT^4 V, \text{ với } a = \frac{8\pi^5 k^4}{15c^3 h^3}$$

Dựa vào phương trình Gipsơ – Hemhônơ

$$\frac{\partial\left(\frac{F}{T}\right)}{\partial T} = -\frac{F}{T^2},$$

ta rút ra được năng lượng tự do đối với khí photon

$$F = -T \int \frac{E dT}{T^2} = -Va \frac{T^4}{3}.$$

Từ đó ta tìm được entropi S và áp suất p :

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{4}{3}aVT^3$$

và
$$p = -\frac{\partial F}{\partial V} = a \frac{T^4}{3} = \frac{E}{3V} = \frac{u}{3},$$

với $u = \frac{E}{V}$ là mật độ năng lượng bức xạ.

95. Từ bài trên $C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = 4aVT^3.$

96. Theo bài (94) $S = \frac{4}{3}aVT^3.$

Trong quá trình đoạn nhiệt $\Delta S = 0$, vậy $VT^3 = \text{const.}$

97. Hàm phân bố Fermi

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}$$

Nếu $E - \mu = 0,1\text{eV}$ thì $\frac{E-\mu}{kT} = \frac{0,1}{0,025} = 4$

$$f(E) = \frac{1}{e^4 + 1} = 1,79 \cdot 10^{-2},$$

còn $E - \mu = -0,1\text{eV}$ thì $f(E) = 0,98$.

98. Vì $E = \mu$ nên $f(E) = 0,5$.

99. Ta có $f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}$; $\frac{\partial f(E)}{\partial E} = -\frac{1}{kT} \frac{e^{\frac{E-\mu}{kT}}}{\left(e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1\right)^2}$

Đổi biến số $x = e^{\frac{E-\mu}{kT}}$, $dx = \frac{1}{kT} e^{\frac{E-\mu}{kT}} dE$,

ta có

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial f(E)}{\partial E} dE = \int_0^{\infty} \frac{-dx}{(x+1)^2} = \frac{1}{x+1} \Big|_0^{\infty} = -1.$$

100. $f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}$

Mức Fermi $E - \mu = 0$ và $f(E) = \frac{1}{2}$. Khi $f(E) = 0,20$; ta có

$$e^{\frac{E-\mu}{kT}} = 4 \rightarrow \frac{E-\mu}{kT} = \ln 4 = 1,3863$$

Vậy $\Delta E = 1,3863kT$

Khi $f(E) = 0,80$; ta có $\frac{E-\mu}{kT} = \ln \frac{1}{4} = -1,3863$

Vậy $\Delta E = -1,3863kT$.

101. Số electron có năng lượng nằm giữa E và $E + dE$ là

$$dn = \frac{4\pi(2m)^{3/2} E^{1/2} dE}{h^3}$$

Số toàn phần các electron trong một đơn vị thể tích là

$$\begin{aligned} n &= \int_0^{E_{\max}} dn = \int_0^{E_{\max}} \frac{4\pi(2m)^{3/2} E^{1/2} dE}{h^3} = \\ &= \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \frac{2}{3} E_{\max}^{3/2} \end{aligned}$$

Từ đó

$$E_{\max} = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3}$$

102. Theo bài 101, ta xác định được giá trị của mức Fermi :

$$\mu_0 = \frac{h^2}{2m^*} \left(\frac{3}{8\pi} n \right)^{2/3}$$

trong đó m^* là khối lượng hiệu dụng của electron.

Mặt khác, ta có $n = \frac{N_A}{M} \rho$ với N_A là số Avôgadrô. Vậy

$$m^* = \frac{h^2}{2\mu_0} \left(\frac{3}{8\pi} \frac{N_A}{M} \rho \right)^{2/3} = 11,5 \cdot 10^{-37} \text{ kg.}$$

103. Nhiệt độ Fecmi là $T_F = \frac{\mu_0}{k}$, trong đó μ_0 là mức Fecmi ở độ không tuyệt đối. Áp dụng kết quả bài 102, ta có

$$T_F = \frac{h^2}{2m^*k} \left(\frac{3}{8\pi} n \right)^{2/3} = 3,5.10^4 K.$$

104. Ta đã biết thống kê Bôzơ – Anhxtanh và Fecmi – Đirắc chuyển thành thống kê Macxoen – Bônxơman khi thoả mãn điều kiện

$$\exp \left\{ \frac{\varepsilon - \mu}{kT} \right\} \gg 1.$$

Với giá trị bất kì của năng lượng electron ε dẫn đến điều kiện $e^{\frac{\mu}{kT}} \gg 1$.

Tính số hạt toàn phần :

$$\begin{aligned} N &= \int dn = \frac{4\pi Vm}{h^3} e^{\mu/kT} \int_0^\infty e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \varepsilon d\varepsilon \\ &= \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} V e^{\mu/kT}, \end{aligned}$$

ta có

$$e^{-\mu/kT} = \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} \frac{V}{N}$$

Nghĩa là điều kiện ứng dụng thống kê cổ điển có dạng :

$$\left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} \frac{V}{N} \gg 1$$

Khoảng cách trung bình giữa các hạt $d \approx n^{-1/3}$ với $n = \frac{N}{V}$, khi

$$\text{đó } n \ll \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} \text{ hay } d \gg \frac{h}{\sqrt{\pi} \sqrt{2kTm}}.$$

Kể đến giá trị xác suất nhất của vận tốc

$$v_{xs} = \sqrt{\frac{2kT}{m}}, \text{ ta có: } \frac{h}{\sqrt{\pi}\sqrt{2kTm}} = \frac{h}{\sqrt{\pi}mv_{xs}}.$$

Vì $\frac{h}{mv} = \lambda$ là bước sóng Đơ Brôi (De Broglie), thành thử điều kiện nhận được có ý nghĩa là: thống kê cổ điển chỉ ứng dụng được trong trường hợp khoảng cách trung bình giữa các hạt lớn hơn bước sóng Đơ Brôi nhiều ($d \gg \lambda$).

105. Dựa vào tiêu chuẩn suy biến ở bài trên, ta có

$$T_H = n^{2/3} \frac{h^2}{2\pi mk} \approx 1K.$$

Từ đó rút ra ở nhiệt độ thường, các phân tử hiđrô tuân theo thống kê cổ điển.

106. Từ điều kiện ứng dụng thống kê lượng tử

$$\frac{V}{N} \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} \ll 1$$

$$\text{ta tìm được } n = \frac{V}{N} \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2}$$

Thay số vào ta có $n \approx 10^{30} \text{ m}^{-3}$. Từ hệ thức

$$n = \rho \frac{N_A}{M}, \text{ ta có } \rho = \frac{nM}{N_A}.$$

107. Theo bài 105 nhiệt độ suy biến là

$$T_s \approx n^{2/3} \frac{h^2}{2\pi mk},$$

từ đó

$$n = \left(\frac{2\pi mkT_s}{h^2} \right)^{3/2}.$$

Thay số vào, ta có $n \approx 1,2 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$.

108. Ở nhiệt độ T , giá trị của xung lượng của phân tử là $\bar{p} = \sqrt{2m\varepsilon} \sim \sqrt{mkT}$. Thể tích không gian pha

$$\Delta\Gamma \sim \frac{V}{p^3} \sim (mkT)^{3/2} V.$$

Số trạng thái

$$\Omega = \frac{\Delta\Gamma}{h^3} \sim \frac{(mkT)^{3/2} V}{h^3},$$

bất đẳng thức

$$\left(\frac{mkT}{h^2} \right)^{3/2} V \gg N$$

trùng với điều kiện mất suy biến.

109. Từ §1, ta đã có thể tích không gian pha :

$$\Gamma_o = V \frac{4}{3} \pi p^3$$

Thay $p = \frac{\varepsilon}{c}$, ta có

$$\Gamma = \frac{4}{3} \frac{V \pi \varepsilon^3}{c^3}$$

Do đó

$$D(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{d\Gamma}{h^3} d\varepsilon = \frac{4\pi \varepsilon^2 V}{c^3 h^3} d\varepsilon$$

$$\text{Ứng với mật Fermi } \mu_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3N}{8\pi V} \right)^{2/3},$$

từ đó

$$p_F = (2m\mu_0)^{1/2} = \left[2m \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3N}{8\pi V} \right)^{2/3} \right]^{1/2}$$

$$p_F = \hbar \left(\frac{3N}{8\pi V} \right)^{1/3}$$

$$\text{Từ đó } E_F = \hbar c \left(\frac{3N}{8\pi V} \right)^{1/3}$$

110. Khi $T = 0$ số các electron trong một đơn vị thể tích có xung lượng nằm giữa p ; $p + dp$ là $\frac{8\pi p^2 dp}{h^3}$. Nếu ta chú ý đến cả phân bố góc thì từ θ ; $\theta + d\theta$ sẽ có $\frac{4\pi \sin\theta d\theta p^2 dp}{h^2}$ electron. Số electron va chạm vào thành bình trong một đơn vị thời gian là các electron nằm trong hình trụ có đáy 1 cm^2 chiều cao $v \cos\theta$. Lấy tích phân theo góc từ 0 đến 90° và theo xung lượng từ 0 đến p_F , ta được

$$v = \frac{3}{32} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \frac{\hbar}{m} \left(\frac{N}{V} \right)^{4/3}.$$

111. Ta biết tổng trạng thái của dao động tử có tần số dao

$$\text{động } v \text{ có dạng } Z(v) = \frac{\exp\left\{-\frac{\hbar v}{2kT}\right\}}{1 - \exp\left\{-\frac{\hbar v}{kT}\right\}}$$

Trong vật rắn có $3N$ sóng đứng độc lập có tần số từ 0 đến $\nu_{\max}$. Vậy

$$\ln Z = \int_0^{\nu_{\max}} \ln Z(\nu) d\nu$$

Ta đã biết $dn_\nu = \frac{12V}{\nu^3} \nu^2 d\nu$,

Còn $\nu^3 = \frac{4\pi V \nu_{\max}^3}{3N}$

$$\ln Z(\nu) = -\frac{h\nu}{2kT} - \ln \left(1 - 2 \exp \left\{ -\frac{h\nu}{kT} \right\} \right).$$

Đổi biến số $x = \frac{h\nu}{kT}$ đặt $T_c = \frac{h\nu_{\max}}{k}$

và thay vào tích phân, ta được

$$\ln Z = 9N \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \int_0^{T_c/T} \left[-\frac{x^3}{2} - x^2 / \ln(1 - e^{-x}) \right] dx$$

Tích phân thứ nhất dễ dàng tính, ta có :

$$\ln Z = -\frac{9N}{8} \frac{T_c}{T} - 9N \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \int_0^{T_c/T} x^2 / \ln(1 - e^{-x}) dx$$

Đối với các nhiệt độ cao, một cách gần đúng, ta có :

$$\begin{aligned} \int_0^{T_c/T} x^2 / \ln(1 - e^{-x}) dx &= \int_0^{T_c/T} x^2 / n x dx = \\ &= \frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{T} \right)^3 \ln \frac{T_c}{T} - \frac{1}{9} \left(\frac{T_c}{T} \right)^3 \end{aligned}$$

Từ đó nội năng bằng

$$U = kT^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} = 3NkT + \frac{9NkT_c}{8}$$

Nếu kể đến phần năng lượng E_0 của vật rắn

$$E_0 = \frac{3}{4} N h \nu_{\max}$$

ta có :

$$U = \frac{3}{4} N h \nu_{\max} + 3NkT + \frac{9NkT_c}{8}.$$

112. Năng lượng từ của một đơn vị thể tích chất thuận từ đặt trong từ trường H sẽ bằng

$$E = -\mu H \sum_{i=1}^{n_0} m_i = -IH$$

trong đó m_i là số lượng tử từ của hạt thứ i , n_0 là số nguyên tử trong một đơn vị thể tích và I là mômen từ tổng cộng của một đơn vị thể tích. Do đó tổng thống kê sẽ là :

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{m_1=-j}^j \dots \sum_{m_{n_0}=-j}^j \exp \left\{ \frac{IH}{kT} \right\} = \\ &= \sum_{m_1=-j}^j \dots \sum_{m_{n_0}=-j}^j \exp \left\{ -\frac{\mu H}{kT} \sum_{i=1}^{n_0} m_i \right\} = \\ \prod_{i=1}^{n_0} \left[\sum_{m_i=-j}^j \exp \left\{ -\frac{\mu H}{kT} m_i \right\} \right] &= \left\{ \frac{e^{(j+1)a} - e^{-aj}}{e^a - 1} \right\}^{n_0} \text{ với } a = \frac{\mu H}{kT}. \end{aligned}$$

Độ từ hoá trung bình sẽ là $\bar{I} = kT \frac{\partial}{\partial H} \ln Z = n_0 \bar{\mu}_z$, với $\bar{\mu}_z$ tính

theo công thức

$$\bar{\mu}_z = kT \frac{\partial}{\partial H} \ln \left[\frac{e^{(j+1)a} - e^{aj}}{e^a - 1} \right]$$

Đối với từ trường không quá lớn hay ở nhiệt độ cao khi điều kiện sau đây thoả mãn

$$\frac{\mu H}{kT} \ll 1$$

Ta lấy đạo hàm sau đó phân tích thành chuỗi và chỉ giữ lại số hạng phân tích đầu, ta được

$$\bar{\mu}_z = \frac{j(j+1)\mu^2}{3kT} H$$

Do đó độ từ hoá

$$\bar{I} = n_0 \frac{j(j+1)\mu^2}{3kT} H.$$

$$113. \chi = \frac{I}{H} = \frac{n_0 j(j+1)\mu^2}{3kT}.$$

114. Xét trường hợp có hai phân tử độc lập. Giá trị của đại lượng L đối với chúng là L_1 và L_2 là $L = L_1 + L_2$.

Ta có

$$\overline{(\Delta L)^2} = \overline{(\Delta L_1)^2} + 2\overline{\Delta L_1 \Delta L_2} + \overline{(\Delta L_2)^2}.$$

Vì hai phân tử độc lập nên

$$\overline{2\Delta L_1 \Delta L_2} = 0,$$

do đó

$$\overline{(\Delta L)^2} = \sum_{i=1}^2 \overline{(\Delta L_i)^2}.$$

Kết quả nhận được dễ dàng suy rộng cho trường hợp hệ gồm k phân độc lập

$$\overline{(\Delta L)^2} = \sum_{i=1}^k \overline{(\Delta L_i)^2}.$$

115. Giả sử L là hàm trạng thái cộng được, theo bài 114 ta có

$$\overline{(\Delta L)^2} = \sum_{i=1}^N \overline{(\Delta L_i)^2}$$

Nếu thăng giáng của đại lượng L trong các hệ con là xấp xỉ nhau về hạng thì $\overline{(\Delta L)^2} \sim N \overline{(\Delta L_i)^2}$. Giá trị trung bình $\bar{L} = \sum_{i=1}^N \bar{L}_i$ cũng tỉ lệ với số phân N.

Do đó thăng giáng tương đối được tính bằng hệ thức

$$\delta_L = \frac{1}{L} \sqrt{\overline{\Delta L^2}} \sim \frac{\sqrt{N}}{N} = \frac{1}{\sqrt{N}}.$$

Do đó đối với hệ vĩ mô, thăng giáng của các đại lượng cộng được là rất nhỏ $\overline{\Delta v^2} = \overline{v^2} - \bar{v}^2$

116. theo §1, ta đã có :

$$\overline{v^2} = \frac{3kT}{m}; \quad \bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}},$$

do đó
$$\overline{\Delta v^2} = \frac{kT}{m} \left(3 - \frac{8}{\pi} \right).$$

117. Theo phân bố chính tắc, ta có giá trị trung bình của hàm Haminton là $\bar{H} = \int_{(x)} H \exp. \left\{ \frac{\psi - H}{\theta} \right\} dx$

và điều kiện chuẩn hoá

$$\int_{(x)} \exp\left\{\frac{\psi - H}{\theta}\right\} dx = 1$$

(Tích phân lấy theo toàn bộ không gian pha).

Lấy đạo hàm theo θ của hai hệ thức này và kết hợp lại ta được :

$$\overline{H^2} - \bar{H}^2 = \theta^2 \left(\frac{\partial \bar{H}}{\partial \theta} \right),$$

vì $\overline{H^2} - \bar{H}^2 = \overline{(H - \bar{H})^2} = (\Delta E)^2$ nên

$$(\Delta E)^2 = \theta^2 \frac{\partial \bar{H}}{\partial \theta}$$

$$\text{Vậy } \frac{\Delta E}{\bar{E}} = \frac{\sqrt{(\overline{H - \bar{H}})^2}}{\bar{H}} \frac{\theta}{\bar{H}} \sqrt{\frac{\partial \bar{H}}{\partial \theta}}$$

với khí lí tưởng ta có $\bar{E} = \bar{H} = \frac{3}{2} N \theta$

Thay vào ta có

$$\frac{\Delta E}{\bar{E}} = \sqrt{\frac{2}{3N}}.$$

118. Ta có $\overline{\Delta E^2} = \overline{E^2} - \bar{E}^2$.

Sử dụng kết quả bài trên ta có

$$\delta E = \frac{kT}{\bar{E}} \sqrt{\frac{\partial \bar{E}}{kT}}.$$

Vì $C_V = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T}$, nên ta có $\delta E = \frac{T}{\bar{E}} \sqrt{k C_V}$.

119. Từ kết quả bài trên ta có

$$\delta E = \sqrt{\frac{\Delta E^2}{E}} = \frac{\sqrt{kT^2 C_v}}{E}$$

Đối với vật rắn ở nhiệt độ thấp

$$\bar{E} = \frac{3\pi^4 NT^4}{5T_c^3}, C_v = \frac{12\pi^4 NT^3}{5T_c^3}$$

$T_c = \frac{h\nu_{\max}}{k}$ là nhiệt độ Đơbai. Vậy thăng giáng tương đối của năng lượng là

$$\delta E = \sqrt{\frac{20}{3\pi^4} \left(\frac{T_c}{T}\right)^3 \frac{1}{N}}$$

Ở nhiệt độ cao $C_v = 3Nk$.

Thay vào ta có $\bar{E} = 3Nk$

$$\delta E \sim \frac{1}{\sqrt{N}}.$$

120. Ta biết năng lượng trung bình của vật rắn là

$$\begin{aligned}\bar{E} &= E_0 + \frac{3V k^4 T^4}{2\pi^2 c^2 h^3} \int_0^{\frac{h\nu_{\max}}{kT}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \\ &= E_0 + \alpha T^4,\end{aligned}$$

với

$$\alpha = \frac{3V k^4}{2\pi^2 c^2} \int_0^{\frac{h\nu_{\max}}{kT}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}.$$

Từ bài 117 ta có

$$\overline{\Delta E^2} = kT^2 \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \sim T^5$$

$$121. \overline{\Delta x^3} = \overline{(x - \bar{x})^3} = \overline{x^3} - 3\overline{x^2\bar{x}} + 3\overline{x\bar{x}^2} - \bar{x}^3$$

$$\overline{\Delta x^3} = \overline{x^3} - \bar{x}^3 - 3\bar{x}(\overline{\Delta x^2})$$

122. Phân bố Gauss chuẩn hoá có dạng

$$t(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha x^2}.$$

Dùng tích phân Poatxông ta có

$$\overline{x^2} = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\alpha}{\alpha^3}} = \frac{1}{2\alpha}$$

$$\overline{x^4} = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}} = \frac{3}{4\alpha^2}$$

So sánh kết quả, ta có $\overline{x^4} = 3(\overline{x^2})^2$

123. Phân bố Gipxơ đối với hệ có số hạt biến thiên có dạng

$$W = \exp \left\{ \frac{\alpha + \mu N - \varepsilon_n N_n}{\theta} \right\},$$

trong đó ε_n là năng lượng của một hạt trên mức n . Ω được xác định bằng điều kiện chuẩn hóa

$$e^{\frac{\Omega}{\theta}} \sum_N e^{\frac{\mu N}{\theta}} \sum_N e^{-\frac{\varepsilon_n N_n}{\theta}} = 1$$

Giá trị trung bình của số hạt được xác định bằng đẳng thức

$$\bar{N} = e^{\frac{\Omega}{\theta}} \sum_N N e^{\frac{\mu N}{\theta}} \sum_N e^{-\frac{\varepsilon_n N_n}{\theta}}$$

Lấy đạo hàm hệ thức trên theo μ và kể đến sự phụ thuộc của Ω vào μ , ta có

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial \bar{N}}{\partial \mu}\right)_{T,V} &= \frac{1}{\theta} e^{\frac{\Omega}{\theta}} \sum_N \left(N^2 + N \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} e^{\frac{\mu N}{\theta}} \right) \sum_n e^{-\frac{\varepsilon_n N_n}{\theta}} = \\ &= \frac{1}{\theta} \left(\overline{N^2} + \bar{N} \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)\end{aligned}$$

Lấy đạo hàm điều kiện chuẩn hoá theo μ ta có :

$$\bar{N} = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}$$

$$\text{Do đó} \quad \left(\frac{\partial \bar{N}}{\partial \mu}\right)_{T,V} = \frac{1}{\theta} (\overline{N^2} - \bar{N}^2) = \frac{1}{\theta} \overline{\Delta N^2}.$$

$$\text{Vậy} \quad \overline{(\Delta N)^2} = \theta \left(\frac{\partial \bar{N}}{\partial \mu}\right)_{T,V}.$$

124. Phân bố Fecmi – Dirac có dạng

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_i - \mu}{\theta}} + 1}$$

Lấy đạo hàm theo μ , ta có

$$\frac{\partial \bar{n}_i}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_i - \mu}{\theta}} + 1} e^{\frac{\varepsilon_i - \mu}{\theta}} \cdot \frac{1}{\theta} = \frac{1}{\theta} \bar{n}_i (1 - \bar{n}_i).$$

Theo bài 123, ta có $\overline{(\Delta \bar{n}_i)^2} = \bar{n}_i (1 - \bar{n}_i).$

125. Năng lượng trung bình của lượng tử trường điện từ có dạng

$$\overline{\varepsilon_{\omega}} = \frac{\frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1}}$$

Theo bài 117, ta có $\overline{\Delta\varepsilon^2} = \theta^2 \frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \theta}$, nên

$$\overline{\Delta\varepsilon_{\omega}^2} = \frac{(\hbar\omega)^2 e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1 \right)^2}$$

Công thức này có thể viết dưới dạng

$$\overline{\Delta\varepsilon_{\omega}^2} = (\hbar\omega)^2 \left[\frac{1}{e^{\hbar\omega/\theta} - 1} + \frac{1}{(e^{\hbar\omega/\theta} - 1)^2} \right]$$

Vì rằng $\overline{N_{\omega}} = \frac{\overline{\varepsilon_{\omega}}}{\hbar\omega}$, nên

$$\overline{\Delta\varepsilon_{\omega}^2} = \hbar\omega \overline{\varepsilon_{\omega}} + \overline{\varepsilon_{\omega}^2} = (\hbar\omega)^2 \overline{N_{\omega}} + (\hbar\omega)^2 (\overline{N_{\omega}})^2$$

$$\text{hay} \quad \overline{\Delta N_{\omega}^2} = \frac{\overline{\Delta\varepsilon_{\omega}^2}}{(\hbar\omega)^2} = \overline{N_{\omega}} + (\overline{N_{\omega}})^2$$

126. Năng lượng của dao động tử điều hoà $E = n \hbar \omega$ ($n = 0, 1, 2, \dots$). Trung bình theo phân bố chính tắc ta được

$$E = \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}$$

Thành thử

$$\overline{\Delta E^2} = kT^2 \frac{d\bar{E}}{dT} = (\hbar\omega)^2 \frac{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1\right]^2}$$

Thăng giáng tương đối có dạng

$$\frac{\overline{\Delta E^2}}{\bar{E}^2} = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right).$$

Nếu biểu diễn về phải qua $\bar{E}$ ta tìm được

$$\frac{\overline{\Delta E^2}}{\bar{E}^2} = 1 + \frac{\hbar\omega}{\bar{E}}$$

Khi nhiệt độ cao ($kT \gg \hbar\omega$), kết quả này có dạng

$$\bar{E} = kT$$

$$\overline{\Delta E^2} = (kT)^2$$

$$\frac{\overline{\Delta E^2}}{\bar{E}^2} = 1$$

Ta nhận xét rằng khi tăng năng lượng trung bình, thăng giáng tương đối dẫn đến đơn vị chứ không dẫn đến không.

Kí hiệu E_n là năng lượng của N dao động tử điều hoà, ta có

$$\bar{E}_n = N\bar{E}$$

$$\overline{\Delta E_N^2} = N\overline{\Delta E^2}$$

$$\frac{\overline{\Delta E_N^2}}{\bar{E}_N^2} = \frac{1}{N} \frac{\overline{\Delta E^2}}{\bar{E}^2} = \frac{1}{N} \left(1 + \frac{\hbar\omega}{\bar{E}} \right).$$

Khi N rất lớn thì thăng giáng tương đối sẽ nhỏ.

Điều đó phù hợp với thực nghiệm : Thăng giáng tương đối của vật thể vĩ mô là nhỏ.

127. Đo thăng giáng, trên bản tụ điện xuất hiện điện tích q . Khi đó năng lượng của tụ điện là

$$E = \frac{q^2}{2C}$$

Mật khác năng lượng này là bằng $\frac{kT}{2}$. Từ đó $\overline{q^2} = CkT$.

128. Tương tự bài trên $\frac{L\overline{\Delta I^2}}{2} = \frac{kT}{2}$, trong đó L là hệ số tự cảm của cuộn dây, I là cường độ dòng điện.

$$\text{Từ đó } \overline{\Delta I^2} = \frac{kT}{L}.$$

129. Khi khuếch tán $\overline{\Delta x^2} = 2Dt$ với $D = \frac{kT}{6\pi\eta r}$

Từ đó ta tính được khoảng cách trung bình của khí khuếch tán sau thời gian t là

$$\Delta x = \sqrt{\overline{\Delta x^2}} = \sqrt{\frac{kTt}{3\pi\eta r}}.$$

130. Lực ngoài $\vec{F}_1 = -\nabla U$ và lực ma sát $\vec{F}_2 = \gamma \vec{v}$ cân bằng với gradien của áp suất p .

$$n(-\gamma \vec{v} - \nabla U) = \nabla p,$$

trong đó γ là hệ số ma sát, n là nồng độ các hạt Braonơ. Lấy divergence của biểu thức trên, chú ý đến phương trình liên tục

$\text{div}(n \bar{v}) + \frac{\partial n}{\partial t} = 0$, phương trình trạng thái của khí lí tưởng

$p = nkT$ và mật độ xác suất tỉ lệ với mật độ các hạt không tương tác ($W \sim n$)

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \bar{v} \left\{ \frac{W \nabla \bar{U}}{\gamma} + \frac{kT}{\gamma} \nabla \bar{W} \right\}$$

Tỉ số $\frac{kT}{\gamma}$ là hệ số ma sát D nên

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \bar{v} \left\{ \frac{1}{\gamma} \bar{W} \nabla U + D \bar{W} \right\}.$$

131. Hướng trục x theo phương trọng lực, ta có phương trình $E - F - p$ một chiều :

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left(W \frac{\partial U}{\partial x} \right) + D \frac{\partial^2 W}{\partial x^2}$$

Đầu tiên nhân phương trình này với $x - x_0$, tích phân theo x , sau đó nhân nó với $(x - x_0)^2$ và lại tích phân theo x . Ta được các hệ thức sau :

$$\frac{d}{dt} \overline{(x - x_0)^2} = 2D - \frac{2}{\gamma} \overline{(x - x_0)} \frac{\partial U}{\partial x}$$

$$\frac{d}{dt} \overline{(x - x_0)} = -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial U}{\partial x}$$

Bởi vì $\frac{\partial U}{\partial x} = -mg = \text{const}$ (m là khối lượng hạt Braonơ), nên

khi tích phân các phương trình trên với các điều kiện ban đầu

$$\overline{(x - x_0)} \Big|_{t_0=0} = 0; \quad \overline{(x - x_0)^2} \Big|_{t_0=0} = 0;$$

ta tìm được $\overline{(x - x_0)} = \frac{mg}{\gamma} t$

$$\overline{(x - x_0)^2} = 2Dt + \left(\frac{mg}{\gamma} \right)^2 t^2$$

Từ đó ta có hệ thức sau đối với giá trị trung bình của bình phương dịch chuyển

$$\overline{[(x - x_0) - \overline{(x - x_0)}]^2} = 2Dt$$

Khi vắng mặt trường ngoài và $x_0 = 0$, ta có $\overline{x^2} = 2Dt$.

132. Khi có trường ngoài $U(\vec{r})$, phương trình Bônxôman có dạng

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \nabla_{\vec{r}} f - \frac{1}{m} \nabla_{\vec{r}} U \nabla_{\vec{r}} f = \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{th}$$

Trong đó

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{th} = \int d\vec{v}_2 \int \sigma(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi \left[\vec{v}_2 - \vec{v}_1 \right] \left[f(\vec{r}, \vec{v}_2, t) f(\vec{r}, \vec{v}_1, t) - f(\vec{r}, \vec{v}_2, t) f(\vec{r}, \vec{v}_1, t) \right],$$

ở đây v_1, v_2, v_1', v_2' , là vận tốc các hạt trước và sau va chạm, $\sigma(\theta, \varphi)$ là tiết diện hiệu dụng vi phân của tán xạ.

Để dàng kiểm nghiệm lại là hàm phân bố Macxoen - Bônxôman.

$$f(\vec{r}, \vec{v}) = Ae^{-\frac{1}{\theta} \left[\frac{mv^2}{2} + U(\vec{r}) \right]},$$

trong đó $A = \text{const}$ và $\theta = \text{const}$, thoả mãn về trái của phương trình Bônxôman. Mặt khác đối với hàm phân bố cân bằng, ta cũng có

$$f(\vec{r}, \vec{v}_2).f(\vec{r}, \vec{v}_1) = f(\vec{r}, \vec{v}_2).f(\vec{r}, \vec{v}_1)$$

do đó về phải của phương trình Bônxôman cũng tiến đến không.

133. Khi vắng mặt trường ngoài $U(\vec{r}) = 0$. Đối với khi cân bằng, hàm phân bố không phụ thuộc tường minh vào thời gian $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$.

Mặt khác do không có trường ngoài f cũng không phụ thuộc toạ độ nên có thể đặt

$$\nabla_{\vec{r}} f = 0$$

Thành thử ta sẽ có phương trình

$$f(\vec{v}_1)f(\vec{v}_2) = f(\vec{v}_1)f(\vec{v}_2).$$

Lấy lôgarit của phương trình này và kết hợp với các điều kiện va chạm đàn hồi, ta có :

$$\ln f(\vec{v}_1) + \ln f(\vec{v}_2) = \ln f(\vec{v}_1) + \ln f(\vec{v}_2)$$

$$\vec{v}_1 + \vec{v}_2 = \vec{v}_1 + \vec{v}_2$$

$$(\vec{v}_1)^2 + (\vec{v}_2)^2 = (\vec{v}_1)^2 + (\vec{v}_2)^2.$$

Ta dễ dàng thấy rằng hàm

$$\ln f(\vec{v}) = b(\vec{v} - \vec{v}_0)^2 + A$$

trong đó b , A và $\vec{v}_0$ là các hằng số.

Như vậy nghiệm của phương trình Bônxôman trong trường hợp này là

$$f(\vec{v}) = B e^{b(\vec{v} - \vec{v}_0)}.$$

Đó là phân bố Macxoen.

134. Thế năng U có dạng $U(z) = mgz$,

Đối với khí lí tưởng, từ phương trình động học Bônxôman ta dễ dàng rút ra phương trình đối với hàm phân bố theo chiều cao z trong trường $f(z)$

$$\frac{\partial f(z)}{\partial z} + \frac{mg}{kT} f(z) = 0.$$

Từ đó $f(z) = B e^{-\frac{mgz}{kT}}$ trong đó $B = \text{const}$,

Ta đã biết $dN(z) = n(z)dz = N f dz$, do đó

$$n(z) = n_0 e^{-\frac{mgz}{kT}}.$$

135. Khi vắng mặt trường ngoài và không có va chạm, phương trình Bônxôman có dạng

$$\frac{\partial \vec{f}}{\partial t} + \vec{v} \nabla_{\vec{r}} f = 0$$

Ở thời điểm $t = 0$

$$f(\vec{r}_0, \vec{v}_0, 0) = \rho_0(\vec{r}_0) f_0(\vec{v}),$$

trong đó $\rho_0(\vec{r}_0)$ là mật độ hạt ở thời điểm $t = 0$ còn $f_0(\vec{v})$ là phân bố Macxoen.

Bởi vì các hạt chuyển động theo quán tính nên ở thời điểm t , vị trí của hạt $\vec{r} = \vec{r}_0 + \vec{v}t$, từ đó : $\vec{r}_0 = \vec{r} - \vec{v}t$ và $f(\vec{r}, \vec{v}, t) = \rho_0(\vec{r} - \vec{v}t) f_0(\vec{v})$ hiển

nhien là $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ thoả mãn phương trình Bônxôman và điều kiện ban đầu. Mật độ ở thời điểm t được tìm theo phương trình

$$\begin{aligned}\rho(\vec{r}, t) &= \int f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v} = \int \rho_o(\vec{r} - \vec{v}t) f_o(\vec{v}) d\vec{v} \\ &= \frac{1}{t^3} \int \rho_o(\vec{r}_o) f_o\left(\frac{\vec{r} - \vec{r}_o}{t}\right) d\vec{r}_o\end{aligned}$$

Ta thay vào công thức này

$$f_o\left(\frac{\vec{r} - \vec{r}_o}{t}\right) = \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{m}{2\theta}\left(\frac{r - r_o}{t}\right)^2\right]$$

và coi $\rho_o(\vec{r}_o)$ là đối xứng cầu, tích phân theo θ và φ giữa $\vec{r}$ và $\vec{r}_o$, ta có :

$$\rho(\vec{r}, t) = \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{1/2} \frac{1}{r} \int \left[e^{-\frac{m}{2\theta t^2}(\vec{r}_o - \vec{r})^2} - e^{-\frac{m}{2\theta t^2}(\vec{r}_o + \vec{r})^2} \right] \rho_o(r_o) r_o dr_o$$

Nếu chú ý là

$$\rho(r_o) = \begin{cases} \rho_o & \text{khi } 0 \leq r_o \leq a \\ 0 & \text{khi } r_o > a \end{cases}$$

Ta có :

$$\rho(r, t) = \left(\frac{m}{2\pi\theta t}\right)^{1/2} \frac{\rho_o}{r} [J(r) - J(-r)].$$

Trong đó

$$J(r) = \int_0^a e^{-\frac{m}{2\theta t^2}(r_o - r)^2} r_o dr_o$$

Tiếp tục tính $J(r)$ và thay vào, ta có

$$\rho(\vec{r}, t) = \frac{\rho_0}{2} \left\{ \frac{1}{\rho\sqrt{\pi}} [e^{-(\rho+a)^2} - e^{-(\rho-a)^2}] + \operatorname{erf}(\rho+a) - \operatorname{erf}(\rho-a) \right\}.$$

trong đó

$$\rho = \sqrt{\frac{m}{2\theta t^2}} r \alpha = \sqrt{\frac{m}{\sqrt{2\theta t^2}}} a$$

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-x^2} dx.$$

136. Giả sử trong hệ có gradien nhiệt độ hướng theo trục z . Ta cũng giả thiết rằng biến thiên nhiệt độ $T(z)$ trên chiều dài quãng đường tự do $l = \mathcal{C}$ nhỏ hơn nhiều so với bản thân nhiệt độ T . Bởi vì năng lượng trung bình u là hàm của nhiệt độ nên nó cũng là hàm của tọa độ z nên ta viết là $u(z)$.

Dòng nhiệt q được xác định như động năng chuyển qua một đơn vị diện tích của mặt $z = 0$ sau một đơn vị thời gian và hệ số truyền nhiệt λ liên hệ với nó bằng hệ thức

$$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial z}$$

Ta nhận xét rằng mỗi êlectrôn chuyển động tự do trong thời gian $\mathcal{C}$ và để đơn giản, ta chọn mặt $z = 0$ ở cuối quãng đường tự do của êlectrôn, ta có:

$$u(-l \cos \theta) = u(0) - l \cos \theta \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)_{z=0},$$

(vì gradien nhiệt độ là nhỏ) trong đó θ là góc giữa những phương vận tốc của êlectrôn và trục z_0 .

Sau một đơn vị thời gian, số electron có hướng chuyển động nằm giữa θ và $\theta + d\theta$ được xác định bằng đẳng thức

$$dn = \frac{v}{2} n \sin\theta \cos\theta d\theta,$$

trong đó n là số tổng cộng các electron trong một đơn vị thể tích. Do đó dòng toàn phần của năng lượng được xác định bằng tích phân

$$q = -\frac{1}{2} n v l \frac{\partial u}{\partial z} \int_0^{\pi} \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = -\frac{1}{3} n v l \frac{\partial u}{\partial z}.$$

Nếu chú ý là

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\partial u}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial z}, \text{ ta có}$$

$$\lambda = \frac{1}{3} C v l,$$

với $C = \frac{\partial u}{\partial T}$ là nhiệt dung của một đơn vị thể tích khí electron.

137. Mật độ dòng j_x và dòng năng lượng Q_x tìm được theo công thức

$$j_x = -e_0 \int v_x f dg, \quad Q_x = \int \epsilon f v_x dg,$$

trong đó dg là quãng các trạng thái lượng tử được tính như sau :

$$dg = \frac{(2m)^{3/2}}{h^3} \epsilon^{1/2} d\epsilon \sin\theta d\theta d\varphi$$

Thay biểu thức của hàm phân bố vào, ta có

$$j_x = e K_1 \left[e E_x + \left(\frac{du}{dT} - \frac{\mu}{T} \right) \frac{dT}{dx} \right] + \frac{e}{T} K_2 \frac{dT}{dx}$$

$$Q_x = - \left[e_0 \epsilon_l + \left(\frac{d\eta}{dT} - \frac{\eta}{T} \right) \frac{dT}{dx} \right] K_2 - \frac{1}{T} \frac{dT}{dx} K_3,$$

trong đó

$$K_n = -\frac{2\sqrt{2m}}{3\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \tilde{\epsilon}^{\frac{n+1}{2}}(\epsilon) \epsilon \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} d\epsilon.$$

Giả sử $j_x = 0$, ta tìm được:

$$Q_x = -\frac{1}{T} \frac{K_1 K_3 - K_2^2}{K_1} \frac{dT}{dx}, \text{ hay}$$

$$Q_x = -\lambda \frac{dT}{dx}$$

$$\text{Từ đó } \lambda = \frac{1}{T} \frac{K_1 K_3 - K_2^2}{K_1}.$$

138. Để đơn giản, ta giả sử hỗn hợp khí bao gồm hai loại phân tử có khối lượng m_1 và m_2 . Kí hiệu bán kính của chúng là a_1 và a_2 và vận tốc là $\overline{v_1}$ và $\overline{v_2}$. Khi đó vận tốc khối tâm $\overline{V}$ và vận tốc tương đối $\overline{u}$ là :

$$\overline{V} = \frac{m_1 \overline{v_1} + m_2 \overline{v_2}}{m_1 + m_2}, \quad \overline{u} = \overline{v_2} - \overline{v_1}$$

Sau một đơn vị thời gian trong một đơn vị thể tích xảy ra một số va chạm là :

$$f_1 d\overline{v_1} f_2 d\overline{v_2} \pi(a_1 + a_2)^2 \left\{ \sin^2(\theta + d\theta) - \sin^2 \theta \right\} u$$

Ở đây vì khí loãng ta lấy f_1 và f_2 là phân bố Macxoen.

Ta cũng dễ dàng tính được

$$m_1 \overline{v_1^2} + m_2 \overline{v_2^2} = (m_1 + m_2) \overline{V^2} + \mu \overline{u^2}$$

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

$$d\vec{v}_1 d\vec{v}_2 = \left| \frac{\partial(\vec{v}_1, \vec{v}_2)}{\partial(\vec{v}, \vec{u})} \right| d\vec{V} d\vec{u} = d\vec{V} d\vec{u}.$$

Tính tích phân theo tất cả các hướng khả dĩ của đường nối tâm các phân tử trong khoảng $0 < \theta < \pi/2$, ta có biểu thức đối với trung bình số va chạm

$$\begin{aligned} v_{12} &= \iint d\vec{V} d\vec{u} n_1 n_2 \frac{(m_1 m_2)^{3/2}}{(2\pi kT)^3} \exp \times \\ &\times \left\{ -\frac{(m_1 + m_2) \overline{V^2} + \overline{u^2}}{2kT} \right\} (a_1 + a_2)^2 u \int_0^{\pi/2} 2 \sin \theta \cos \theta d\theta \\ &= 2n_1 n_2 (a_1 + a_2)^2 \sqrt{\frac{2\pi kT}{\mu}} \end{aligned}$$

Nếu các nguyên tử là cùng loại thì $n_1 = n_2 = n$; $m_1 = m_2 = m$; $a_1 = a_2 = d/2$; $\sigma = \pi d^2$, số va chạm trong một đơn vị thể tích sau một đơn vị thời gian là:

$$v = 2n^2 d^2 \sqrt{\frac{4\pi kT}{m}} = 4n^2 d^2 \sqrt{\frac{\pi kT}{m}}$$

Số va chạm trung bình của một phân tử là

$$\frac{v}{n} = 4nd^2 \sqrt{\frac{\pi kT}{m}} = 4n\pi d^2 \sqrt{\frac{kT}{\pi m}} = 4n\sigma \sqrt{\frac{kT}{\pi m}}$$

Thời gian trung bình giữa các va chạm sẽ là

$$\tau = \frac{1}{4n\sigma} \sqrt{\frac{\pi m}{kT}}$$

Quãng đường tự do trung bình có thể tính theo công thức

$$l = \tau v = \tau \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} = \frac{l}{n\sigma\sqrt{2}}$$

139. Thay số vào công thức trên

$$l \approx 5,8 \cdot 10^{-8} \text{ m,}$$

với chú ý là n được tính từ phương trình trạng thái của khí lí tưởng $p = nkT$.

140. Mật độ entropi s của dòng tải là hàm của mật độ điện tích ρ và mật độ năng lượng tải ϵ , do đó

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \left(\frac{\partial S}{\partial \epsilon} \right)_\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \left(\frac{\partial S}{\partial \rho} \right)_\epsilon \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

Nếu sử dụng định luật bảo toàn điện tích và năng lượng

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \text{div} \vec{\omega} = 0$$

và kể đến các biểu thức đối với đạo hàm

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \epsilon} \right)_\rho = \frac{1}{T} \quad \left(\frac{\partial S}{\partial \rho} \right)_\epsilon = \frac{\eta}{\epsilon_0 T}, \text{ ta sẽ có:}$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \text{div} \left(\frac{\vec{\omega} + \frac{1}{\epsilon_0} \eta \vec{j}}{T} \right) = \vec{j} \frac{1}{T} \nabla \left(\frac{\eta}{\epsilon_0} \right) + \left(\vec{\omega} + \frac{\eta}{\epsilon_0} \vec{j} \right) \nabla \frac{1}{T}$$

tích phân biểu thức này theo thể tích V của hệ kín ta nhận được

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \int_V \vec{j} \frac{1}{T} \nabla \left(\frac{\eta}{\epsilon_0} \right) dV + \int_V \bar{Q} \nabla \left(\frac{1}{T} \right) dV,$$

$$\bar{Q} = \bar{\omega} + \frac{1}{\epsilon_0} \eta \vec{j}.$$

Ở đây ta đã sử dụng điều kiện $j_n = \omega_n = 0$ trên mặt giới hạn thể tích V . Ta thấy các lực liên hiệp với các dòng nhiệt động $\vec{j}$ và $\bar{Q}$ tương ứng là

MỤC LỤC

Trang

Phần III

CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

A – Đề bài

§1. Những cơ sở vật lí của cơ học lượng tử	
Mẫu nguyên tử Rôzepho. Lí thuyết Bo	3
§2. Toán tử	5
§3. Phương trình Srôđingơ (Shrödinger)	14
§4. Lí thuyết biểu diễn	21
§5. Spin và hệ hạt đồng nhất	24
§6. Các phương pháp tính gần đúng	26
§7. Lí thuyết tán xạ	29

B – Lời giải	32
--------------	----

Phần IV

VẬT LÝ THỐNG KÊ

A – Đề bài

§1. Không gian pha – Định lí Liouvin (Liouville)	281
§2. Các hàm phân bố cổ điển	283
§3. Áp dụng các hàm phân bố Gípơ vào các hệ thực	287
§4. Các hàm phân bố lượng tử	291
§5. Lí thuyết thăng giáng	295
§6. Thuyết động học các khí	297

B – Lời giải	299
--------------	-----

Chịu trách nhiệm xuất bản :

Chủ tịch HĐQT kiêm Tổng Giám đốc NGÔ TRẦN ÁI
Phó Tổng Giám đốc kiêm Tổng biên tập NGUYỄN QUỲ THAO

Biên tập nội dung :

PHẠM THỊ NGỌC THẮNG

Biên tập mỹ thuật :

LƯU CHÍ ĐỒNG

Sửa bản in :

PHẠM THỊ NGỌC THẮNG

Chế bản :

PHÒNG CHẾ BẢN (NXB GIÁO DỤC)

BÀI TẬP VẬT LÝ LÝ THUYẾT – TẬP 2

Mã số: 7K536T7 - DAI

In 1.500 bản, khổ 14,5 x 20,5 cm, tại Công ty In - Thương mại TTXVN.

Số xuất bản: 11-2007/CXB/286-2119/GD.

In xong và nộp lưu chiểu tháng 9 năm 2007.



CÔNG TY CỔ PHẦN SÁCH ĐẠI HỌC - DẠY NGHỀ
HEVOBCO

25 HÀN THUYỀN – HÀ NỘI

Website : www.hevobco.com.vn

TÌM ĐỌC SÁCH THAM KHẢO ĐẠI HỌC MÔN VẬT LÝ CỦA NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC

- | | |
|---|--|
| 1. Vật lý đại cương (3 tập) | Lương Duyên Bình (CB) |
| 2. Bài tập Vật lý đại cương (3 tập) | Lương Duyên Bình (CB) |
| 3. Cơ sở Vật lý (6 tập) | Đàm Trung Đôn
Ngô Quốc Quỳnh ... (dịch) |
| 4. Giải bài tập và bài toán Cơ sở Vật lý (3 tập) | Lương Duyên Bình
Nguyễn Quang Hậu |
| 5. Bài tập Vật lý lý thuyết (2 tập) | Nguyễn Hữu Minh, Tạ Duy Lợi
Đỗ Đình Thanh, Lê Trọng Tường |
| 6. Phương pháp toán lý | Đỗ Đình Thanh |
| 7. Vật lý hiện đại (Lý thuyết và bài tập) | Ngô Phú An, Lê Bằng Sương (dịch) |

Bạn đọc có thể mua tại các Công ty Sách - Thiết bị trường học ở các địa phương hoặc các Cửa hàng của Nhà xuất bản Giáo dục :

Tại Hà Nội : 25 Hàn Thuyên; 187B Giảng Võ; 232 Tây Sơn; 23 Tràng Tiền.

Tại Đà Nẵng : Số 15 Nguyễn Chí Thanh; Số 62 Nguyễn Chí Thanh.

Tại Thành phố Hồ Chí Minh : 104 Mai Thị Lựu, Quận 1; Cửa hàng 451B - 453,

Hai Bà Trưng, Quận 3; 240 Trần Bình Trọng -- Quận 5.

Tại Thành phố Cần Thơ : Số 5/5, đường 30/4.

Website : www.nxbgd.com.vn



Giá : 20.200 đ