Các toán tử trong cơ học lượng tử

Lý Lê

Ngày 20 tháng 7 năm 2009

Tóm tắt nội dung

Hóa học lượng tử được phát triển từ cơ học lượng tử. Trong cơ học lượng tử, có thể nói, nhìn chổ nào chúng ta cũng thấy ***toán tử*** vì *mỗi thuộc tính vật lí được đặc trưng bởi một toán tử*. Vì vậy, hiểu rõ khái niệm toán tử cũng như những tính chất của toán tử là một trong những yêu cầu cơ bản nhất đối người học lượng tử.

1 Các khái niệm

1.1 Toán tử

Chúng ta bắt đầu bằng việc viết lại phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian cho hệ một hạt trong không gian một chiều

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{1}$$

hay

$$\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\Big]\psi(x) = E\psi(x) \tag{2}$$

Biểu thức trong dấu móc vuông $\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\Big]$ được gọi là ***toán tử*** (operator). Nó tác dụng lên hàm $\psi(x)$ cho ta hàm $E\psi(x)$.

Như vậy, toán tử là một qui luật mà nhờ đó từ một hàm số cho trước ta có thể tìm được một hàm số mới.

$$\widehat{A}f(x) = g(x) \tag{3}$$

Trong đó, $\widehat{A}$ được gọi là *toán tử*. Hai hàm số $f(x)$ và $g(x)$ không nhất thiết phải khác nhau, chúng có thể giống nhau.

Ví dụ: Gọi $\widehat{D}$ là toán tử đạo hàm bậc nhất theo x

$$\widehat{D} = \frac{d}{dx} \qquad \text{hay} \qquad \widehat{D}f(x) = \frac{d}{dx}f(x) = f'(x)$$

Nếu $f(x) = x^2 + 3e^x$, thì ta có

$$\widehat{D}f(x) = f'(x) = 2x + 3e^x$$

Tương tự, nếu $\widehat{3}$ là toán tử nhân một hàm số với 3, thì ta có

$$\widehat{3}f(x) = 3(x^2 + 3e^x) = 3x^2 + 9e^x$$

1.2 Tổng của hai toán tử

Tổng của hai toán tử $\widehat{A}$ và $\widehat{B}$ được xác định như sau

$$(\widehat{A} + \widehat{B})f(x) = \widehat{A}f(x) + \widehat{B}f(x) \tag{4}$$

Ví dụ: Toán tử $\widehat{C}$ được xác định bởi

$$\widehat{C} = x + \frac{d}{dx}$$

Tìm $\widehat{C}f(x)$ nếu $f(x) = a\sin(bx)$.

Ta có

$$(x + \frac{d}{dx})a\sin(bx) = xa\sin(bx) + \frac{d}{dx}[a\sin(bx)] = ax\sin(bx) + ab\cos(bx)$$

1.3 Tích của hai toán tử

Tích của hai toán tử $\widehat{A}$ và $\widehat{B}$ được xác định như sau

$$\widehat{A}\widehat{B}f(x) = \widehat{A}[\widehat{B}f(x)] \tag{5}$$

Ví dụ: Cho $\widehat{C} = x\frac{d}{dx}$. Tìm $\widehat{C}f(x)$ nếu $f(x) = (x^2 + 3e^x)$.

Ta có

$$x\frac{d}{dx}(x^2 + 3e^x) = x[\frac{d}{dx}(x^2 + 3e^x)] = x(2x + 3e^x) = 2x^2 + 3xe^x \tag{6}$$

Thông thường, $\widehat{A}\widehat{B} \neq \widehat{B}\widehat{A}$. Ví dụ, xét hai toán tử $\widehat{D} = \frac{d}{dx}$ và $\widehat{x} = x$. Ta có

$$\widehat{D}\widehat{x}f(x) = \widehat{D}[xf(x)] = f(x) + xf'(x) \tag{7}$$

Trong khi đó

$$\widehat{x}\widehat{D}f(x) = \widehat{x}[\widehat{D}f(x)] = xf'(x) \tag{8}$$

Chúng ta nói hai toán tử bằng nhau, $\widehat{A} = \widehat{B}$, nếu $\widehat{A}f(x) = \widehat{B}f(x)$ với mọi hàm $f(x)$. Ví dụ, từ phương trình (7), ta có

$$\widehat{D}\widehat{x}f(x) = f(x) + x\frac{d}{dx}f(x) = (\widehat{1} + \widehat{x}\widehat{D})f(x) \tag{9}$$

Như vậy

$$\widehat{D}\widehat{x} = (\widehat{1} + \widehat{x}\widehat{D}) = (1 + \widehat{x}\widehat{D}) \tag{10}$$

Toán tử $\widehat{1}$ (nhân với 1) được gọi là *toán tử đơn vị*. Chúng ta thường không ghi dấu mũ lên các toán tử là hằng số.

1.4 Toán tử tuyến tính

Toán tử $\widehat{A}$ được gọi là *toán tử tuyến tính* nếu nó thỏa các điều kiện sau

$$\widehat{A}[f(x)+g(x)] = \widehat{A}f(x) + \widehat{A}g(x) \tag{11}$$

$$\widehat{A}cf(x) = c\widehat{A}f(x) \tag{12}$$

trong đó f và g là những hàm bất kì, còn c là hằng số. Ví dụ, toán tử đạo hàm là toán tử tuyến tính nhưng toán tử căn bậc hai thì không tuyến tính. Thật vậy, ta có

$$\begin{aligned}\widehat{D}[f(x)+g(x)] = \widehat{D}f(x) + \widehat{D}f(x) = f'(x) + g'(x)\\ \widehat{D}[cf(x)] = c\widehat{D}f(x) = cf'(x)\end{aligned}$$

Trong khi đó

$$\sqrt{f(x)+g(x)} \neq \sqrt{f(x)} + \sqrt{g(x)}$$

Nếu $\widehat{A}, \widehat{B}$ và $\widehat{C}$ là những toán tử tuyến tính, thì

$$(\widehat{A}+\widehat{B})\widehat{C} = \widehat{A}\widehat{C} + \widehat{B}\widehat{C} \tag{13}$$

Để chứng minh (13), ta phải chứng minh $(\widehat{A}+\widehat{B})\widehat{C}$ và $\widehat{A}\widehat{C} + \widehat{B}\widehat{C}$ cho cùng một kết quả khi được áp dụng lên một hàm $f(x)$ tùy ý. Nghĩa là

$$[(\widehat{A}+\widehat{B})\widehat{C}]f(x) = (\widehat{A}\widehat{C} + \widehat{B}\widehat{C})f(x)$$

Ta xét vế phải

$$[(\widehat{A}+\widehat{B})\widehat{C}]f(x) = (\widehat{A}+\widehat{B})(\widehat{C}f(x)) = (\widehat{A}+\widehat{B})g(x) = \widehat{A}g(x) + \widehat{B}g(x)$$

Tiếp theo, ta xét vế trái

$$(\widehat{A}\widehat{C}+\widehat{B}\widehat{C})f(x) = \widehat{A}\widehat{C}f(x)+\widehat{B}\widehat{C}f(x) = \widehat{A}(\widehat{C}f(x))+\widehat{B}(\widehat{C}f(x)) = \widehat{A}g(x)+\widehat{B}g(x)$$

Như vậy

$$[(\widehat{A}+\widehat{B})\widehat{C}]f(x) = (\widehat{A}\widehat{C} + \widehat{B}\widehat{C})f(x) = \widehat{A}g(x) + \widehat{B}g(x)$$

Tương tự, ta có

$$\widehat{A}(\widehat{B}+\widehat{C}) = \widehat{A}\widehat{B} + \widehat{A}\widehat{C} \tag{14}$$

Ví dụ: Tính $(\widehat{D}+\widehat{x})^2$
Cách 1

$$\begin{aligned}(\widehat{D}+\widehat{x})^2 &= (\widehat{D}+\widehat{x})(\widehat{D}+\widehat{x})\\ &= \widehat{D}(\widehat{D}+\widehat{x}) + \widehat{x}(\widehat{D}+\widehat{x})\\ &= \widehat{D}\widehat{D} + \widehat{D}\widehat{x} + \widehat{x}\widehat{D} + \widehat{x}\widehat{x}\\ &= \widehat{D}^2 + \widehat{x}\widehat{D} + 1 + \widehat{x}\widehat{D} + x^2\\ &= \widehat{D}^2 + 2x\widehat{D} + x^2 + 1\end{aligned}$$

Cách 2

$$\begin{aligned}
(\widehat{D}+\widehat{x})^2 f &= (\widehat{D}+\widehat{x})[(\widehat{D}+\widehat{x})f = (\widehat{D}+\widehat{x})(f'+xf) \\
&= \widehat{D}(f'+xf)+\widehat{x}(f'+xf) = \widehat{D}f'+\widehat{D}(xf)+xf'+x^2 f \\
&= \widehat{D}^2 f + x\widehat{D}f + f\widehat{D}x + xf' + x^2 f \\
&= \widehat{D}^2 f + x\widehat{D}f + f + x\widehat{D}f + x^2 f \\
&= (\widehat{D}^2 + 2\widehat{x}\widehat{D} + x^2 + 1)f
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow (\widehat{D}+\widehat{x})^2 = \widehat{D}^2 + 2\widehat{x}\widehat{D} + x^2 + 1$$

2 Tính chất của toán tử

2.1 Phép nhân các toán tử

Phép nhân các toán tử tuân theo luật kết hợp

$$\widehat{A}(\widehat{B}\widehat{C}) = (\widehat{A}\widehat{B})\widehat{C} \tag{15}$$

Ví dụ: Đặt $\widehat{A}=\widehat{D}$; $\widehat{B}=\widehat{x}$; $\widehat{C}=\widehat{3}$, ta có

$$\widehat{A}\widehat{B}f = \widehat{D}\widehat{x}f = (1+\widehat{x}\widehat{D})f$$

Vậy

$$(\widehat{A}\widehat{B})\widehat{C}f = (1+\widehat{x}\widehat{D})3f = 3f + 3xf' = (3+3x\widehat{D})f$$

suy ra

$$(\widehat{A}\widehat{B})\widehat{C} = 3 + 3x\widehat{D}$$

Mặt khác, ta có

$$(\widehat{B}\widehat{C})f = 3\widehat{x}f = 3xf$$

Vậy

$$\widehat{A}(\widehat{B}\widehat{C})f = \widehat{D}(3xf) = 3f + 3xf' = (3+3x\widehat{D})f$$

hay

$$\widehat{A}(\widehat{B}\widehat{C}) = 3 + 3x\widehat{D} = (\widehat{A}\widehat{B})\widehat{C}$$

vậy phù hợp với (15).

2.2 Các toán tử giao hoán

Hai toán tử $\widehat{A}$ và $\widehat{B}$ được gọi là ***giao hoán*** (commute) với nhau nếu

$$\widehat{A}\widehat{B} = \widehat{B}\widehat{A} \qquad \text{hay} \qquad \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A} = 0$$

Hiệu $\widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}$ được kí hiệu là $[\widehat{A},\widehat{B}]$ và được gọi là ***phép giao hoán*** (*commutator*). Nếu $\widehat{A}$ và $\widehat{B}$ không giao hoán với nhau thì $\widehat{A}\widehat{B} = -\widehat{B}\widehat{A}$. Thật vậy, ta có

$$[\widehat{A},\widehat{B}] = \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A} = -(\widehat{B}\widehat{A} - \widehat{A}\widehat{B}) = -[\widehat{B},\widehat{A}] \tag{16}$$

Ví dụ 1: Tính $[\widehat{3},\widehat{D}]$. Ta có

$$[\widehat{3},\widehat{D}]f = \widehat{3}\widehat{D}f - \widehat{D}\widehat{3}f = 3\widehat{D}f - 3\widehat{D}f = 0$$

Như vậy, $\widehat{3}$ và $\widehat{D}$ là hai toán tử giao hoán.

Ví dụ 2: Tính $[\widehat{D},\widehat{x}^2]$; $[\widehat{x}^2,\widehat{D}]$

$$[\widehat{D},\widehat{x}^2]f = \widehat{D}\widehat{x}^2f - \widehat{x}^2\widehat{D}f = 2xf + x^2\widehat{D}f - x^2\widehat{D}f = 2xf$$

$$\Rightarrow\ [\widehat{D},\widehat{x}^2] = 2x$$

$$[\widehat{x}^2,\widehat{D}]f = \widehat{x}^2\widehat{D}f - \widehat{D}\widehat{x}^2f = x^2\widehat{D}f - 2xf - x^2\widehat{D}f = -2xf$$

$$\Rightarrow\ [\widehat{x}^2,\widehat{D}] = -2x$$

Như vậy, $\widehat{x}^2$ và $\widehat{D}$ không giao hoán với nhau. Ta thấy $[\widehat{D},\widehat{x}^2] = -[\widehat{x}^2,\widehat{D}]$, phù hợp với (16).

Nếu $\widehat{A},\widehat{B}$ là những toán tử tuyến tính và k là hằng số, ta có

$$[\widehat{A},k\widehat{B}] = [k\widehat{A},\widehat{B}] = k[\widehat{A},\widehat{B}] \tag{17}$$

Thật vậy

$$[\widehat{A},k\widehat{B}] = \widehat{A}(k\widehat{B}) - k\widehat{B}\widehat{A} = k\widehat{A}\widehat{B} - k\widehat{B}\widehat{A} \tag{18}$$

Do đó

$$[\widehat{A},k\widehat{B}] = k\widehat{A}\widehat{B} - k\widehat{B}\widehat{A} = k(\widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}) = k[\widehat{A},\widehat{B}] \tag{19}$$

Tương tự

$$[k\widehat{A},\widehat{B}] = k\widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}(k\widehat{A}) = k\widehat{A}\widehat{B} - k\widehat{B}\widehat{A} = k(\widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}) = k[\widehat{A},\widehat{B}] \tag{20}$$

Từ (19) và (20), ta có

$$[\widehat{A},k\widehat{B}] = [k\widehat{A},\widehat{B}] = k[\widehat{A},\widehat{B}] \tag{21}$$

2.3 Một số phép giao hoán quan trọng

2.3.1 *Công thức 1:*

$$[\widehat{A},\widehat{B}\widehat{C}] = [\widehat{A},\widehat{B}]\widehat{C} + \widehat{B}[\widehat{A},\widehat{C}] \tag{22}$$

Chứng minh:

$$\begin{aligned}
[\widehat{A},\widehat{B}]\widehat{C} + \widehat{B}[\widehat{A},\widehat{C}] &= (\widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A})\widehat{C} + \widehat{B}(\widehat{A}\widehat{C} - \widehat{C}\widehat{A}) \\
&= \widehat{A}\widehat{B}\widehat{C} - \widehat{B}\widehat{A}\widehat{C} + \widehat{B}\widehat{A}\widehat{C} - \widehat{B}\widehat{C}\widehat{A} \\
&= \widehat{A}\widehat{B}\widehat{C} - \widehat{B}\widehat{C}\widehat{A} = \widehat{A}(\widehat{B}\widehat{C}) - (\widehat{B}\widehat{C})\widehat{A} \\
&= [\widehat{A},\widehat{B}\widehat{C}]
\end{aligned}$$

2.3.2 *Công thức 2:*

$$[\widehat{A}\widehat{B},\widehat{C}] = \widehat{A}[\widehat{B},\widehat{C}] + [\widehat{A},\widehat{C}]\widehat{B} \tag{23}$$

Chứng minh:

Ta có thể chứng minh tương tự như trên hoặc theo cách sau. Ta có

$$\begin{aligned}
[\widehat{A}\widehat{B},\widehat{C}] &= (\widehat{A}\widehat{B})\widehat{C} - \widehat{C}(\widehat{A}\widehat{B}) \\
&= (\widehat{A}\widehat{B})\widehat{C} - \widehat{C}(\widehat{A}\widehat{B}) + (\widehat{A}\widehat{C})\widehat{B} - \widehat{A}(\widehat{C}\widehat{B}) \\
&= (\widehat{A}\widehat{B})\widehat{C} - \widehat{A}(\widehat{C}\widehat{B}) + (\widehat{A}\widehat{C})\widehat{B} - \widehat{C}(\widehat{A}\widehat{B}) \\
&= \widehat{A}(\widehat{B}\widehat{C}) - \widehat{A}(\widehat{C}\widehat{B}) + (\widehat{A}\widehat{C})\widehat{B} - (\widehat{C}\widehat{A})\widehat{B} \\
&= \widehat{A}(\widehat{B}\widehat{C} - \widehat{C}\widehat{B}) + (\widehat{A}\widehat{C} - \widehat{C}\widehat{A})\widehat{B} \\
&= \widehat{A}[\widehat{B},\widehat{C}] + [\widehat{A},\widehat{C}]\widehat{B}
\end{aligned}$$

Trong trường hợp, $\widehat{B} = \widehat{A} = \widehat{C}$, ta có

$$[\widehat{A}^2,\widehat{A}] = [\widehat{A}\widehat{A},\widehat{A}] = \widehat{A}[\widehat{A},\widehat{A}] + [\widehat{A},\widehat{A}]\widehat{A} = \widehat{A} \times 0 + 0 \times \widehat{A} = 0 \tag{24}$$

Tương tự

$$[\widehat{A}^3,\widehat{A}] = [\widehat{A}\widehat{A}^2,\widehat{A}] = \widehat{A}[\widehat{A}^2,\widehat{A}] + [\widehat{A},\widehat{A}]\widehat{A}^2 = \widehat{A}^2 \times 0 + 0 \times \widehat{A} = 0 \tag{25}$$

2.3.3 *Công thức 3:*

Từ (24) và (25), ta có

$$[\widehat{A}^n,\widehat{A}] = 0 \tag{26}$$

Tương tự

$$[\widehat{A},\widehat{A}^n] = 0 \tag{27}$$

2.3.4 *Công thức 4:*

$$[\widehat{A},\widehat{B}+\widehat{C}] = [\widehat{A},\widehat{B}] + [\widehat{A},\widehat{C}] \tag{28}$$

Chứng minh:

$$\begin{aligned}
[\widehat{A},\widehat{B}+\widehat{C}] &= \widehat{A}(\widehat{B}+\widehat{C}) - (\widehat{B}+\widehat{C})\widehat{A} \\
&= \widehat{A}\widehat{B} + \widehat{A}\widehat{C} - \widehat{B}\widehat{A} - \widehat{C}\widehat{A} \\
&= (\widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}) + (\widehat{A}\widehat{C} - \widehat{C}\widehat{A}) \\
&= [\widehat{A},\widehat{B}] + [\widehat{A},\widehat{C}]
\end{aligned}$$

Tương tự, ta có

$$[\widehat{A}+\widehat{B},\widehat{C}] = [\widehat{A},\widehat{C}] + [\widehat{B},\widehat{C}] \tag{29}$$

3 Đặc hàm và đặc trị

Giả sử tác dụng lên hàm $f(x)$ bởi một toán tử $\widehat{A}$, ta thu được kết quả là chính hàm $f(x)$ đó nhân với một hằng số k. Khi đó, ta nói rằng hàm $f(x)$ là ***đặc hàm*** (eigenfunction) của toán tử $\widehat{A}$, với ***đặc trị*** (eigenvalue) là k. Phương trình biểu diễn mối liên hệ giữa toán tử $\widehat{A}$, đặc hàm $f(x)$ và đặc trị k được gọi là ***phương trình đặc trị*** (eigenvalue equation)

$$\widehat{A}f(x) = kf(x) \tag{30}$$

Ví dụ 1

$$\widehat{D}e^{2x} = \frac{d}{dx}e^{2x} = 2e^{2x}$$

ta nói e^{2x} là đặc hàm của toán tử $\widehat{D}$ với đặc trị là 2. Phương trình đặc trị

$$\widehat{D}e^{2x} = 2e^{2x}$$

Ví dụ 2

$$\widehat{D}^2\sin(ax) = \widehat{D}[\widehat{D}\sin(ax)] = \widehat{D}[a\cos(ax)] = -a^2\sin(ax)$$

vậy $\sin(ax)$ là đặc hàm của toán tử $\widehat{D}^2$ với đặc trị là $-a^2$. Ta có, phương trình đặc trị

$$\widehat{D}^2\sin(ax) = -a^2\sin(ax)$$

Như vậy, phương trình Schrödinger (1) cho hệ một hạt trong không gian một chiều cũng là một phương trình đặc trị.

Sau đây, chúng ta thử tìm tất cả những đặc hàm và đặc trị cho toán tử đạo hàm $\widehat{D}$. Từ phương trình (30), ta có

$$\widehat{D}f(x) = \frac{df(x)}{dx} = kf(x) \tag{31}$$

Phương trình (31) tương đương với

$$\frac{df(x)}{f(x)} = kdx \tag{32}$$

Lấy tích phân (32) ta được

$$lnf(x) = kx + \text{constant}$$
$$f(x) = e^{\text{constant}}e^{kx}$$

vậy

$$f(x) = ce^{kx} \tag{33}$$

Tất cả những hàm thỏa (33) là đặc hàm của $\widehat{D}$, với các đặc trị là k. Và nếu $f(x)$ và đặc hàm của $\widehat{D}$, thì $cf(x)$ cũng là đặc hàm của $\widehat{D}$. Điều đó cũng đúng đối với những đặc hàm của mọi toán tử tuyến tính. Thật vậy, nếu $f(x)$ là đặc hàm của $\widehat{A}$, với đặc trị k, nghĩa là

$$\widehat{A}f(x) = kf(x)$$

và $\widehat{A}$ là toán tử tuyến tính, ta có

$$\widehat{A}[cf(x)] = c\widehat{A}f(x) = ckf(x) = k[cf(x)] \tag{34}$$

Như vậy

$$\widehat{A}[cf(x)] = k[cf(x)] \tag{35}$$

Với mỗi giá trị k trong (31), chúng ta có một đặc hàm; những đặc hàm với cùng giá trị k nhưng giá trị c khác nhau thì không độc lập tuyến tính[1] với nhau, chúng phụ thuộc lẫn nhau.

4 Mối liên hệ giữa toán tử và cơ học lượng tử

Tiếp theo, ta xét mối liên hệ giữa toán tử và cơ học lượng tử. Chúng ta so sánh phương trình Schrödinger cho hệ một hạt trong không gian một chiều

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

với phương trình đặc trị

$$\widehat{A}f(x) = kf(x)$$

Ta thấy, rõ ràng các giá trị năng lượng E là các đặc trị; các đặc hàm là những hàm sóng $\psi(x)$; toán tử của những đặc hàm và đặc trị này là

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \tag{36}$$

và được gọi là ***toán tử Hamiltonian*** hay ***toán tử năng lượng*** của hệ.

Năng lượng của hệ bằng tổng động năng và thế năng. Trong (36) thì $V(x)$ là thế năng, nên $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ là toán tử mô tả động năng của hệ. Theo cơ học cổ điển, động năng của một hạt theo phương x được xác định bởi

$$E_x = \frac{1}{2}mv_x^2 \tag{37}$$

[1]Hàm f_1, f_2 và f_3 được gọi là độc lập tuyến tính nếu phương trình $c_1f_1+c_2f_2+c_3f_3 = 0$ chỉ xảy ra khi các hằng số $c_1 = c_2 = c_3 = 0$. Ví dụ, các hàm $f_1 = 3x, f_2 = 5x^2 - x, f_3 = x^2$ là những hàm phụ thuộc tuyến tính, vì $f_1 + 3f_2 - 15f_3 = 0$; trong khi đó, các hàm $g_1 = 1, g_2 = 2x, g_3 = x^2$ là những hàm độc lập tuyến tính vì ta không tìm được biểu thức liên hện giữa chúng.

Mặt khác, ta có mối liên hệ giữa khối lượng m, vận tốc v_x và động lượng p_x như sau

$$p_x = mv_x \ \Rightarrow v_x = \frac{p_x}{m}$$

Do đó, ta có

$$E_x = \frac{1}{2}mv_x^2 = \frac{p_x^2}{2m} \tag{38}$$

Như vậy, theo cơ học cổ điển năng lượng của hệ được tính như sau

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + V(x) \tag{39}$$

Phương trình (39) được gọi là hàm Hamiltonian cho hạt có khối lượng m di chuyển trong không gian một chiều và phụ thuộc vào thế năng $V(x)$.

So sánh phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian

$$\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\Big]\psi(x) = E\psi(x)$$

với phương trình (39), ta thấy hàm Hamiltonian (39) trong cơ học cổ điển được thay thế bởi toán tử Hamiltonian trong cơ học lượng tử

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \leftrightarrow \frac{p_x^2}{2m} + V(x) \tag{40}$$

Động năng $\dfrac{p_x^2}{2m}$ trong cơ học cổ điển cũng được thay thế bởi toán tử động năng trong cơ học lượng tử

$$\widehat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

Mối liên hệ giữa các đại lượng vật lí trong cơ học cổ điển và cơ học lượng tử như thế này là rất phổ biến. Do đó, trong cơ học lượng tử có một định đề quan trọng như sau:

Mỗi thuộc tính vật lí như năng lượng, động lượng, tọa độ, mômen góc ... sẽ có một toán tử tương ứng.

Các thuộc tính như tọa độ x, y, z và thế năng V trong cơ học lượng tử và cơ học cổ điển có dạng giống nhau. Những thuộc tính khác thì không giống nhau. Ví dụ, các thành phần động lượng p_x được thay bằng các toán tử

$$\widehat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{41}$$

với $\dfrac{1}{i} = -i$ vì

$$\frac{1}{i} = \frac{i}{i^2} = \frac{i}{-1} = -i$$

Những thuộc tính khác được xác định bằng những toán tử được ghi trong bảng 1.1 sau

Bảng 1.1: Những toán tử thường được sử dụng trong cơ học lượng tử

Thuộc tính	Cơ học cổ điển	Cơ học lượng tử
Tọa độ	x, y, z, r	x, y, z, r
Thế năng	$V(x), V(y), V(z)$	$V(x), V(y), V(z)$
Động lượng		
x	p_x	$\widehat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$
y	p_y	$\widehat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$
z	p_z	$\widehat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$
Động năng		
x	$\frac{p_x^2}{2m}$	$\widehat{T}_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$
y	$\frac{p_y^2}{2m}$	$\widehat{T}_y = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}$
z	$\frac{p_z^2}{2m}$	$\widehat{T}_z = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}$
Mô-men góc	L_z	$\widehat{L}_z = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})$

Những toán tử khác có thể được xây dựng từ những toán tử đã cho trong bảng trên. Ví dụ, toán tử $\widehat{p}_x^2$ được xây dựng từ $\widehat{p}_x$ như sau

$$\widehat{p}_x^2 = \widehat{p}_x\widehat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Big(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Big) = -h^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{42}$$

Tương tự, ta có

$$\widehat{p}_y^2 = -h^2\frac{\partial^2}{\partial y^2} \qquad \widehat{p}_z^2 = -h^2\frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{43}$$

5 Toán tử và những thuộc tính vật lí

Xét sự chuyển động của hạt trong hộp một chiều được mô tả bởi hàm sóng

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin(\frac{n\pi x}{l}) \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

Ta thấy ψ_n là đặc hàm của toán tử năng lượng $\widehat{H}$ với đặc trị là

$$E = \frac{n^2h^2}{8ml^2}$$

Thật vậy, đối với bài toán hạt trong hộp thì thế năng $V(x) = 0$, nên ta có

$$\widehat{H} = \widehat{T}_x + \widehat{V}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

Do đó
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Big[\sqrt{\frac{2}{l}}\sin(\frac{n\pi x}{l})\Big] = \frac{n^2h^2}{8ml^2}\Big[\sqrt{\frac{2}{l}}\sin(\frac{n\pi x}{l})\Big]$$
Như vậy, nếu thực hiện phép đo năng lượng của một hạt trong hộp một chiều, ta sẽ thu được kết quả là đặc trị năng lượng E của toán tử năng lượng $\widehat{H}$.

Một cách tổng quát, ***nếu $\widehat{B}$ là toán tử mô tả một thuộc tính vật lí B thì mỗi phép đo thuộc tính B cho ra một đặc trị β_i của toán tử $\widehat{B}$.*** Đây cũng là một định đề của cơ học lượng tử. Ví dụ, nếu ψ_i là các đặc hàm của $\widehat{H}$, thì ta có
$$\widehat{H}\psi_i = E_i\psi_i \tag{44}$$
Nghĩa là mỗi phép đo thuộc tính vật lí được mô ta bởi toán tử năng lượng $\widehat{H}$ sẽ cho ta một giá trị E_i. Nếu ψ_i là hàm chỉ phụ thuộc tọa độ, không phụ thuộc thời gian thì (44) là dạng tổng quát của phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian.

Tiếp theo, chúng ta xét hàm trạng thái phụ thuộc thời gian
$$\Psi = \Psi(x,t) \tag{45}$$
Nếu trạng thái của một hệ được mô tả bởi hàm sóng Ψ, thì hàm sóng Ψ đó sẽ chứa tất cả những thông tin mà chúng ta cần biết về hệ đó. Vậy Ψ sẽ cung cấp cho chúng ta những thông tin gì về một thuộc tính B? Bây giờ, chúng ta giả định rằng nếu Ψ là đặc hàm của $\widehat{B}$ với đặc trị β_i, khi đó một phép đo thuộc tính B sẽ cho ta giá trị β_i. Chẳng hạn, chúng ta xét thuộc tính năng lượng. Giả sử hệ ở trạng thái tĩnh với hàm trạng thái
$$\Psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(x) \tag{46}$$
ta có
$$\widehat{H}\Psi(x,t) = \widehat{H}[e^{-iEt/\hbar}\psi(x)] = e^{-iEt/\hbar}\widehat{H}\psi(x) \tag{47}$$
áp dụng $\widehat{H}\psi(x) = E\psi(x)$, ta được
$$\widehat{H}\Psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}E\psi(x) = Ee^{-iEt/\hbar}\psi(x) = E\Psi(x,t)$$
vậy
$$\widehat{H}\Psi = E\Psi \tag{48}$$
Do đó, ở trạng thái tĩnh, $\Psi(x,t)$ là một đặc hàm của $\widehat{H}$, chúng ta chắc chắn tìm được giá trị E khi thực hiện phép đo năng lượng. Phương trình (48) là một cách viết khác của phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian.

Các toán tử trong cơ học lượng tử có hai tính chất đặc trưng quan trọng là ***tuyến tính*** và ***Hermitian***. Tính chất tuyến tính của chúng liên quan đến nguyên lí chồng chất. Tính chất Hermitian liên quan đến kết quả thực của phép đo một thuộc tính vật lí. Chúng ta sẽ khảo sát kĩ hơn tính chất này trong những phần sau.

Bài tập

1. Cho $\widehat{D} = \dfrac{d}{dx}$ và hàm $f(x)$ được xác định bởi

$$f(x) = \sin x + e^{ix}$$

Hãy tính

$$(\widehat{D}^2 + \widehat{D}\widehat{x})f(x)$$

2. Chứng minh

$$[\widehat{A} + \widehat{B}, \widehat{C} + \widehat{D}] = [\widehat{A}, \widehat{C}] + [\widehat{A}, \widehat{D}] + [\widehat{B}, \widehat{C}] + [\widehat{B}, \widehat{D}]$$

Từ đó, tính

$$[x + \frac{d}{dx}, \frac{d^2}{dx^2} + x]$$

3. Cho biết

$$\widehat{x} = x \qquad \widehat{p}_x = -i\hbar\frac{d}{dx}$$

Chứng minh

$$[\widehat{x}, \widehat{p}_x] = i\hbar\ ; \qquad [\widehat{x}, \widehat{p}_x^2] = 2\hbar^2\frac{d}{dx}$$

4. Tìm những hàm $g(x)$ là đặc hàm của $\widehat{p}_x$ với đặc trị k

$$\widehat{p}_x g(x) = kg(x)$$

Chứng tỏ rằng hàm sóng của hạt trong hộp một chiều không phải là đặc hàm của $\widehat{p}_x$.
5. Tìm những hàm $f(x)$ là đặc hàm của $\widehat{p}_x^2$ với đặc trị α. Chứng tỏ rằng hàm sóng của hạt trong hộp một chiều là đặc hàm của $\widehat{p}_x^2$.