QUANTUM MECHANICS 3

ĐÀO DUY TÙNG

Ngày 15 tháng 1 năm 2025

Mục lục

1 Một số công thức toán.

Harmonic oscillator:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left[\hat{p}^2 + (m\omega x)^2\right]$$

$$\hat{a}_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\mp i\hat{p} + m\omega x\right)$$

$$\hat{a}_\pm = \frac{1}{2\hbar m\omega}\left[\hat{p}^2 + (m\omega x)^2\right] - \frac{i}{2\hbar}\left[\hat{x}, \hat{p}\right]$$

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

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2}\right)) = \hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\right)$$

$$\psi_n(x) = A_n(a\hat{a}_+^n)\psi_0(x), \text{ with } E_n = \left(n + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)$$

$$\hat{a}_+\psi_n = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}, \quad \hat{a}_-\psi_n = \sqrt{n}\,\psi_{n-1}$$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_+ + \hat{a}_-); \ \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}_+ - \hat{a}_-)$$

Gaussian integral:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

Công thức tổng quát của tích phân Gaussian:

1. Với hạng tử tuyến tính:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\, e^{\frac{b^2}{4a}}, \quad a > 0.$$

2. Với hạng tử x^n:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-ax^2} dx = \begin{cases} \frac{(n-1)!!}{(2a)^{n/2}}\sqrt{\frac{\pi}{a}}, & \text{n chẵn,} \\ 0, & \text{n lẻ.} \end{cases}$$

Công thức hàm delta Dirac

$$\lim_{\epsilon \to 0} \frac{\epsilon}{(\omega_{fi} - 2\omega)^2 + \epsilon^2} = \pi\delta(\omega_{fi} - 2\omega).$$

Công thức tích phân:

$$\int x^n e^{-\alpha x}\, dx = \frac{n!}{(\alpha^{n+1})}$$

Công thức tọa độ cầu

$$x = r\sin\theta\cos\phi \rightarrow dx = \sin\theta\cos\phi\, dr$$

$$y = r\sin\theta\sin\phi \rightarrow dy = \sin\theta\sin\phi\, dr$$

$$z = r\cos\theta \rightarrow dz = \cos\theta\, dr$$

Công thức hàm Gamma:

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1}e^{-t}dt$$

$$\Gamma(n) = (n-1)! \text{ with n integer ; } \Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$$

Công thức Baker-Campell-Hausdorff

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\left[\hat{A},\hat{B}\right]/2}$$

Chứng minh giao hoán tử

$$\left[A, e^B\right] = [A,B]\, e^B$$

Ta có:

$$\begin{aligned}
\sum_n [A, B^n]\frac{1}{n!} &= \sum_n \frac{1}{n!}nB^{n-1}[A,B] \\
&= \sum_{n=1}\frac{1}{(n-1)!}B^{n-1}[A,B] \\
&= \sum_m \frac{1}{(m)!}B^m[A,B] \\
&= [A,B]\, e^B
\end{aligned}$$

Công thức tích phân đặc biệt

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2 x}{x^2}dx = \pi$$

$$\int_0^\infty re^{-rz}dr = \frac{1}{z^2}\text{ , Re(z)} > 0$$

2 Chapter 6: SYMMETRIES AND CONSERVATION LAWS.

2.1 The Translation operators.

$$\widehat{T}(a)\Psi(x) = \Psi(x-a)$$

Parity Operators:

$$\widehat{\Pi}\Psi(\vec{r}) = \Psi(-\vec{r})$$
$$\widehat{\Pi}\Psi(x) = \Psi(-x)$$
$$\widehat{\Pi}\Psi(r,\theta,\phi) = \Psi(r,\pi-\theta,\phi+\pi)$$

Rotation Operators:

$$\widehat{R_z}(\varphi)\Psi(r,\theta,\phi) = \Psi(r,\theta,\phi-\varphi)$$

Khai triển Taylor toán tử tịnh tiến T:

$$\begin{aligned}
\widehat{T}(a)\Psi(x) = \Psi(x-a) &= \Psi(x) - a\Psi(x) + \frac{(-a)^2}{2!}\Psi''(x) + ... \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-a)^n}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\Psi(x) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-a\frac{\widehat{P}}{-i\hbar}\right)^n\Psi(x) \\
&= \left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(-\frac{ia\widehat{p}}{\hbar}\right)^n}{n!}\right)\Psi(x) \\
&= exp(\frac{-ia\widehat{p}}{\hbar})\Psi(x) = T_x(a)\Psi(x)
\end{aligned}$$

Ta có:

$$\widehat{T}^{-1}(a) = \widehat{T}(-a) = exp(\frac{ia\widehat{p}}{\hbar}) = \widehat{T}^{\dagger}(a)$$
$$\widehat{T}(a)\widehat{T}(-a) = 1$$
$$\widehat{T}^{\dagger}(a)\widehat{T}(a) = 1$$

Lấy trị trung bình cho trạng thái đã bị tịnh tiến:

$$\langle \Psi(x-a)|\widehat{Q}|\Psi(x-a)\rangle$$
$$= \langle \Psi(x)|\widehat{T}^{\dagger}(a)\widehat{Q}\widehat{T}(a)|\Psi(x)\rangle$$

Thay vì biến đổi hàm sóng thì ta có thể biến đổi toán tử.

Có thể chứng minh:

$$\widehat{T}^{\dagger}(a)\widehat{x}\widehat{T}(a) = \widehat{x} + a$$
$$\widehat{T}^{\dagger}(a)\widehat{p}\widehat{T}(a) = \widehat{p}$$
$$\widehat{T}^{\dagger}(a)\widehat{Q}(\vec{x},\vec{p})\widehat{T}(a) = \widehat{Q}(\widehat{x}+a,\widehat{p})$$

Đối xứng tịnh tiến: $\left[H, \widehat{T}\right] = 0$

$$\widehat{T} = exp(-\frac{i\delta\widehat{p}}{\hbar}) \approx 1 - \frac{i\delta\widehat{p}}{\hbar}$$
$$\left[\widehat{H}, \widehat{T}\right] = 0$$
$$\left[\widehat{H}, 1 - \frac{i\delta\widehat{p}}{\hbar}\right] = 0$$
$$\left[\widehat{H}, \widehat{p}\right] = 0$$

Parity

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

$\hat{\Pi}^{\dagger}\vec{L}\hat{\Pi} = \vec{L}$(không đổi dấu khi tác dụng toán tử chẵn lẽ -> giả vector)

Nếu đổi dấu $\rightarrow$ vector

$$\widehat{\Pi}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$$

Trong tọa độ cầu

$$\widehat{\Pi}\psi(r,\theta,\phi) = \psi(r, \pi-\theta, \phi+\pi)$$

Với:

$$\psi_{nlm} = R_n(r) Y_l^m(\theta, phi)$$
$$Y_l^m(\theta, phi) = A e^{im\phi} P_l^m(\cos\theta)$$
$$P_l^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \left(\frac{d}{dx}\right)^m P_l(x)$$

Cho toán tử tác động vào, ta được:

$$Y_l^m(\pi-\theta, \phi+\pi) = A e^{i(\phi+\pi)m} P_l^m(-\cos\theta)$$
$$P_l^m(-x) = (-1)^m \left[1-(-x)^2\right]^{m/2} \left(\frac{d}{d(-x)}\right)^n \left[\frac{1}{2^l l!}\left(\frac{d}{d(-x)}\right)^l \left((-x)^2-1\right)^l\right]$$
$$= (-1)^l (-1)^m ...$$

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

Vậy, ta thu được:

$$Y_l^m(\pi-\theta, \phi+\pi) = (-1)^l (-1)^{2m} Y_l^m(\theta, \phi)$$

Xét Hamiltonian:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + ... + V(|\vec{r}|)$$

Vì thay $-x$ vào cũng không thay đổi Hamilton. Do đó:

$$\left[\widehat{H}, \widehat{\Pi}\right] = 0$$

2.1.1 Parity Selection rules.

Xem xét lưỡng cực điện:

$$\vec{p_e} = q\vec{r}$$

Kẹp toán tử chẵn lẻ vào:

$$\widehat{\Pi}^\dagger \vec{p_e} \widehat{\Pi} = -\vec{p_e}$$

Kẹp braket, ta được:

$$\langle n'l'm'|\vec{p_e}|nlm\rangle = -\langle n'l'm'|\widehat{\Pi}^\dagger \vec{p_e}\widehat{\Pi}|nlm\rangle$$
$$= (-1)^{l+l'} \langle n'l'm'|\vec{p_e}|nlm\rangle$$
$$\Rightarrow (-1)^{l+l'} \langle n'l'm'|\vec{p_e}|nlm\rangle \left(1+(-1)^{l+l'}\right) = 0$$

Với:

$$(-1)^{l+l'}\langle n'l'm'|\vec{p_e}|nlm\rangle \neq 0: \; l+l' \text{ is odd}$$

$$(-1)^{l+l'}\langle n'l'm'|\vec{p_e}|nlm\rangle = 0: \; l+l' \text{ is even}$$

$\rightarrow$ Laporte's rule

2.2 Rotational symmetry.

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{\ddagger}(\varphi)\psi(r,\theta,\phi) &= \psi(r,\theta,\phi-\varphi) = \psi'(r,\theta,\phi) \\
&= \psi(r,\theta,\phi) - \varphi\frac{\partial\psi}{\partial\phi} + \frac{(-\varphi)^2}{2!}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + ... \\
&= \left(1 - \varphi\frac{\hat{L_z}}{-i\hbar} + ...\right)\psi \\
&= \left(1 - \frac{i\varphi\hat{L_z}}{\hbar} + ...\right)\psi \\
&= e^{-i\varphi\hat{L_z}/\hbar}\psi
\end{aligned}$$

Gần đúng

$$\begin{aligned}
\widehat{\mathcal{R}}_z(\delta) &= 1 - \frac{i\delta}{\hbar}\hat{L_z} \\
\hat{x}' &= \widetilde{\mathcal{R}}_z^{\dagger}\hat{x}\widehat{\mathcal{R}}_z \\
&= \left(1 + i\frac{\delta}{\hbar}\hat{L_z}\right)\hat{x}\left(1 - i\frac{\delta}{\hbar}\hat{L_z}\right) \\
&= \hat{x} + i\frac{\delta}{\hbar}\left(\hat{L_z}\hat{x} - \hat{x}\hat{L_z}\right) \\
&= \hat{x} + i\frac{\delta}{\hbar}\left[\hat{L_z}, \hat{x}\right] = [xp_y - yp_x, x] \\
&= [xp_y, x] - [yp_x, x] \\
x' &= 0 + -(-i\hbar)y = i\hbar y \\
=> \hat{x} + \frac{i\delta}{\hbar}(i\hbar y) &= \hat{x} - \delta y = x'
\end{aligned}$$

Tương tự, ta tính được:

$$\hat{y}' = \widehat{\mathcal{R}_{\ddagger}}^{\dagger}\hat{y}\widehat{\mathcal{R}_{\ddagger}} = \hat{y} + \delta x$$

Tương tự cho $\hat{z}'$

$$\begin{pmatrix} \hat{x}' \\ \hat{y}' \\ \hat{z}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \delta & 0 \\ \delta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{z} \\ \hat{y} \\ \hat{x} \end{pmatrix}$$

Với:

$$M = \begin{pmatrix} 1 & -\delta \\ \delta & 1 \end{pmatrix}$$

Nếu quay N lần thì:

$$\begin{pmatrix} \hat{x}' \\ \hat{y}' \\ \hat{z}' \end{pmatrix} = M^N \begin{pmatrix} \hat{z} \\ \hat{y} \\ \hat{x} \end{pmatrix},\ N \to \infty$$

$$\begin{aligned} M' &= S^{-1}MS \\ &= \begin{pmatrix} a1 & a2 \\ b1 & b2 \end{pmatrix}^{-1} M \begin{pmatrix} a1 & a2 \\ b1 & b2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Tìm hàm riêng trị riêng:

$$\det(M - \lambda I)$$

Ta tính thành phần trong det:

$$\begin{pmatrix} 1 & -\delta \\ \delta & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-\lambda & -\delta \\ \delta & 1-\lambda \end{pmatrix}$$

Do đó:

$$\det(M - \lambda I) = (1-\lambda)^2 + \delta^2 = 0 \to \lambda = 1 \pm i\delta$$

Hàm riêng:

Phương trình hàm riêng - trị riêng:

$$\begin{aligned} Mf &= \lambda f \\ => \begin{pmatrix} 1 & -\delta \\ \delta & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} &= 1 \pm i\delta \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \\ &=> a - \delta b = a(1 + i\delta) => -b = ia => b = -ia => a = ib \\ &=> \begin{pmatrix} ib \\ b \end{pmatrix} = b \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} => b = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

Tương tự $a = \frac{1}{\sqrt{2}}$
Vậy:

$$M'^N = S^{-1} M^N S$$
$$=> \begin{pmatrix} \lambda_1^N & 0 \\ 0 & \lambda_2^N \end{pmatrix} = S^{-1} M^N S$$

Tính các hệ số:

$$\lambda_1^N = (1 + i\delta)^N$$
$$= \left(1 + i\frac{\varphi}{N}\right)^N$$

Với $N \to \infty$

$$\lambda_1^N = e^{N \ln\left(1 + \frac{i\varphi}{N}\right)}$$

Với $x = \frac{1}{N} \to 0$

$$\lambda_1^N = e^{\frac{\ln(1+i\varphi x)}{x}}$$

Dùng L'Hopital

$$e^{\frac{i\varphi}{1+i\varphi x}/1} = e^{i\varphi}, \text{ với: } x \to 0$$

Do đó với $N \to \infty$:

$$M'^N = \begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi} \end{pmatrix}$$
$$=> M^N = S \begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi} \end{pmatrix} S^{-1}$$
$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Phép quay cho trường hợp tổng quát:

$$\mathcal{R}_{\vec{n}}(\varphi) = e^{\frac{-i}{\hbar}\varphi \vec{n}\cdot\widehat{\vec{L}}}$$
$$\left[\hat{L}_i, V_j\right] = i\hbar V_k \epsilon_{ijk}$$

Xét hệ quay liên tục:

$$H = T + V(r)$$

Khi đó:

$$\begin{aligned}
&[H, \mathcal{R}_n] = 0 \\
&\left[H, \mathcal{R}_\backslash(\delta)\right] = 0 \\
&\left[H, 1 - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{n}\hat{\vec{L}}\right] = 0 \\
&\begin{cases} \left[H, \vec{L}\right] = 0 \\ \left[H, L^2\right] = 0 \\ \left[L^2, L_z\right] = 0 \end{cases} => \begin{cases} H\left|nlm\right\rangle = E_n\left|nlm\right\rangle \\ L^2\left|nlm\right\rangle = \hbar^2 l(l+1)\left|nlm\right\rangle \\ L_z\left|nlm\right\rangle = m\hbar\left|nlm\right\rangle \end{cases}
\end{aligned}$$

Sau khi có: V_x, V_y, V_z, ta thiết lập:

$$V_\pm = V_x \pm iV_y$$

$$[L_z, V_\pm] = \pm\hbar V_\pm$$

$$\left[L^2, V_\pm\right] = ...$$

Selection Rule dựa trên Wigner - Eekart theorem

$$[L_z, f] = 0$$

$$[L_\pm, f] = 0$$

$$\left[L^2, f\right] = 0$$

Quy tắc lọc lựa cho các toán tử vô hướng:

Dẫn ra các giao hoán tử:

$$\begin{aligned}
\langle n'l'm'|\,[L_z, f]\,|nlm\rangle &= 0 \\
\langle n'l'm'|L_z f - fL_z|nlm\rangle &= 0 \\
(m'-m)\hbar\,\langle n'l'm'|f|nlm\rangle &= 0
\end{aligned}$$

Nếu $m' - m \neq 0$ thì $\langle|f|\rangle = 0$

Nếu $m' - m = 0$ thì $\langle|f|\rangle \neq 0$

Chứng minh tương tự cho $\left[L^2, f\right] = 0$

Nói tóm lại quy tắc lọc lựa cho scalar thì $\Delta m = 0$ và $\Delta l = 0$

Toán tử vector:

$$[L_z, V_z] = 0;\ [L_\pm, V_\pm]\,;\ [L_\pm, V_z] = \mp\hbar V_\pm;\ [L_\pm, V_\mp] = \pm 2\hbar V_z$$

Mối giao hoán tử này sẽ cho ra 1 quy tắc lọc lựa khác nhau! Xem rõ hơn ở trang 258, 259 Griffith QM 3rd.

3 Chapter 10: TÁN XẠ.

Classical Scattering theory.

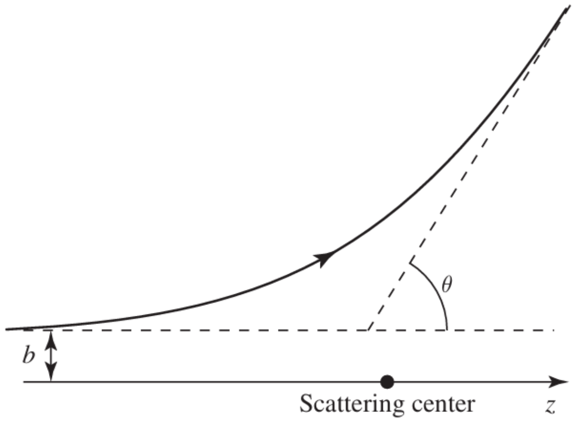
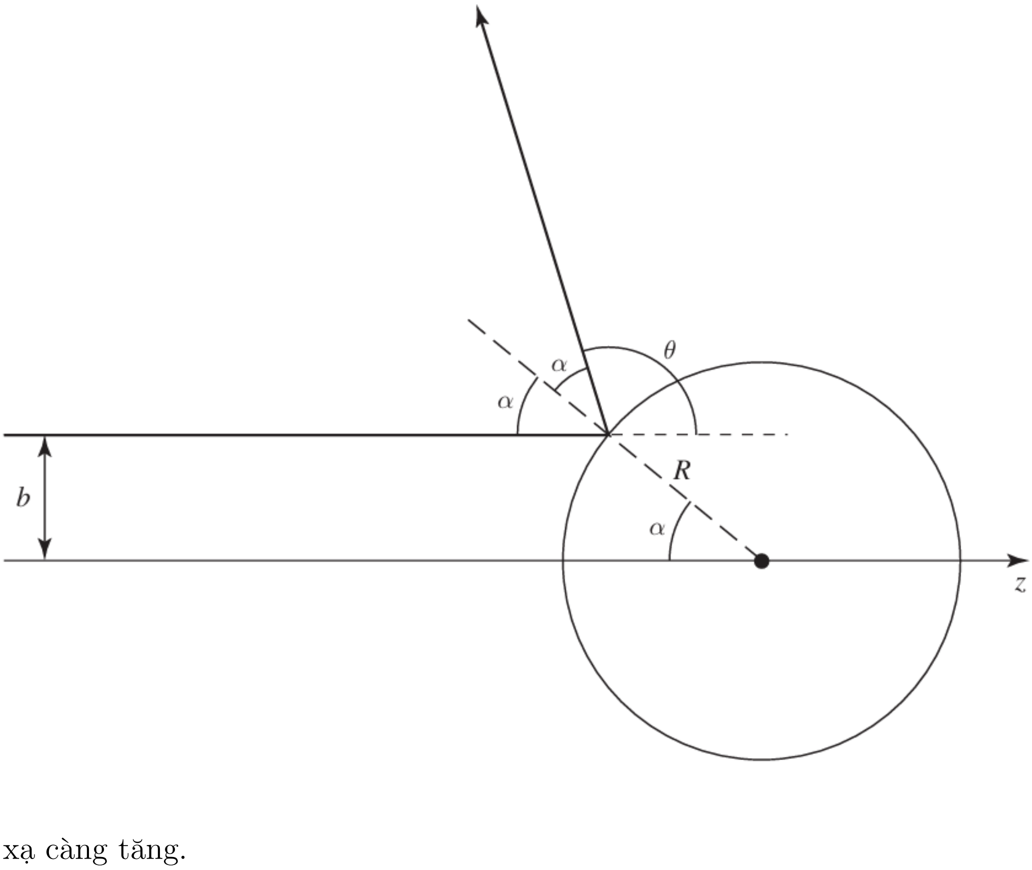


Figure 10.1: The classical scattering problem, showing the impact parameter b and the scattering angle θ.

Ta xét bài toán cổ điển ở đây b là tham số tác động, θ là góc tán xạ, khi b càng giảm thì



góc tán xạ càng tăng.

Áp dụng cho bài toán quả cầu cứng

$$b = R\sin\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) = R\cos\frac{\theta}{2}$$

Rõ ràng

$$\theta = \begin{cases} 2\cos^{-1}(b/R), & b \le R \\ 0, & b \ge R. \end{cases}$$

Một cách tổng quát

$$d\sigma = b \cdot db \cdot d\phi$$

Nhắc lại một số công thức

$$d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$$

$$dr^3 = r^2 dr d\Omega$$

$$dr^2 = r dr d\phi$$

Công thức tính tiết diện

$$d\sigma = D(\theta) d\Omega$$

$$D(\theta) = \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b \cdot db \cdot d\phi}{\sin\theta d\theta d\phi} = \frac{b}{\sin\theta}\left|\frac{db}{d\theta}\right| > 0$$

Tiết diện tán xạ toàn phần

$$\sigma = \int D(\theta) d\Omega = \int R\cos\frac{\theta}{2}\frac{1}{2\sin\theta}\frac{R}{2}\left|-\sin\frac{\theta}{2}\right| d\Omega = \pi R^2$$

Số hạt tới trong một đơn vị thời gian

$$dN = \mathcal{L} d\sigma$$

với $\mathcal{L}$ là số hạt tới trong một diện tích trên đơn vị thời gian.

3.1 Quantum Scattering Theory.

$$\psi(z) = A\left(e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right) \text{ for large r, z.}$$

Xác suất hạt tới di chuyển với vận tốc v, di chuyển qua vùng diện tích vi phân nhỏ $d\sigma$, trong thời gian dt

$$dP = |\psi_{\text{incident}}|^2 dV = |A|^2 (vdt) d\sigma$$

$$dP = |\psi_{\text{scattered}}|^2 dV = \frac{|A|^2 |f|^2}{r^2}(vdt) r^2 d\Omega$$

do đó

$$D(\theta) = \frac{d\sigma}{d\Omega} = \left|f(\theta)\right|^2$$

3.2 Partial Wave Analysis.

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)\cdot Y_l^m(\theta,\phi)$$

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \Rightarrow u(r\to 0)\to 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u'' + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u = Eu$$

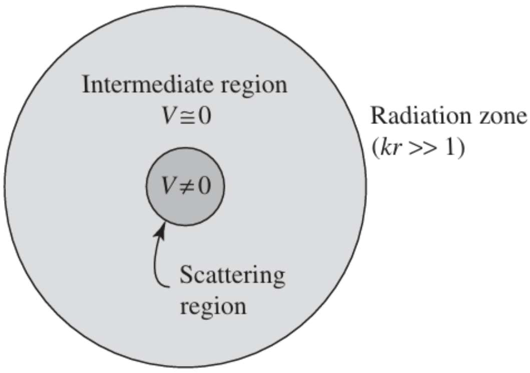


Figure 10.6: Scattering from a localized potential: the scattering region (dark), the intermediate region, where $V = 0$ (shaded), and the radiation zone (where $kr \gg 1$).

Xét $\mathbf{V = 0}$ khi $\mathbf{r \gg 1}$

$$u'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\cdot u$$

$\Rightarrow u_I(r) = Ce^{ikr} + De^{-ikr} \Rightarrow R(r) \approx \frac{e^{ikr}}{r}$

Vùng trung gian $\mathbf{V = 0}$

$$u'' - \frac{l(l+1)}{r^2}u = -k^2u \to u_{II}(r) = Ar\cdot j_l(kr) + Br\cdot n_l(kr)$$

Hàm Hankel cầu

$$\mathbf{h^1(r) = j_l(r) + in_l(r) \to (r \gg 1)\frac{e^{ir}}{r}}$$

$$\mathbf{h^2(r) = j_l(r) - in_l(r) \to (r \gg 1)\frac{e^{-ir}}{r}}$$

$$\Rightarrow R(r) \approx \frac{u}{r} = h_k^1(kr)$$

$$\psi_{II} = A\left[e^{ikz} + \sum_{m,l} C_{m,l}h_l^1(kr)Y_l^m(\theta,\phi)\right]$$

Xét bài toán đối xứng trụ không phụ thuộc vào $\phi \to$ m $= 0$

$$Y_l^0(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta)$$

$$\Rightarrow \psi_{II} = A\left[e^{ikz} + k\sum_l i^{l+1}(2l+1)a_lP_l(\cos\theta)h^{(1)}(kr)\right]$$

Vùng $r \gg 1$

$$h^{(1)}(kr) = \frac{e^{ikr}}{kr}$$

$$\psi_{III} = A\left[e^{ikz} + \sum_l i^{l+1}(2l+1)a_l P_l(\cos\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right]$$

suy ra biên độ tán xạ

$$f(\theta) = \sum_l i^{l+1}(2l+1)a_l P_l(\cos\theta)$$

$$D(\theta) = \left|f(\theta)\right|^2 = \sum_{l,l'}(2l+1)(2l'+1)a_l^* a_{l'} P_l P_{l'}$$

Tiết diện tán xạ toàn phần

$$\sigma = \int D(\theta)d\Omega = \int D(\theta)sin\theta d\theta d\phi$$

$$= \sum_{l,l'}(2l+1)(2l'+1)a_l^* a_{l'} 2\pi \int P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta)d\cos\theta$$

$$= 4\pi\sum_l(2l+1)|a_l|^2$$

Ta xét một ví dụ về bài toán quả cầu cứng (**Hard-sphere Scattering**)

$$V(r) = \begin{cases} \infty, & r < R \\ 0, & r > R. \end{cases} \quad \text{hay } \psi(r=R) = 0$$

Rayleigh Formula

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1)j_l(kr)P_l(\cos\theta)$$

Lấy ψ_{II} kết hợp công thức này ta suy ra được

$$\psi_{II} = A\sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1)P_l(\cos\theta)\left[j_l(kr) + ika_l h^{(1)}(kr)\right]$$

thay r = R

$$a_l = \frac{j_l(kR)}{-ikh^{(1)}(kR)}$$

Suy ra tiết diện tán xạ toàn phần

$$\sigma = 4\pi\sum_l(2l+1)\left|\frac{j_l(kR)}{kh^{(1)}(kR)}\right|^2$$

Ta thấy rằng nếu $kR \ll 1$ thì tiết diện tán xạ toàn phần trở thành

$$\sigma = 4\pi R^2$$

khác với cổ điển là $\sigma = \pi R^2$. Đây chính là đặc điểm của tán xạ bước sóng dài.

3.3 Phase shifts.

Bài toán đầu tiên của tán xạ một chiều từ một thế định xứ ở x < 0

$$\psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) \text{ với } V(x) = 0$$

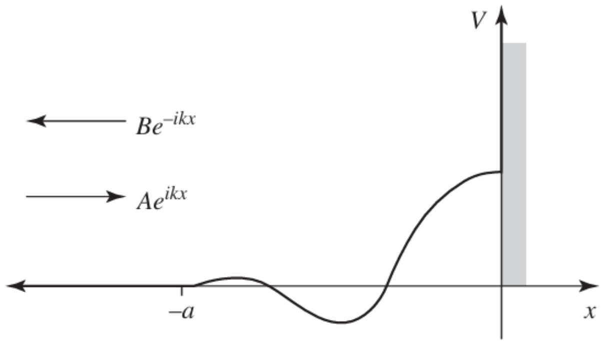


Figure 10.7: One-dimensional scattering from a localized potential bounded on the right by an infinite wall.

Neues $V(x) \neq 0$ hàm sóng có dạng

$$\psi(x) = A\left(e^{ikx} - e^{i(2\delta - kx)}\right)$$

ở đây $e^{2i\delta}$ được gọi là thừa số pha.

Trường hợp 3D, sóng tới Ae^{ikz} không mang theo momen động lượng hướng z, nhưng nó chứa tất cả giá trị của momen động lượng toàn phần . Bởi vì momen động lượng bảo toàn, mỗi sóng riêng phần tán xạ một cách độc lập nhau , không làm thay đổi biên độ chỉ làm biến đổi pha.

$$\psi^{(l)} = Ai^l(2l+1)j_l(kr)P_l(\cos\theta)$$

$$j_l(x) = \frac{1}{2}(h_l^{(1)})(x) + h_l^{(2)}(x) \to (x \gg 1)\frac{1}{2x}\left[(-i)^{l+1}e^{ix} + i^{l+1}e^{-ix}\right]$$

$$\Rightarrow \psi_l(x) = Ai^l(2l+1)\frac{1}{2kr}\left[(-i)^{l+1}e^{ikr} + i^{l+1}e^{-ikr}\right]P_l(\cos\theta)$$

$$\psi_l(r) = A\frac{2l+1}{2ikr}\left[e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}\right]P_l(\cos\theta)$$

Số hạng thứ hai đại diện cho sóng cầu tới, nó đến từ sóng phẳng, và không thay đổi khi ta đưa thế năng vào. Số hạng đầu tiên là sóng đi ra, sẽ lấy them một thừa số pha do thế tán xạ ban đầu mà ta đã xét

$$\psi_l(r) = A\frac{2l+1}{2ikr}\left[e^{ikr+i2\delta_l} - (-1)^l e^{-ikr}\right]P_l(\cos\theta)$$

Từ (10.29 eq) ta có

$$Ai^l(2l+1)\left(j_l(kr)+ika_lh_l^{(1)}(kr)\right)P_l(\cos\theta)$$

$$\rightarrow (r\gg 1)\frac{A(2l+1)}{2ikr}\left[e^{ikr}-(-1)^le^{-ikr}\right]P_l(\cos\theta)+Ai^l(2l+1)ika_l\frac{1}{kr}(-i)^{l+1}e^{ikr}P_l(\cos\theta)$$

$$=A\left[\frac{2l+1}{2ikr}\left(e^{ikr}-(-1)^le^{-ikr}\right)+\frac{(2l+1)a_l}{r}e^{ikr}\right]P_l(\cos\theta)$$

$$=A\frac{2l+1}{2ikr}\left[e^{ikr}(1+a_l(2ik))-(-1)^le^{-ikr}\right]P_l(\cos\theta)$$

$$\Rightarrow a_l=\frac{e^{i2\delta_l}-1}{2ikr}=\frac{e^{i\delta_l}}{k}\frac{e^{i\delta_l}-e^{-i\delta_l}}{2i}=\frac{e^{i\delta_l}}{k}\sin\delta_l$$

$$f(\theta)=\frac{1}{k}\sum_{n=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_lP_l(\cos\theta)$$

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

3.4 THE BORN APPROXIMATION.

Phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian

$$(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2+V)\Psi=E\Psi$$

$$\leftrightarrow (\nabla^2+k^2)\Psi=Q$$

Ta có

$$(\nabla^2+k^2)G(r)=\delta^3(r)$$

Khi đó nghiệm của phương trình có dạng như sau

$$\psi(\mathbf{r})=\int G(r-r_0)Q(r_0)d^3r_0$$

thực hiện biến đổi Fourier cho hàm Green

$$G(\tilde{\mathbf{r}})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int e^{i\vec{s}\vec{r}}g(\vec{s})d^3\vec{s}$$

$$\delta^3(\vec{r})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\vec{s}\vec{r}}d^3\vec{s}$$

Thay vào phương trình trên ta được

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int g(\vec{s})(\nabla^2+k^2)e^{i\vec{s}\vec{r}}d^3\vec{s}=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int g(\vec{s})(k^2-s^2)e^{i\vec{s}\vec{r}}d^3(\vec{s})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\vec{s}\vec{r}}d^3\vec{s}$$

$$\Rightarrow g(\vec{s})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\frac{1}{k^2-s^2}$$

$$\rightarrow G(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{e^{i\vec{s}\vec{r}}}{k^2 - s^2} d^3\vec{s}$$

$$\int_0^{\pi} e^{isr\cos\theta}\sin\theta d\theta = \frac{2}{sr}\sin sr$$

$$\Rightarrow G(\vec{r}) = \frac{2\pi}{(2\pi)^3}\int_0^{\infty}\frac{s^2}{k^2 - s^2}ds\frac{2\sin sr}{sr} = \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{r}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{s.\sin sr}{k^2 - s^2}ds$$

$$= \frac{1}{8\pi^2}\frac{i}{r}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\frac{s.e^{isr}}{s^2 - k^2}ds - \int_{-\infty}^{\infty}\frac{s.e^{-isr}}{s^2 - k^2}ds\right)$$

$$I_1 = 2\pi i Res(s = k) = 2\pi i\left.\frac{s.e^{isr}}{s + k}\right|_{s=k} = \pi i e^{ikr}$$

$$I_2 = \pi i e^{ikr}$$

$$\rightarrow G(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi r}e^{ikr}$$

Vậy nghiệm tổng quát của phương trình schrodinger là

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|}V(\mathbf{r_0})\psi(\mathbf{r_0})d^3\mathbf{r_0}$$

First Born approximation.

Giả sử $V(\mathbf{r_0})$ xác định tại $r_0 = 0$ và xét vùng xa tâm tán xạ $\vec{r} \gg \vec{r_0}$

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|^2 = r^2 + r_0^2 - 2\mathbf{r}\mathbf{r_0} \approx r^2(1 - \frac{2\vec{r}\vec{r_0}}{r^2})$$

$$\rightarrow |\mathbf{r}-\mathbf{r_0}| = \sqrt{r^2(1 - \frac{2\vec{r}\vec{r_0}}{r^2})} \approx r - \frac{\vec{r}}{r}\vec{r_0}$$

Ta thay vào biểu thức dưới dấu tích phân ở trên

$$\frac{e^{i\vec{k}|\vec{r}-\vec{r_0}|}}{|\vec{r}-\vec{r_0}|} \approx \frac{e^{ik(r-\hat{r}\vec{r_0})}}{r} = \frac{e^{ikr}}{r}e^{-i(k\hat{r})\vec{r_0}}$$

$$\Rightarrow \psi(\vec{r}) = Ae^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\int e^{-i\vec{k}\vec{r_0}}V(\vec{r_0})\psi(\vec{r_0})d\vec{r_0}$$

so sánh với công thức 10.12 ta được

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2 A}\int e^{-i\vec{k}\vec{r_0}}V(\vec{r_0})\psi(\vec{r_0})d\vec{r_0}$$

Xấp xỉ Born bậc 1:

$$\psi(\vec{r_0}) \rightarrow \psi_0(\vec{r_0}) = A.e^{i\vec{k'}\vec{r_0}} \text{ với } \vec{k'} = k\hat{z} \text{ hay } \vec{k'}\vec{r_0} = kz_0$$

$$\Rightarrow f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{i(\vec{k'}-\vec{k})\vec{r_0}}V(\vec{r_0})d^3\vec{r_0}$$

Đối với bài toán năng lượng thấp (Low energy) $\vec{k'} - \vec{k} \approx 0$

$$f(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(\vec{r})d^3\vec{r}$$

Xét một số ví dụ sau:

- **Tán xạ quả cầu mềm năng lượng thấp**

$$f(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} V_0 \frac{4\pi a^3}{3}$$

- **Thế điều hòa cầu**

$$V(\vec{r}) = V(r) \to (\vec{k'} - \vec{k})\vec{r_0} = \vec{k}\vec{r_0} = kr_0 \cos\theta_0$$

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2\kappa} \int_0^\infty rV(r)sin(\kappa r)dr \text{ với } \kappa = 2k\sin\frac{\theta}{2}$$

- **Thế Yukawa**

$$V(r) = \beta\frac{e^{-\mu r}}{r} \to f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2\kappa}\beta \int_0^\infty \sin kr_0 e^{-\mu r_0} dr_0 = -\frac{2m\beta}{\hbar^2(\mu^2 + \kappa^2)}$$

- **Tán xạ Rutherford**

$$\beta = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0} \ \mu = 0$$

$$f(\theta) \approx -\frac{2mq_1q_2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa^2} = -\frac{q_1q_2}{16\pi\epsilon_0 E\sin^2\frac{\theta}{2}}$$

4 Chapter 11: ĐỘNG LỰC HỌC LƯỢNG TỬ.

Cơ học lượng tử từ trước đến này chúng ta học được gọi là cơ học lượng tử tĩnh, áp dụng cho thế năng $V(|\vec{r}|)$. Nhưng khi ta muốn đề cập đến sự chuyển dời giữa các mức năng lượng, ta cần một thế năng phụ thuộc thời gian $V(\vec{r,t})$. Đó là mục đích của chương 11 này.

4.1 Hệ hai trạng thái.

Ta bắt đầu với hai trạng thái ψ_a và ψ_b là các hàm riêng của Hamiltonian không nhiễu ứng với các trị riêng tương ứng

$$\hat{H}^0\psi_a = E_a\psi_a \text{ , và } \hat{H}^0\psi_b = E_b\psi_b$$

và đây là các cơ sở trực chuẩn

$$\langle\psi_i|\,|\psi_j\rangle = \delta_{i,j}$$

Ta có hàm sóng ban đầu ở $t = 0$ có dạng

$$\Psi(0) = c_a\psi_a + c_b\psi_b$$

Khi chưa có nhiễu loạn

$$\Psi(t) = c_a\psi_a e^{-iE_at/\hbar} + c_b\psi_b e^{-iE_bt/\hbar}$$

Xác suất mà hạt ở trạng thái năng lượng E_a là $|c_a|^2$ và chuẩn hóa $|c_a|^2 + |c_b|^2 = 1$.

Hệ có nhiễu loạn.

Hamiltonian phụ thuộc thời gian có dạng

$$\hat{H}(t) = \hat{H}^0 + \hat{H}'(t)$$

Hàm sóng phụ thuộc thời gian với các hệ số lúc này phụ thuộc thời gian

$$\Psi(t) = c_a(t)\psi_a e^{-iE_at/\hbar} + c_b(t)\psi_b e^{-iE_bt/\hbar}$$

khi ta cho $c_a(t) = 0$ và $c_b(t) = 1$ thì ta nói rằng hệ có sự chuyển dời trạng thái từ ψ_a sang ψ_b. Bây giờ ta sẽ đi tìm các hệ số này bằng cách xem $\Psi(t)$ thỏa phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$$

$$i\hbar\left(\dot{c}_a(t)\left|\psi_a\right\rangle e^{\frac{-iE_a t}{\hbar}} + c_a(t)\left|\psi_a\right\rangle(\frac{-iE_a}{\hbar})e^{\frac{-iE_a t}{\hbar}} + \dot{c}_b(t)\left|\psi_b\right\rangle e^{\frac{-iE_b t}{\hbar}} + c_b(t)\left|\psi_b\right\rangle(\frac{-iE_b}{\hbar})e^{\frac{-iE_b t}{\hbar}}\right)$$
$$= (H^0 + H'(t))\left[c_a(t)\left|\psi_a\right\rangle e^{-\frac{iE_a t}{\hbar}} + c_b(t)\left|\psi_b\right\rangle e^{-\frac{iE_b t}{\hbar}}\right]$$

Ta kẹp $\langle\psi_a|$ và $\langle\psi_b|$ vào hai vế và dùng tính trực giao để loại bỏ những thành phần trực giao nhau, cuối cùng ta rút ra được

$$\dot{c}_a(t) = \frac{-i}{\hbar}\left[H'_{aa}c_a + H'_{ab}c_b e^{\frac{i(E_a-E_b)t}{\hbar}}\right]$$
$$\dot{c}_b(t) = \frac{-i}{\hbar}\left[H'_{bb}c_a + H'_{ba}c_b e^{\frac{i(E_b-E_a)t}{\hbar}}\right]$$

Đặt $E_b - E_a = \hbar\omega_0 > 0$ và thành phần $H'_{aa} = H'_{bb} = 0$ nên

$$\boxed{\begin{aligned}\dot{c}_a(t) &= \frac{-i}{\hbar}H'_{ab}c_b e^{\frac{-i\omega_0 t}{\hbar}},\\ \dot{c}_b(t) &= \frac{-i}{\hbar}H'_{ba}c_a e^{\frac{i\omega_0 t}{\hbar}}\end{aligned}} \tag{1}$$

4.2 Lý thuyết nhiễu loạn phụ thuộc thời gian.

Zeroth order

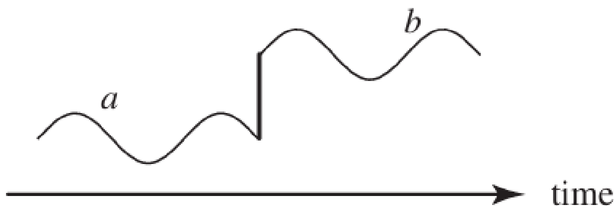
$$\dot{c}_a(t) = 0 \rightarrow c_a^0(t) = 1$$
$$\dot{c}_b(t) = 0 \rightarrow c_b^0(t) = 0$$

First order

$$\dot{c}_a(t) = 0 \rightarrow c_a^1(t) = 1$$
$$\dot{c}_b(t) = \frac{-i}{\hbar}H'_{ba}e^{i\omega_0 t} \rightarrow c_b^1 = \frac{-i}{\hbar}\int_0^t H'_{ba}(t')e^{i\omega_0 t'}dt'$$

Second order

$$\dot{c_a}^{(2)}(t) = \frac{-i}{\hbar}H'_{ab}e^{-i\omega_0 t}c_b^{(1)}(t)$$
$$\dot{c_b}^{(2)}(t) = \frac{-i}{\hbar}H'_{ba}e^{-i\omega_0 t} \rightarrow c_b^{(2)}(t) = -\int_0^t \frac{i}{\hbar}H'_{ba}(t')e^{i\omega_0 t'}dt'$$
$$c_a^{(2)}(t) = 1 - \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t H'_{ab}(t')e^{-i\omega_0 t'}\left[\int_0^{t'} H'_{ba}(t'')e^{i\omega_0 t''}dt''\right]dt'$$
$$c_b^{(2)}(t)e^{-\frac{iE_b t}{\hbar}} = -\int_0^t \frac{i}{\hbar}e^{-\frac{iE_b(t-t')}{\hbar}}H'_{ba}(t')e^{-iE_a t'}dt'$$

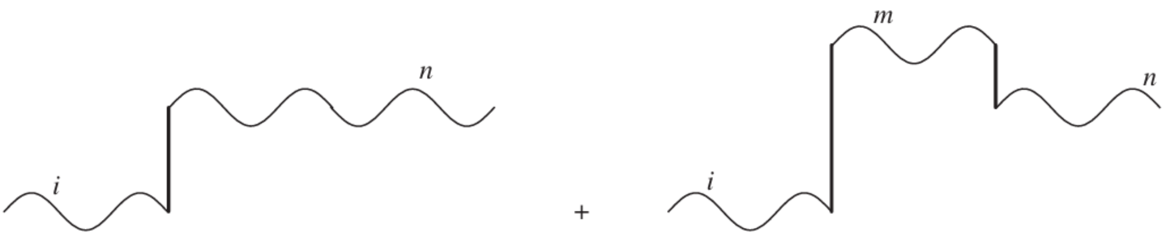


$$c_a^{(2)}(t)e^{-\frac{iE_at}{\hbar}} = e^{-\frac{iE_at}{\hbar}} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t \int_0^{t'} e^{-\frac{iE_a(t-t')}{\hbar}} H'_{ab}(t') e^{-\frac{iE_b(t'-t'')}{\hbar}} H'_{ba}(t'') e^{-\frac{iE_at''}{\hbar}}\, dt''\, dt'$$

Một cách tổng quát

$$c_n^{(2)}(t)e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}} = \delta_{ni}e^{-\frac{iE_it}{\hbar}} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \int_0^t \int_0^{t'} e^{-\frac{iE_n(t-t')}{\hbar}} H_{ni}(t') e^{-\frac{iE_it'}{\hbar}} dt'$$

$$+\sum_m \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t \int_0^{t'} e^{-\frac{iE_n(t-t')}{\hbar}} H_{nm}(t') e^{-\frac{iE_m(t'-t'')}{\hbar}} H_{mi}(t'') e^{-\frac{iE_it''}{\hbar}} dt''dt'.$$



Sinusoidal perturbation.

Ta xét nhiễu loạn phụ thuộc thời gian có dạng hình sin

$$\hat{H}'(\vec{r}, t) = V(\vec{r}) \cos(\omega t)$$

Nhiễu loạn bậc 1 trở thành

$$c_b(t) \approx -\frac{i}{\hbar} V_{ba} \int_0^t \cos\big(\omega t'\big) e^{i\omega_0 t'} dt' = -\frac{iV_{ba}}{2\hbar} \int_0^t \left[e^{i(\omega_0+\omega)t'} + e^{i(\omega_0-\omega)t'} dt' \right]$$

$$= -\frac{V_{ba}}{2\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_0+\omega)t} - 1}{\omega_0 + \omega} + \frac{e^{i(\omega_0-\omega)t} - 1}{\omega_0 - \omega} \right]$$

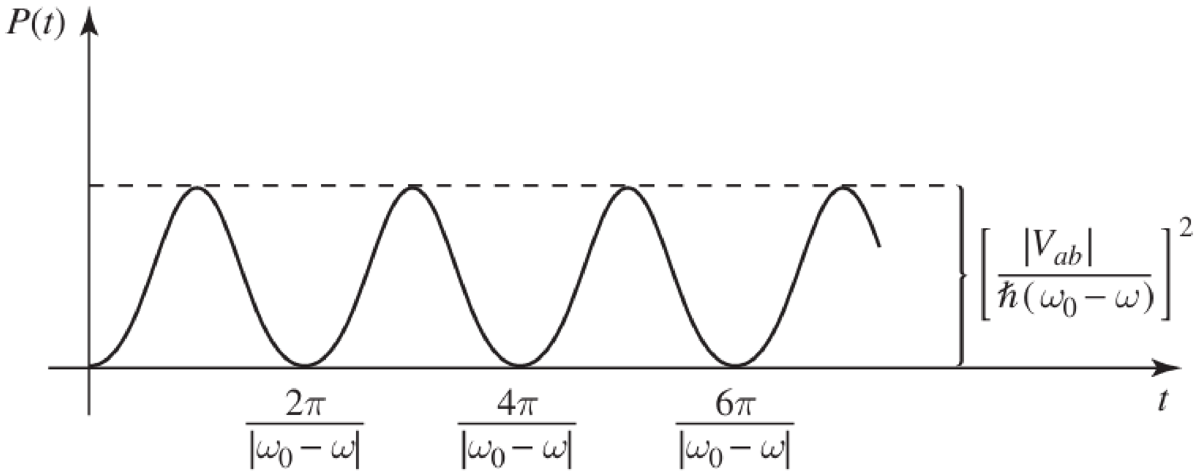
Xét $\omega \approx \omega_0$

$$\omega + \omega_0 >> |\omega - \omega_0|$$

$$c_b(t) \approx -\frac{V_{ba}}{2\hbar}\frac{e^{i(\omega_0-\omega)t/2}}{\omega_0-\omega}\left[e^{i(\omega_0-\omega)t/2} - e^{-i(\omega_0-\omega)t/2}\right]$$
$$= -i\frac{V_{ba}}{\hbar}\frac{\sin[(\omega_0-\omega)t/2]}{\omega_0-\omega}e^{i(\omega_0-\omega)t/2}.$$

Xác suất chuyển dời là xác suất một hạt ban đầu ở trạng thái ψ_a được tìm thấy ở trạng thái ψ_b ở thời điểm t là

$$P_{a\to b}(t) = |c_b(t)|^2 \approx \frac{|V_{ab}|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2\left[(\omega_0-\omega)\frac{t}{2}\right]}{(\omega_0-\omega)^2}.$$



4.3 Phát xạ và bức xạ.

Sóng điện từ.

Tuần trước đã chứng minh:

$$P_{a\to b} = \left|c_b(t)\right|^2 \approx \frac{\left|V_{ba}\right|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2(\omega_0-\omega)t/2}{(\omega_0-\omega)^2}$$
$$\frac{(\omega_0-\omega)t}{2} = n\pi \to t = \frac{2n\pi}{\omega_0-\omega}$$

Electromagnetic waves (chỉ xét sự thay đổi theo thời gian):

$$\vec{E} = E_0\cos(\omega t)\hat{k} \quad \text{k dọc theo trục z}$$

$$H' = -qE_0 z\cos(\omega t)$$

$$V_{ba} = -qE_0\left\langle\psi_b|z|\psi_a\right\rangle$$

$$= -\varrho E_0$$

Thay vào phương trình đầu tiên của file, ta được:

$$P_{a\to b} = \frac{|\varrho|^2 E_0^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2(\omega_0 - \omega)t/2}{(\omega_0 - \omega)^2}$$

Xét ví dụ, ban đầu hạt nằm ở b tìm xác suất để hạt di chuyển xuống a

$$c_b(0) = 1, c_a(0) = 0$$

$$P_{b\to a} = \left|c_a(t)\right|^2 = \frac{|\varrho|^2 E_0^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2(\omega_0 - \omega)t/2}{(\omega_0 - \omega)^2}$$

Ta thấy, xác xuất chuyển từ trạng thái dưới lên trạng thái trên = xác suất từ trạng thái trên xuống trạng thái dưới → Stimulated (Đã được Einstein tiên đoán từ trước khi QM ra đời). Phát xạ tự phát (mặc dù ở ngoài ta không chiếu ánh sáng vào nhưng theo cơ lượng tử ở đó vẫn phải có một trường nào đó) → có thể là do năng lượng điểm 0 cưỡng bức chứ không phải do trường ngoài.

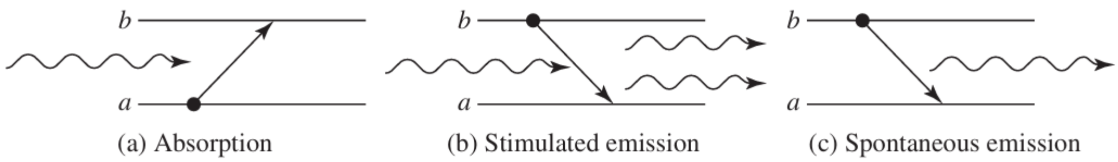


Figure 11.7: Three ways in which light interacts with atoms: (a) absorption, (b) stimulated emission, (c) spontaneous emission.

Incoherent Perturbation.

Mật độ năng lượng của sóng điện từ

$$\begin{aligned}
u &= \frac{1}{2}\epsilon_0 E_0^2 \\
P_{a\to b} &= \frac{2u}{\epsilon_0}\frac{|\varrho|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2(\omega_0 - \omega)t/2}{(\omega_0 - \omega)^2} \\
&= \frac{2}{\epsilon_0 \hbar^2}|\varrho|^2 \int_0^\infty \rho(\omega) d\omega \frac{\sin^2(\omega_0 - \omega)t/2}{(\omega_0 - \omega)^2} \\
&\approx \frac{2}{\epsilon_0 \hbar^2}|\varrho|^2 \rho(\omega_0) \int_0^\infty d\omega \frac{\sin^2(\omega_0 - \omega)t/2}{(\omega_0 - \omega)^2}
\end{aligned}$$

Có:

$$\begin{aligned}
x &= \frac{(\omega_0 - \omega)t}{2} \\
dx &= -d\omega \frac{t}{2}
\end{aligned}$$

Do đó:

$$\begin{aligned}
P_{a\to b} &= \frac{2}{\epsilon_0\hbar^2}|\varrho|^2\rho(\omega_0)\int_{-\infty}^{+\infty}dx\frac{2}{t}\frac{\sin^2 x}{x^2(2/t)^2}\\
&= \frac{t}{2}\frac{2}{\epsilon_0\hbar^2}|\varrho|^2\rho(\omega_0)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin^2 x}{x^2}dx\\
&= \frac{t}{2}\frac{2}{\epsilon_0\hbar^2}|\varrho|^2\rho(\omega_0)\pi
\end{aligned}$$

Tốc độ chuyển dời khi đi từ a$\to$b:

$$R_{a\to b} = \frac{dP}{dt} = \frac{\pi|\varrho|^2}{\epsilon_0\hbar^2}\rho(\omega_0)$$

Lại có:

$$\begin{aligned}
\vec{\varrho} &= q\,\langle\psi_b|\vec{r}|\psi_a\rangle\\
\vec{\varrho}\cdot\hat{n} &= |\vec{\varrho}|\cos\theta\\
\Rightarrow |\vec{\varrho}\cdot\hat{n}|^2 &= \frac{1}{4\pi}\int|\vec{\varrho}|^2\cos^2\theta\sin\theta d\theta d\phi\\
&= |\vec{\varrho}|^2\frac{1}{4\pi}2\pi\int_1^{-1}\cos^2\theta d(-\cos\theta)\\
&= |\vec{\varrho}|^2\frac{1}{2}\left(-\frac{\cos^2\theta}{3}\right)_{\theta=0}^{\theta=\pi}\\
&= \frac{1}{3}|\vec{\varrho}|^2\\
=> R_{a\to b} &= \frac{\pi|\vec{\varrho}|^2}{3\epsilon_0\hbar^2}\rho(\omega_0)
\end{aligned}$$

Spontaneous Emission.

Einstein's A and B Coefficients.

Phát xạ tự phát:

$$N_b A = \text{Số hạt chuyển từ mức trến xuống mức dưới trong một đơn vị thời gian}$$

với A: tốc độ

Đặt $B_{ba} = \dfrac{\pi|\vec{\varrho}|^2}{3\epsilon_0\hbar^2}$

$$\text{Tốc độ chuyển dời của phát xạ cưỡng bức: chuyển xuống} = N_b B_{ba}\rho(\omega_0)$$

$$\text{Tốc độ chuyển dời của phát xạ cưỡng bức: chuyển lên} = N_a B_{ab}\rho(\omega_0)$$

Thermail equilibrium:

$$\frac{dN_b}{dt} = -N_b A - N_b B_{ba}\rho(\omega_0) + N_a B_{ba}\rho(\omega_0)$$
$$\frac{dN_b}{dt} = 0 \to \rho(\omega_0) = \frac{N_b A}{-N_b B_{ba} + N_a B_{ab}} = \frac{A}{\frac{N_a}{N_b}B_{ab} - B_{ba}}$$
$$\frac{N_a}{N_b} = \frac{e^{-E_a/k_B T}}{e^{-E_b/k_B T}} = e^{(E_a - E_b)/k_B T} = e^{\hbar\omega_0/k_B T}$$
$$\rho(\omega_0) = \frac{A}{e^{\hbar\omega_0/k_B T}B_{ab} - B_{ba}}$$

Planck distribution:

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3}\frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$
$$\to B_{ab} = B_{ba}$$
$$\frac{A}{B_{ab}} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}$$
$$A = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}\frac{\pi|\vec{\varrho}|^2}{3\epsilon_0\hbar^2}$$
$$= \frac{\omega_0^3}{3\pi\hbar\epsilon_0 c^3}|\vec{\varrho}|^2$$

The Life time of an Excited state.

Xét N_b hạt ở trạng thái trên và cho nó chuyển xuống bằng tự phát:

$$\frac{dN_b}{dt} = -AN_b$$
$$N_b(t) = N_b(0)e^{-At} = N_b(0)e^{-t/\tau}$$

Với $\tau = \dfrac{1}{A}$: thời gian sống

Khi $|\varrho|^2 = 0 th \tau_0 \to \infty$ (thời gian sống vô hạn) $\to$ không có chuyển dời

Thực tế thì hệ luôn luôn có chuyển dời nếu có nhiều khả năng chuyển dời thì:

Do ta có nhiều mode chuyển dời khác nhau:

$$\tau = \frac{1}{A_1 + A_2 + ...}$$

Selection rules.

Nguyên tắc lọc lựa:

Xét nguyên tử Hydro:

$$\vec{\varrho} = \langle \psi_b | \vec{r} | \psi_a \rangle$$

$$= \langle n'l'm' | \vec{r} | nlm \rangle \neq 0$$

Khi:

$$\Delta l = l - l' = \pm 1$$

$$\Delta m = m - m' = 0, \pm 1$$

=> Selection rule

$$m' = m : \langle n'l'm' | x | nlm \rangle = \langle n'l'm' | y | nlm \rangle = 0$$

$$m' = m \pm 1 : \langle n'l'm' | z | nlm \rangle = 0$$

$$\langle n'l'm' | x | nlm \rangle = \pm i \, \langle n'l'm' | y | nlm \rangle$$

4.4 Fermi's Golden Rule.

Điều này xả ra khi E_f có rất nhiều trạng thái liên tục (trạng thái tán xạ)

Cộng các xác suất của 11.35 lại:

$$P = \int_{E_f - \Delta E/2}^{E_f + \Delta E/2} \frac{|V_{in}|^2}{\hbar^2} \left\{ \frac{\sin^2 \left[(\omega_0 - \omega) t/2 \right]}{(\omega_0 - \omega)^2} \right\} \rho(E_n) dE_n$$

Với: $\omega_0 = \dfrac{E_n - E_i}{\hbar}$

Xét thời gian tương đối lớn, đỉnh của nó sẽ xuất hiện quanh E_f do đó, ta sẽ lấy gần đúng mật độ tại E_f

$$P = \frac{|V_{if}|^2}{\hbar^2} \rho(E_f) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 \left[(\omega_0 - \omega) t/2 \right]}{(\omega_0 - \omega)^2} dE_n$$

$$\approx \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{V_{if}}{2} \right|^2 \rho(E_f) t$$

$$=> R = \frac{P}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{V_{if}}{2} \right|^2 \rho(E_f)$$

Mật độ trạng thái cuối lớn → Tốc độ chuyển dời lớn

Hai trạng thái đầu và cuối:

$$\psi_i = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$
$$\psi_f = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

Với $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}\left(n_x\hat{i} + n_y\hat{j} + n_z\hat{k}\right)$

$$V_{if} = \int \psi_f^* V \psi_i d\vec{r} = \frac{1}{V}\int e^{i(k-k')\vec{r}} V(\vec{r}) d\vec{r}$$

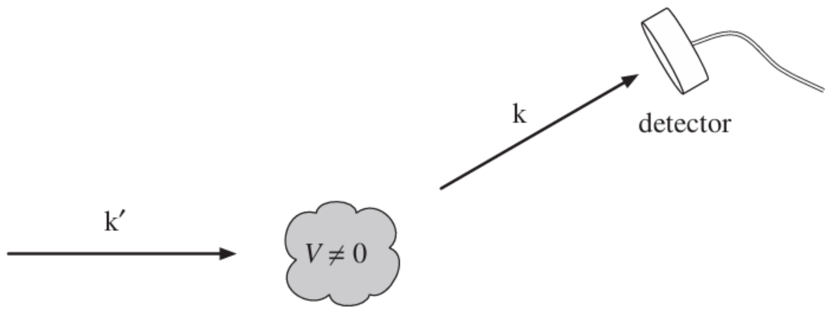


Figure 11.11: A particle with incident wave vector $\mathbf{k}'$ is scattered into a state with wave vector $\mathbf{k}$.

$$g(E)dE = \frac{k^2 dk d\Omega}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \frac{\sqrt{2m^3E}}{\hbar^3} dE d\Omega$$

$$R_i \to d\Omega$$

Differential Scattering Cross Section:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{R_{i\to d\Omega}}{J_i d\Omega}$$

4.5 The Adiabatic Approximation

Giả sử $\hat{H}(0)$ thay đổi chậm đến thời điểm $\hat{H}(T)$ nào đó:

$$\hat{H}(0) \to \hat{H}(T)$$

Tương ứng:

$$\psi_n(x) \to \psi_n(x)$$

$\Rightarrow$ Trạng thái không đổi

Ví dụ:

Ban đầu ta có giếng thế có bề rộng là a:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad 0 < x < a$$
$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2}$$

Sau đó kéo chậm giếng đến $2a$:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{2a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), \quad 0 < x < 2a$$
$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2m\left(2a\right)^2}$$

$\Rightarrow$ **Năng lượng không bảo toàn**

Khác với chương 2 là lúc ta kéo rất nhanh hàm sóng không kịp thay đổi:

$$\Psi_n(x,t) = \sum c_n\psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}$$
$$\Psi_n(x,0) = \sum c_n\psi_n(x) = \psi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right), \quad (0 < x < a)$$
$$c_n = \int_0^a \psi_n^*(x)\psi_0(x)dx =$$

Vậy khi xét gần đúng đoạn nhiệt, xuất hiện thừa số pha $e^{\frac{-iE_nt}{\hbar}}$, khi n thay đổi thì thừa số pha cũng thay đổi

$$\Psi_n(t) = \psi_n(t)e^{i\theta_n(t)}e^{i\gamma_n(t)} \rightarrow \theta_n = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n(t')dt'$$

θ_n: Dynamic phase, γ_n: Geometric phase (phụ thuộc vào hình dạng đường đi.)

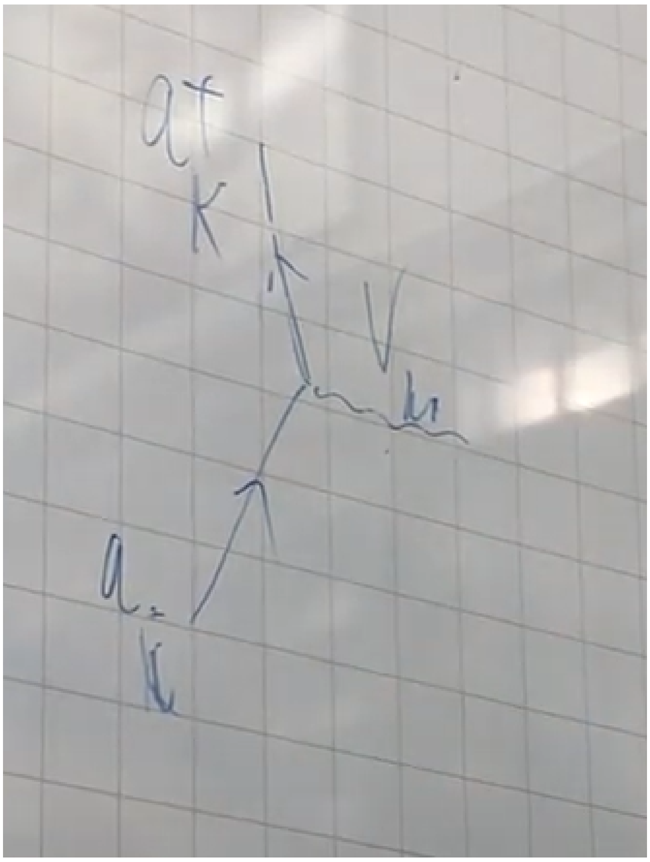
Berry's phase:

$$\gamma_B \equiv \gamma(T) - \gamma(0)$$

Phương trình đầy đủ của gần đúng đoạn nhiệt:

$$\hat{H}(t)\Psi_n(t) = E_n(t)\Psi_n(t)$$

Example 11.4



$$\mathbf{B}(t) = B_0 \sin\alpha \cos(\omega t)\,\hat{i} + B_0 \sin\alpha \sin(\omega t)\hat{j} + B_0 \cos\alpha\ \hat{k}$$

$$\begin{aligned}
H = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} &= -\left(-\frac{e}{m}\vec{S}\right)\cdot\vec{B} = \frac{e}{m}\vec{S}\cdot\vec{B} = \frac{e}{m}\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}\cdot\vec{B} \\
&= \frac{e\hbar}{2m}\left(\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z\right) = \frac{\hbar e B_0}{2m}\begin{pmatrix} \cos\alpha & e^{-i\omega t}\sin\alpha \\ e^{i\omega t}\sin\alpha & -\cos\alpha \end{pmatrix} \\
&= \frac{\hbar\omega_1}{2}\begin{pmatrix} \cos\alpha & e^{-i\omega t}\sin\alpha \\ e^{i\omega t}\sin\alpha & -\cos\alpha \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Với,

$$\omega_1 \equiv \frac{eB_0}{m}$$

Tìm hàm riêng trị riêng:

$$\begin{bmatrix} \cos\alpha - \lambda & e^{-i\omega t}\sin\alpha \\ e^{i\omega t}\sin\alpha & -\cos\alpha - \lambda \end{bmatrix} = 0$$

$$\rightarrow (\lambda - \cos\alpha)(\lambda + \cos\alpha) - \sin^2\alpha = 0$$

$$\rightarrow \lambda = \pm 1$$

$$\begin{pmatrix} \cos\alpha & e^{-i\omega t}\sin\alpha \\ e^{i\omega t}\sin\alpha & -\cos\alpha \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 1\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow a\cos\alpha + be^{-i\omega t}\sin\alpha = a$$

$$\rightarrow a(1 - \cos\alpha) = be^{-i\omega t}\sin\alpha$$

$$\rightarrow \frac{a}{b} = \frac{\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)}{e^{i\omega t}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)}$$

$$\rightarrow \chi_+ = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_+ = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ e^{i\omega t}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow \chi_- = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_- = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ -\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \end{pmatrix}$$

Tại thời điểm 0:

$$t = 0; \vec{B}(0) = B_0(\sin\alpha, 0, \cos\alpha)$$

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ \\ \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \end{pmatrix}$$

$$\chi(t) = ?$$

Phương trình Schroedinger phụ thuộc thời gian:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\chi = H\chi$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega_1}{2}\begin{pmatrix} \cos\alpha & e^{-i\omega t}\sin\alpha \\ e^{i\omega t}\sin\alpha & -\cos\alpha \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Ta đặt:

$$\chi(t) = c_1(t)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hbar\omega_1\cos\alpha}{2}t} + c_2(t)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{-\hbar\omega_1\cos\alpha}{2}t}$$

$$= \begin{pmatrix} c_1 e^{-\left(\frac{i\omega_1\cos\alpha}{2}\right)t} \\ c_2 e^{\left(\frac{i\omega_1\cos\alpha}{2}\right)t}\end{pmatrix}$$

$$\rightarrow \begin{cases} c_1(0) = \cos\dfrac{\alpha}{2} \\ \\ c_2(0) = \sin\dfrac{\alpha}{2}\end{cases}$$

Do đó, phương trình Schroedinger trở thành

$$i\hbar \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\omega_1\cos\alpha}{2}t}\left(\dot{c_1} + c_1\left(-\frac{i\omega_1\cos\alpha}{2}\right)\right) \\ e^{\frac{i\omega_1\cos\alpha}{2}t}\left(\dot{c_2} + c_2\frac{i\omega_1\cos\alpha}{2}\right)\end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar\omega_1}{2}\begin{pmatrix} c_1 e^{-\frac{i\omega_1\cos\alpha}{2}t}\cos\alpha + c_2 e^{\frac{i\omega_1\cos\alpha}{2}t}\sin\alpha e^{-i\omega t} \\ c_1 e^{-\frac{i\omega_1\cos\alpha}{2}t} e^{i\omega t}\sin\alpha - c_2 e^{\frac{i\omega_1\cos\alpha}{2}t}\cos\alpha\end{pmatrix}$$

$$\rightarrow \dot{c_1} = \frac{\omega_1}{2i}e^{i\omega_1\cos\alpha t}\sin\alpha e^{-i\omega t}c_2,$$

$$\dot{c_2} = \frac{\omega_1}{2i}e^{-i\omega_1\cos\alpha t}\sin\alpha e^{i\omega t}c_1.$$

$$\rightarrow \ddot{c_1} = \frac{\omega_1\sin\alpha}{2i}e^{i(\omega_1\cos\alpha-\omega)t}\left(\dot{c_2} + c_2 i\left(\omega_1\cos\alpha - \omega\right)\right)$$

$$= \left(\frac{\omega_1\sin\alpha}{2i}\right)^2 c_1 + i\left(\omega_1\cos\alpha - \omega\right)\dot{c_1},$$

$$\boxed{\Rightarrow \ddot{c_1} - i\left(\omega_1\cos\alpha - \omega\right)\dot{c_1} - \left(\frac{\omega_1\sin\alpha}{2}\right)^2 c_1 = 0.}$$

Thực hiện giải phương trình đặc trưng,

$$\Delta = -\left(\frac{\omega_1\cos\alpha - \omega}{2}\right)^2 - \left(\frac{\omega_1\sin\alpha}{2}\right)^2 = -\frac{\omega_1^2 + \omega^2 - 2\omega\omega_1\cos\alpha}{4} < 0 = -\frac{\lambda^2}{4}$$

ta thu được nghiệm:

$$
\begin{aligned}
c_1 &= e^{\frac{i}{2}(\omega_1\cos\alpha-\omega)t}\left(A\sin\frac{\lambda}{2}t+B\cos\frac{\lambda}{2}t\right)\\
c_2 &= \frac{1}{\frac{\omega_1\sin\alpha}{2i}}e^{-i(\omega_1\cos\alpha-\omega)t}\dot{c_1}\\
&= \frac{2i}{\omega_1\sin\alpha}e^{-\frac{i}{2}(\omega_1\cos\alpha-\omega)t}\left[\frac{i}{2}\left(\omega_1\cos-\omega\right)\left(A\sin\frac{\lambda}{2}t+B\cos\frac{\lambda}{2}t\right)+\frac{\lambda}{2}\left(A\cos\frac{\lambda}{2}t-B\sin\frac{\lambda}{2}t\right)\right]
\end{aligned}
$$

Áp dụng điều kiện ban đầu:

$$
\begin{aligned}
c_1(0) &= \cos\frac{\alpha}{2} = B\\
c_2(0) &= \sin\frac{\alpha}{2} = \frac{2i}{\omega_1\sin\alpha}\left[\frac{i}{2}\left(\omega_1\cos\alpha-\omega\right)\cos\frac{\alpha}{2}+\frac{\lambda}{2}A\right]\\
\Rightarrow A &= \frac{2}{\lambda}\left[\frac{\omega_1\sin\alpha}{2i}\sin\frac{\alpha}{2}-\frac{i}{2}\left(\omega_1\cos\alpha-\omega\right)\cos\frac{\alpha}{2}\right]\\
&= \frac{2}{\lambda}\left[\frac{\omega_1}{2i}\left(\sin\alpha\sin\frac{\alpha}{2}+\cos\alpha\cos\frac{\alpha}{2}\right)-\frac{\omega}{2i}\cos\frac{\alpha}{2}\right]\\
&= \frac{2}{\lambda}\cos\frac{\alpha}{2}\frac{i}{2}\left(\omega-\omega_1\right)
\end{aligned}
$$

Do đó,

$$
\begin{cases}
c_1 &= e^{\frac{i}{2}(\omega_1\cos\alpha-\omega)t}\cos\frac{\alpha}{2}\left(\frac{i}{\lambda}\left(\omega-\omega_1\right)\sin\frac{\lambda}{2}t+\cos\frac{\lambda}{2}t\right)\\
c_2 &= ...
\end{cases}
$$

Vì vậy, ta có kết quả là:

$$
\begin{aligned}
\chi(t) &= \begin{pmatrix}\left[\cos\big(\lambda t/2\big)-i\frac{(\omega_1-\omega)}{\lambda}\sin\big(\lambda t/2\big)\right]\cos\big(\alpha/2\big)e^{-i\omega t/2}\\ \\ \left[\cos\big(\lambda t/2\big)-i\frac{(\omega_1+\omega)}{\lambda}\sin\big(\lambda t/2\big)\right]\sin\big(\alpha/2\big)e^{+i\omega t/2}\end{pmatrix} = \langle\chi_+|\chi\rangle\,\chi_+(t)+\langle\chi_-|\chi\rangle\,\chi_-(t)\\
&= \mathbf{X}_+(t)+\mathbf{X}_-(t)
\end{aligned}
$$

$$
\mathbf{X}_+(t) = e^{i\theta_+(t)}e^{i\gamma_+(t)}\chi_+(t)
$$

$$
\theta_+(t) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_+(t)dt = -\frac{1}{\hbar}\frac{\hbar\omega_1}{2}t = -\frac{\omega_1 t}{2}
$$

Ta thu được:

$$
\chi(t) = \left[\cos\left(\frac{\lambda t}{2}\right)-i\frac{(\omega_1-\omega\cos\alpha)}{\lambda}\sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right)\right]e^{-i\omega t/2}\chi_+(t)+i\left[\frac{\omega}{\lambda}\sin\alpha\sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right)\right]e^{+i\omega t/2}\chi_-(t).
$$

$$
e^{i\gamma_+(t)} = e^{i(\omega_1-\omega)t/2}\left[\cos\left(\frac{\lambda t}{2}\right)-i\frac{(\omega_1-\omega\cos\alpha)}{\lambda}\sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right)\right]
$$

Xác suất chuyển dời sang trạng thái spin down

$$\left|\langle\chi(t)|\chi_-(t)\rangle\right|^2 = \left|i\left[\frac{\omega}{\lambda}\sin\alpha\sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right)\right]\right|^2 = \left[\frac{\omega}{\lambda}\sin\alpha\sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right)\right]^2$$

PROBLEM 11.21 Áp dụng xấp xỉ đoạn nhiệt (Aa) với $T_i << T_c \to \frac{1}{\omega_1} << \frac{2\pi}{\omega}$

$$\lambda = \omega_1\sqrt{1 - 2\frac{\omega}{\omega_1}\cos\alpha + \frac{\omega^2}{\omega_1^2}} \approx \omega_1\left(1 - \frac{\omega}{\omega_1}\cos\alpha\right) = \omega_1 - \omega\cos\alpha$$

$$\Rightarrow e^{i\gamma_+(t)} \approx e^{i(\omega_1-\omega)t/2}e^{-i(\omega_1-\omega\cos\alpha)t/2} \approx e^{i\omega(\cos\alpha-1)t/2}$$

$$\to \gamma_+(t) = \frac{\omega}{2}\left(\cos\alpha - 1\right)t$$

Ta áp dụng công thức pha Berry

$$\gamma_{+,B}(t) = \gamma_+(T) - \gamma_+(0) = \pi(\cos\alpha - 1)$$

$$\Rightarrow \mathbf{X}_- = \frac{i\omega}{\lambda}\sin\alpha\sin\big(\lambda t/2\big)e^{i\omega t/2}\chi_-$$

5 Coherent state

Definition and basic properties

$$|\tilde{x}_0\rangle = \hat{T}_{x_0}|0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}x_0}|0\rangle$$

$$\to \langle\tilde{x}_0\rangle = \langle 0|\hat{T}^\dagger_{x_0}\hat{T}_{x_0}|0\rangle = 1 \to \text{Chuẩn hóa}$$

$$\psi_{x_0}(x) = \langle x|\tilde{x}_0\rangle = \langle x|\hat{T}_{x_0}|0\rangle = \langle x - x_0|0\rangle = \psi_0(x - x_0)$$

$$\langle\tilde{x}_0|\hat{x}|\tilde{x}_0\rangle = \langle 0|\hat{T}^\dagger_{x_0}\hat{x}\hat{T}_{x_0}|0\rangle = \langle 0|\hat{x} + x_0|0\rangle = x_0$$

$$\langle\tilde{x}_0|\hat{p}|\tilde{x}_0\rangle = \langle 0|\hat{T}^\dagger_{x_0}\hat{p}\hat{T}_{x_0}|0\rangle = \langle 0|\hat{p}|0\rangle = 0$$

$$\langle\tilde{x}_0|\hat{H}|\tilde{x}_0\rangle = \langle 0|\hat{T}^\dagger_{x_0}\hat{H}\hat{T}_{x_0}|0\rangle = \langle 0|\frac{\hat{p}}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(\hat{x} + x_0\right)^2|0\rangle = \langle 0|\hat{H}|0\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2x_0^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{1}{2}m\omega^2x_0^2$$

$$\langle\tilde{x}_0|\hat{x}^2|\tilde{x}_0\rangle = \langle 0|\hat{T}^\dagger_{x_0}\hat{x}\hat{T}_{x_0}\hat{T}^\dagger_{x_0}\hat{x}\hat{T}_{x_0}|0\rangle = \langle 0|\left(\hat{x} + x_0\right)^2|0\rangle = x_0^2 + \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\langle\tilde{x}_0|\hat{p}^2|\tilde{x}_0\rangle = \langle 0|\hat{T}^\dagger_{x_0}\hat{p}\hat{T}_{x_0}\hat{T}^\dagger_{x_0}\hat{p}\hat{T}_{x_0}|0\rangle = \langle 0|\hat{p}^2|0\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2}$$

$$\langle\tilde{x}_0|\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}|\tilde{x}_0\rangle = \langle 0|\left(\hat{x} + x_0\right)\hat{p} + \hat{p}\left(\hat{x} + x_0\right)|0\rangle = \langle 0|\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}|0\rangle$$

$$= \langle 0|\left(a^\dagger + a\right)\left(a^\dagger - a\right) + \left(a^\dagger - a\right)\left(a^\dagger + a\right)|0\rangle = \langle 0|2(a^\dagger)^2 - 2a^2|0\rangle = 0$$

Người ta gọi trạng thái coherent là trạng thái lượng tử của một vật gắn với lò xo.

$$\langle\hat{x}\rangle(t) = \langle\tilde{x}_0 t|\hat{x}|\tilde{x}_0 t\rangle = \langle\tilde{x}_0|\hat{x}_H(t)|\tilde{x}_0\rangle = \langle\tilde{x}_0|\hat{x}\cos\omega t + \frac{\hat{p}}{m\omega}\sin\omega t|\tilde{x}_0\rangle = x_0\cos\omega t$$

$$\langle\hat{p}\rangle(t) = \langle\tilde{x}_0|\hat{p}_H|\tilde{x}_0\rangle = \langle\tilde{x}_0|\hat{p}\cos\omega t - m\omega\hat{x}\sin\omega t|\tilde{x}_0\rangle = -m\omega x_0\sin\omega t = m\frac{d}{dx}\langle\hat{x}\rangle(t)$$

Ta tính được:

$$\Delta x = \sqrt{\langle\hat{x}\rangle - \langle\hat{x}^2\rangle} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega} + x_0^2 - x_0^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$\Delta p = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}$$

$$\Delta x\Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

đây chính là bộ 3 tính chất tạo nên trạng thái coherent.

$$\begin{aligned}\langle\hat{x}^2\rangle(t) &= \langle\tilde{x}_0|\hat{x}^2\cos^2\omega t + \frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2}\sin^2\omega t + \frac{\cos\omega t\sin\omega t}{m\omega}\left(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}\right)|\tilde{x}_0\rangle \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega} + x_0^2\right)\cos^2\omega t + \frac{m\omega\hbar}{2m^2\omega^2}\sin^2\omega t = \frac{\hbar}{2m\omega} + x_0^2\cos^2\omega t\end{aligned}$$

$\rightarrow$ **Trạng thái Coherent không thay đổi hình dạng theo thời gian.**

$$\Delta x(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$\Delta p(t) = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}$$

$$\Delta x(t)\Delta p(t) = \frac{\hbar}{2}$$

5.1 Energy Basis:

Đặt $d = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar^2\omega}{2\hbar}}\left(a^\dagger - a\right) = \frac{i\hbar}{d\sqrt{2}}\left(a^\dagger - a\right)$$

$$
\begin{aligned}
|\tilde{x}_0\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}x_0}|0\rangle = \exp\left(\frac{x_0}{d\sqrt{2}}\left(a^\dagger - a\right)\right)|0\rangle \\
&= \exp\left(\frac{x_0}{d\sqrt{2}}a^\dagger\right)\exp\left(-\frac{x_0}{d\sqrt{2}}a\right)\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x_0}{d\sqrt{2}}\right)^2\left[a^\dagger, a\right]\right) \\
&= \exp\left(-\frac{1}{4}\frac{x_0^2}{d^2}\right)\exp\left(\frac{x_0}{d\sqrt{2}}a^\dagger\right)|0\rangle \\
&= \exp\left(-\frac{1}{4}\frac{x_0^2}{d^2}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{x_0}{d\sqrt{2}}\right)^n\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle \\
&= \exp\left(-\frac{1}{4}\frac{x_0^2}{d^2}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{x_0}{d\sqrt{2}}\right)^n|n\rangle \rightarrow \text{ với } |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle
\end{aligned}
$$

Xác suất để có thể đo được năng lượng $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$

$$
|c_n|^2 = e^{\left(-\frac{1}{2}\frac{x_0^2}{d^2}\right)}\frac{1}{n!}\left(\frac{x_0}{d\sqrt{2}}\right)^{2n}
$$

Đặt $\lambda = \left(\frac{x_0}{d\sqrt{2}}\right)^2$

$$
|c_n|^2 = \frac{\lambda^n}{n!}e^{-\lambda}
$$

$\rightarrow$ Đây chính là **Phân bố Poison**

Khi lấy tổng theo n

$$
\sum_{n=0}^{\infty}|c_n|^2 = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}e^{-\lambda} = e^{-\lambda}e^{\lambda} = 1
$$

Có thể tính được

$$
\langle n\rangle = \sum_n n|c_n|^2 = \sum_n n\frac{\lambda^n}{n!}e^{-\lambda} = e^{-\lambda}\left(\frac{d}{d\lambda}\sum_n\frac{\lambda^n}{n!}\right)\lambda = e^{-\lambda}\left(\frac{d}{d\lambda}e^{\lambda}\right)\lambda = \lambda
$$

Hoặc

$$
\langle\tilde{x}_0|a^\dagger a|\tilde{x}_0\rangle = \sum_{m,n}\langle n|c_n^* a^\dagger a c_m|m\rangle = \sum_{m,n} m\,\langle n|m\rangle\, c_n^* c_m = \sum_n n|c_n|^2
$$

$$
\langle n^2\rangle = \sum n^2\frac{\lambda^n}{n!}e^{-\lambda} = \lambda^2 + \lambda
$$

$$
\langle E\rangle = \left(\lambda + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega
$$

$$
\langle E^2\rangle = \left(\langle n^2\rangle + \langle n\rangle + \frac{1}{4}\right)\hbar^2\omega^2 = \left(\lambda^2 + \lambda + \frac{1}{4}\right)\hbar^2\omega^2
$$

$$
\Delta E^2 = \langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2 = \lambda\left(\hbar\omega\right)^2 \rightarrow \Delta E = \hbar\omega\sqrt{\lambda} = \hbar\omega\frac{x_0}{d\sqrt{2}}
$$

Khi $\lambda \gg \hbar\omega x_0 \gg d$: $\hbar\omega \ll \Delta E \ll \langle E \rangle$

Do đó, **trạng thái coherent được xem là trạng thái semi-classical**

$$|\alpha\rangle = e^{\alpha\left(a^\dagger - a\right)} |0\rangle$$

Xem xét tổng quát hơn $\to \alpha$ là số phức ($\alpha \in C$)

$$|\alpha\rangle = e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a} |0\rangle = D(\alpha) |0\rangle$$

$$D(\alpha)D^\dagger(\alpha) = e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a} e^{\alpha^* a - \alpha a^\dagger} = 1$$

$$\begin{aligned}
|\alpha\rangle &= e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a} |0\rangle \\
&= \left(e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a} e^{-\frac{1}{2}\left[\alpha a^\dagger, -\alpha^* a\right]}\right) |0\rangle \\
&= \left(e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha a^\dagger}\right) |0\rangle \\
&= \left(e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0} \frac{1}{n!} \left(\alpha a^\dagger\right)^n\right) |0\rangle \\
&= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle
\end{aligned}$$

Chứng minh giao hoán tử

$$\left[A, e^B\right] = [A, B] e^B$$

Ta có:

$$\begin{aligned}
\sum_n [A, B^n] \frac{1}{n!} &= \sum_n \frac{1}{n!} n B^{n-1} [A, B] \\
&= \sum_{n=1} \frac{1}{(n-1)!} B^{n-1} [A, B] \\
&= \sum_m \frac{1}{(m)!} B^m [A, B] \\
&= [A, B] e^B
\end{aligned}$$

Áp dụng vào, ta được

$$\begin{aligned}
a |\alpha\rangle &= a e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a} |0\rangle \\
&= \left[a, e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a}\right] |0\rangle + e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a} a |0\rangle \\
&= \left[a, \alpha a^\dagger - \alpha^* a\right] e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a} |0\rangle \\
&= \left[a\left(\alpha a^\dagger - \alpha^* a\right) - \left(\alpha a^\dagger - \alpha^* a\right) a\right] |\alpha\rangle \\
&= \alpha |\alpha\rangle
\end{aligned}$$