

Quantum Optics - Chap 1,2,3

Ngày 8 tháng 10 năm 2024

1 Giới thiệu.

1.1 Quang lượng tử là gì?

Quang lượng tử là một chủ đề mà giải quyết hiện tượng quang học có thể giải thích bằng việc xem ánh sáng như một dòng các photon hơn là sóng điện từ. Theo nguyên lý, môn học này lâu đời như lý thuyết lượng tử, nhưng trong thực nghiệm, nó còn khá mới mẻ, và thực sự chỉ mới dạo đầu của một phần tư thế kỷ 20.

Trong quá trình phát triển lý thuyết về ánh sáng, ba hướng tiếp cận chính có thể được kể ra, cổ điển, bán cổ điển và lý thuyết lượng tử. Nó trải qua mà không nói rằng chỉ hoàn toàn là cách tiếp cận quang lượng tử. Tuy nhiên, điều đó cũng đúng cho trường hợp lý thuyết bán cổ điển, khá đầy đủ cho nhiều mục đích. Ví dụ, khi lý thuyết về hấp phụ ánh sáng bởi các nguyên tử lần đầu tiên được xem xét, ta thường dùng cơ học lượng tử để áp dụng cho nguyên tử, nhưng việc xem ánh sáng là sóng điện từ cổ điển.

Câu hỏi rằng chúng ta thực sự cần phải định nghĩa chủ đề về quang lượng tử liệu rằng có ảnh hưởng đến việc không thể giải thích theo cách tiếp cận bán cổ điển. Nó có thể đến một cách ngạc nhiên cho người đọc rằng có tương đối ít hiện tượng luận này. Do đó, mãi đến 30 năm trước, có một vài tác động trực tiếp, chủ yếu liên quan đến trường chân không, như quá trình phát đột ngột và dịch chuyển Lamb, cái mà cần mô hình lượng tử của ánh sáng.

Hãy xem xét một ví dụ dường như đòi hỏi hình ảnh photon của ánh sáng, đó là hiệu ứng quang điện. Hiệu ứng này mô tả sự phóng electron ra khỏi kim loại dưới tác động của ánh sáng. Giải thích về hiện tượng này lần đầu tiên được Einstein đưa ra vào năm 1905, khi ông nhận ra rằng các nguyên tử phải hấp thụ năng lượng từ chùm ánh sáng dưới dạng các gói năng lượng lượng tử hóa. Tuy nhiên, các phân tích cẩn thận sau đó đã chỉ ra rằng kết quả này thực ra có thể được hiểu bằng cách chỉ coi các nguyên tử là các đối tượng lượng tử hóa, trong khi ánh sáng chỉ là một sóng điện từ cổ điển. Các lập luận theo cùng hướng này cũng có thể giải thích cách các xung riêng lẻ được phát ra bởi các thiết bị "đếm photon đơn lẻ" không nhất thiết chứng tỏ rằng ánh sáng bao gồm các photon. Trong hầu hết các trường hợp, các xung đầu ra có thể thực sự được giải thích theo hướng phóng xác suất của một electron riêng lẻ từ một trong các trạng thái lượng tử trong nguyên tử dưới tác động của một sóng ánh sáng cổ điển. Do đó, mặc dù các thí nghiệm này hướng chúng ta tới hình ảnh photon của ánh sáng, chúng không đưa ra bằng chứng kết luận.

Mãi đến cuối những năm 1970, lĩnh vực quang học lượng tử như chúng ta biết ngày nay mới bắt đầu phát triển. Vào thời điểm đó, những quan sát đầu tiên về các hiệu ứng mang lại bằng chứng trực tiếp về bản chất photon của ánh sáng, chẳng hạn như hiện tượng chống bó photon (photon antibunching), đã được chứng minh thuyết phục trong phòng thí nghiệm. Kể từ đó, phạm vi của lĩnh vực này đã mở rộng đáng kể, và hiện bao gồm nhiều chủ đề mới vượt xa việc nghiên cứu ánh sáng thuần túy.

1.2 Lịch sử ngắn về quang lượng tử.

Trong giai đoạn phát triển ban đầu của quang học, có hai lý thuyết đối lập nhau, đó là lý thuyết hạt do Newton đề xuất và lý thuyết sóng được Huygens, người đồng thời với Newton, trình bày. Lý thuyết sóng đã được chứng minh một cách thuyết phục qua thí nghiệm hai khe của Young vào năm 1801 và qua cách giải thích sóng về hiện tượng nhiễu xạ của Fresnel vào năm 1815. Sau đó, lý thuyết này được củng cố vững chắc về mặt lý thuyết với việc Maxwell đưa ra phương trình sóng điện từ vào năm 1873. Do đó, vào cuối thế kỷ 19, lý thuyết hạt đã bị xếp vào danh mục quan tâm lịch sử mà thôi.

Tình hình đã thay đổi một cách triệt để vào năm 1901 với giả thuyết của Planck rằng bức xạ vật đen được phát ra dưới dạng các gói năng lượng rời rạc gọi là lượng tử. Với giả định này, ông đã có thể giải quyết được vấn đề thảm họa tia cực tím, một vấn đề đã làm các nhà vật lý bối rối trong nhiều năm. Bốn năm sau, vào năm 1905, Einstein đã áp dụng lý thuyết lượng tử của Planck để giải thích hiệu ứng quang điện. Những ý tưởng tiên phong này đã đặt nền móng cho các lý thuyết lượng tử về ánh sáng và nguyên

tử, nhưng tự chúng không đưa ra bằng chứng thực nghiệm trực tiếp về bản chất lượng tử của ánh sáng. Như đã đề cập ở trên, những gì chúng thực sự chứng minh là một thứ gì đó đã được lượng tử hóa, mà không khẳng định dứt khoát rằng đó chính là ánh sáng được lượng tử hóa.

Nỗ lực nghiêm túc đầu tiên trong việc thực hiện một thí nghiệm quang học lượng tử thực sự được Taylor tiến hành vào năm 1909. Ông đã thiết lập thí nghiệm khe sáng Young và dần dần giảm cường độ của chùm sáng đến mức chỉ có một lượng tử năng lượng có mặt trong thiết bị tại một thời điểm nhất định. Mẫu giao thoa thu được được ghi lại bằng một tấm phim chụp ảnh với thời gian phơi sáng rất dài. Đáng thất vọng cho ông, Taylor không nhận thấy sự thay đổi đáng kể nào trong mẫu giao thoa, ngay cả ở cường độ ánh sáng thấp nhất.

Cùng năm với thí nghiệm của Taylor, Einstein đã xem xét các dao động năng lượng của bức xạ vật đen. Khi thực hiện điều này, ông chỉ ra rằng bản chất rời rạc của năng lượng bức xạ tạo ra một hạng tử bổ sung tỉ lệ thuận với số lượng trung bình của các lượng tử, qua đó dự đoán trước lý thuyết hiện đại về thống kê photon.

Lý thuyết chính thức về sự lượng tử hóa ánh sáng ra đời vào những năm 1920, sau khi cơ học lượng tử xuất hiện. Thuật ngữ "photon" được Gilbert Lewis đặt ra vào năm 1926, và một năm sau đó, Dirac đã công bố bài báo có ảnh hưởng lớn về lý thuyết lượng tử của bức xạ. Tuy nhiên, trong những năm tiếp theo, trọng tâm chính lại là việc tính toán các quang phổ của nguyên tử, và rất ít nỗ lực được đầu tư vào việc tìm kiếm các hiệu ứng lượng tử liên quan trực tiếp đến ánh sáng.

Lĩnh vực quang học lượng tử hiện đại thực sự ra đời vào năm 1956 với công trình của Hanbury Brown và Twiss. Các thí nghiệm của họ về sự tương quan giữa cường độ ánh sáng sao được ghi lại trên hai bộ dò tách biệt đã gây ra một cuộc tranh cãi lớn. Sau đó, người ta đã chứng minh rằng kết quả của họ có thể được giải thích bằng cách coi ánh sáng là cổ điển và chỉ áp dụng lý thuyết lượng tử cho quá trình phát hiện photon. Tuy nhiên, các thí nghiệm này vẫn được coi là cột mốc quan trọng trong lĩnh vực này vì chúng là nỗ lực nghiêm túc đầu tiên nhằm đo các dao động trong cường độ ánh sáng trên các khoảng thời gian ngắn. Điều này đã mở ra cánh cửa cho các thí nghiệm tinh vi hơn về thống kê photon, cuối cùng dẫn đến việc quan sát các hiện tượng quang học mà không có lời giải thích cổ điển.

Việc phát minh ra laser vào năm 1960 đã khơi dậy sự quan tâm mới đối với lĩnh vực quang học lượng tử. Người ta hy vọng rằng các đặc tính của ánh sáng laser sẽ khác biệt đáng kể so với các nguồn sáng thông thường, nhưng những nỗ lực này lại cho kết quả tiêu cực. Những manh mối đầu tiên về nơi tìm kiếm các hiệu ứng quang học lượng tử rõ ràng được đưa ra bởi Glauber vào năm 1963, khi ông mô tả các trạng thái ánh sáng mới có tính chất thống kê khác với ánh sáng cổ điển. Xác nhận thực nghiệm về các thuộc tính phi cổ điển này được Kimble, Dagenais và Mandel đưa ra vào năm 1977 khi họ lần đầu tiên chứng minh hiện tượng chống bó photon (photon antibunching). Tám năm sau, Slusher và cộng sự đã hoàn thiện bức tranh khi thành công tạo ra ánh sáng ép (squeezed light) trong phòng thí nghiệm.

Trong những năm gần đây, lĩnh vực này đã mở rộng để bao gồm các chuyên ngành liên quan đến xử lý thông tin lượng tử và tương tác có kiểm soát giữa ánh sáng và vật chất. Công trình của Aspect và các cộng sự bắt đầu từ năm 1981 có thể được coi là một cột mốc quan trọng trong lĩnh vực này. Họ đã sử dụng các photon rời từ một chuỗi nguyên tử để chứng minh sự vi phạm bất đẳng thức Bell, từ đó khẳng định một cách rõ ràng rằng quang học lượng tử có thể được áp dụng vào các lĩnh vực khác của vật lý. Kể từ đó, đã có ngày càng nhiều ví dụ về việc sử dụng quang học lượng tử trong các ứng dụng ngày càng mở rộng.

2 Quang cổ điển

2.1 Các phương trình Maxwell và trường điện từ

1. Trường điện tĩnh ($\rho, \vec{E} \notin t$) - Trường từ dừng ($\vec{j}, \vec{B} \notin t$)

* Định luật Gauss.

$$\phi = \oint \vec{E} d\vec{S} = \frac{1}{\epsilon_0} \int_V \rho dV \quad (1)$$

$$\downarrow$$

$$(\quad = \int_V \text{div} \vec{E} dV)$$

$$\downarrow$$

$$\text{div} \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (2)$$

* Định lí Ampe về lưu số cảm ứng từ.

$$\phi = \oint \vec{B} d\vec{l} = \mu_0 \int_S \vec{j} d\vec{S} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & \downarrow \\ & (= \int_S \text{rot} \vec{B} d\vec{S}) \\ & \downarrow \\ & \text{rot} \vec{B} = \mu_0 \vec{j} \end{aligned} \quad (4)$$

* Nguyên lý tính liên tục của từ thông.

$$\oint \vec{B} d\vec{S} = 0 \quad (5)$$

$$\begin{aligned} & \downarrow \\ & (= \int_V \text{div} \vec{B} dV) \\ & \downarrow \\ & \text{div} \vec{B} = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

* Định luật Faraday.

$$E_C = -\frac{d}{dt} \oint \vec{B} d\vec{S} = \oint \vec{E} d\vec{l} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} & \downarrow \\ & (= \int_S \text{rot} \vec{E} d\vec{S}; \frac{d}{dt} \oint = \oint \frac{\partial}{\partial t}) \\ & \downarrow \\ & \text{rot} \vec{E} = 0 \end{aligned} \quad (8)$$

Phương trình Maxwell cho trường điện tĩnh - từ dừng:

Dạng tích phân	Dạng vi phân
$\oint \vec{E} d\vec{S} = \frac{1}{\varepsilon_0} \int_V \rho dV$	$\text{div} \vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}$
$\oint \vec{B} d\vec{l} = \mu_0 \int_S \vec{j} d\vec{S}$	$\text{rot} \vec{B} = \mu_0 \vec{j}$
$\oint \vec{B} d\vec{S} = 0$	$\text{div} \vec{B} = 0$
$-\frac{d}{dt} \oint \vec{B} d\vec{S} = \oint \vec{E} d\vec{l}$	$\text{rot} \vec{E} = 0$

2. Trường biến thiên ($\rho, \vec{j}, \vec{E}, \vec{B} \in t$)

* Do $\vec{B} \in t$, từ định luật Faraday:

$$\begin{cases} -\oint \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} d\vec{S} = \oint \vec{E} d\vec{l} \\ \text{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \end{cases} \quad (9)$$

* Lấy div 2 vế phương trình (4): $\text{div}(\text{rot} \vec{B}) = \mu_0 \text{div} \vec{j} = 0 \rightarrow \text{div} \vec{j} = 0$

* Bảo toàn điện tích: $\oint \vec{j} d\vec{S} = -\frac{d}{dt} \int \rho dV \left(= \frac{dq}{dt} \right) \rightarrow \text{div} \vec{j} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} (\neq 0 \text{ do } \rho \in t)$

\Rightarrow Để $\text{div} \vec{J} = 0$ thì $\vec{J} = \vec{j} + \vec{j}_{\text{dịch}} \rightarrow \text{div} \vec{j}_{\text{dịch}} = -\text{div} \vec{j} = \frac{\partial \rho}{\partial t}$. Đạo hàm 2 vế phương trình (2) theo $t \rightarrow \vec{J} = \vec{j} + \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$.

$$\Rightarrow \text{rot} \vec{B} = \mu_0 (\vec{j} + \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}) \quad (10)$$

Phương trình Maxwell cho trường biến thiên

Dạng tích phân	Dạng vi phân
$\oint \vec{E} d\vec{S} = \frac{1}{\varepsilon_0} \int_V \rho dV$	$div \vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}$
$\oint \vec{B} d\vec{l} = \mu_0 \int_S (\vec{j} + \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}) d\vec{S}$	$rot \vec{B} = \mu_0 (\vec{j} + \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t})$
$\oint \vec{B} d\vec{S} = 0$	$div \vec{B} = 0$
$-\frac{d}{dt} \oint \vec{B} d\vec{S} = \oint \vec{E} d\vec{l}$	$rot \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$

3. Phương trình Maxwell trong môi trường chất.

Các đại lượng \vec{J}, ρ cần phải lấy giá trị trung bình: $\vec{J}, \bar{\rho}$

* Giá trị trung bình của mật độ điện tích $\bar{\rho}$:

$$\begin{aligned} \bar{\rho} &= \rho_{\text{liên kết}} + \rho_{\text{điện tích tự do}} \\ \rightarrow \bar{\rho} &= -div \vec{P} + \rho_{\text{điện tích tự do}} \end{aligned} \quad (11)$$

(\vec{P} là vecto phân cực điện môi khi có điện trường ngoài)

* Giá trị trung bình của mật độ dòng điện \vec{J} :

$$\begin{aligned} \vec{J} &= \vec{j}_{\text{phân cực}} + \vec{j}_{\text{từ hóa}} + \vec{j}_{\text{dẫn}} \\ \rightarrow \vec{J} &= -\frac{\partial \vec{P}}{\partial t} + rot \vec{M} + \vec{j} \end{aligned} \quad (12)$$

Thay (11), (12) và hệ các phương trình Maxwell:

Dạng tích phân	Dạng vi phân
$\oint \vec{D} d\vec{S} = \int_V \rho dV$	$div \vec{D} = \rho$
$\oint \vec{H} d\vec{l} = \int_S (\vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}) d\vec{S}$	$rot \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$
$\oint \vec{B} d\vec{S} = 0$	$div \vec{B} = 0$
$-\frac{d}{dt} \oint \vec{B} d\vec{S} = \oint \vec{E} d\vec{l}$	$rot \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$

trong đó:

- Vecto cảm ứng điện $\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$
- Vecto cường độ từ trường $\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu_0} - \vec{M}$

Đẳng hướng:

$$\begin{cases} \vec{P} = \alpha \varepsilon_0 \vec{E} \rightarrow \vec{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \vec{E} & \text{với } \varepsilon = 1 + \alpha \\ \vec{M} = \beta \vec{H} \rightarrow \vec{B} = \mu_0 \mu \vec{H} & \text{với } \mu = 1 + \beta \end{cases}$$

2.2 Sóng điện từ

Trường điện từ biến thiên theo thời gian trong môi trường điện môi đẳng hướng đồng chất với các hằng số điện môi ε và từ môi μ . Xét không có các điện tích tự do ($\rho = 0$) và dòng điện ($\vec{J} = 0$)

$$\begin{cases} rot \vec{H} = \varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \\ \varepsilon_0 \varepsilon div \vec{E} = 0 \\ rot \vec{E} = -\mu_0 \mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \\ \mu_0 \mu div \vec{H} = 0 \end{cases} \quad (13)$$

Lấy rot 2 về cho phương trình thứ nhất và thứ ba của hệ phương trình (13):

$$\begin{cases} \text{rot}\{\text{rot}\vec{H}\} = \text{grad}\{\text{div}\vec{H}\} - \Delta\vec{H} = \varepsilon_0\varepsilon \frac{\partial(\text{rot}\vec{E})}{\partial t} \\ \text{rot}\{\text{rot}\vec{E}\} = \text{grad}\{\text{div}\vec{E}\} - \Delta\vec{E} = -\mu_0\mu \frac{\partial(\text{rot}\vec{H})}{\partial t} \end{cases} \quad (14)$$

Thay hệ phương trình (13) vào hệ phương trình (14):

$$\begin{cases} \Delta\vec{H} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \vec{H}}{\partial t^2} = 0 \\ \Delta\vec{E} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \end{cases} \quad (15)$$

với $\frac{1}{v^2} = \mu_0\mu\varepsilon_0\varepsilon$

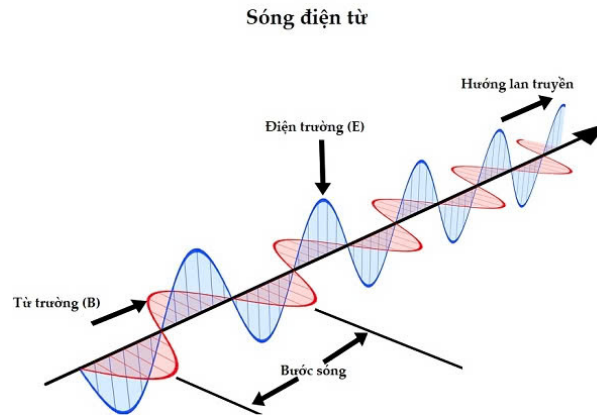
Trong chân không $\mu = 1, \varepsilon = 1 \rightarrow c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0\varepsilon_0}}$. Vậy chiết suất của môi trường: $n = \frac{c}{v} = \frac{1}{\sqrt{\mu\varepsilon}}$.

Các giải pháp thông thường cho các phương trình Maxwell là sóng ngang với các trường điện và từ vuông góc với nhau. Từng thành phần bất kỳ của các vectơ \vec{H} , \vec{E} đều thỏa phương trình D'Alembert không về phải. Xét một sóng phẳng lan truyền theo hướng z, với vectơ cường độ điện trường hướng theo trục x và vectơ cường độ từ trường hướng theo trục y: $e_H = [\vec{e}_z \times \vec{e}_E]$:

$$\begin{cases} \frac{\partial H_y}{\partial y} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 H_y}{\partial t^2} = 0 \\ \frac{\partial E_x}{\partial x} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 E_x}{\partial t^2} = 0 \end{cases} \quad (16)$$

Dùng phương pháp tách biến $H_y(y, t) = H_y(y).H_y(t)$ và $E_x(x, t) = E_x(x).E_x(t)$:

$$\begin{cases} H_y = H_{0y} [\cos(kv.t - kz + \varphi) + \cos(kv.t + kz + \varphi')] \\ E_x = E_{0x} [\cos(kv.t - kz + \varphi) + \cos(kv.t + kz + \varphi')] \end{cases} \quad (17)$$



với $k = \frac{2\pi}{\lambda_m} = \frac{\omega}{v} = \frac{n\omega}{c}$ là độ lớn vectơ truyền sóng \vec{k}_z ; λ_m là bước sóng trong môi trường. Thay phương trình (17) vào phương trình (13):

$$H_{0y} = E_{0x} \sqrt{\frac{\varepsilon_0\varepsilon}{\mu_0\mu}} = \frac{E_{0x}}{Z} \quad (18)$$

với Z là trở sóng của môi trường

$$Z = \sqrt{\frac{\mu_0\mu}{\varepsilon_0\varepsilon}} \quad (19)$$

Vecto mật độ dòng năng lượng Poynting:

$$\vec{I} = \vec{E} \times \vec{H} \leftrightarrow I\vec{e}_z = E_x\vec{e}_x \times H_y\vec{e}_y = \frac{1}{Z}.E^2\vec{e}_z \quad (20)$$

lấy thời gian trung bình trong chu kỳ:

$$\langle I \rangle = \frac{1}{Z} \langle E(t)^2 \rangle_{rms} = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \varepsilon c n E_{0x}^2 \quad (21)$$

2.3 Sự phân cực

Xét sóng phẳng đơn sắc truyền theo trục Oz với vectơ sóng \vec{k} . Vectơ cường độ điện trường thuộc mặt phẳng song song với mặt phẳng Oxy . Ta có:

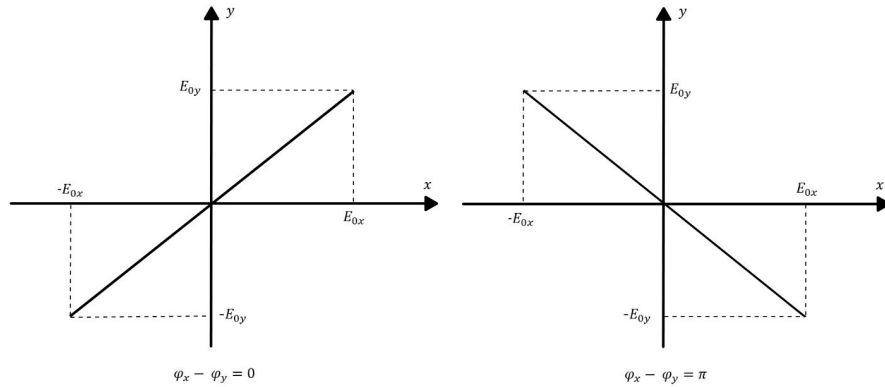
$$\begin{aligned} \vec{E}_x(z, t) &= E_{0x} \cos(\omega t - kz + \varphi_x) \vec{e}_x \\ \vec{E}_y(z, t) &= E_{0y} \cos(\omega t - kz + \varphi_y) \vec{e}_y \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{E_x}{E_{0x}} \right)^2 + \left(\frac{E_y}{E_{0y}} \right)^2 - 2 \frac{E_x}{E_{0x}} \frac{E_y}{E_{0y}} \cos(\varphi_x - \varphi_y) = \sin^2(\varphi_x - \varphi_y) \quad (22)$$

* Trường hợp 1: $\varphi_x - \varphi_y = 0$ hoặc π

$$\begin{aligned} \left(\frac{E_x}{E_{0x}} \mp \frac{E_y}{E_{0y}} \right)^2 &= 0 \\ \rightarrow \text{Sóng phân cực thẳng} \end{aligned} \quad (23)$$

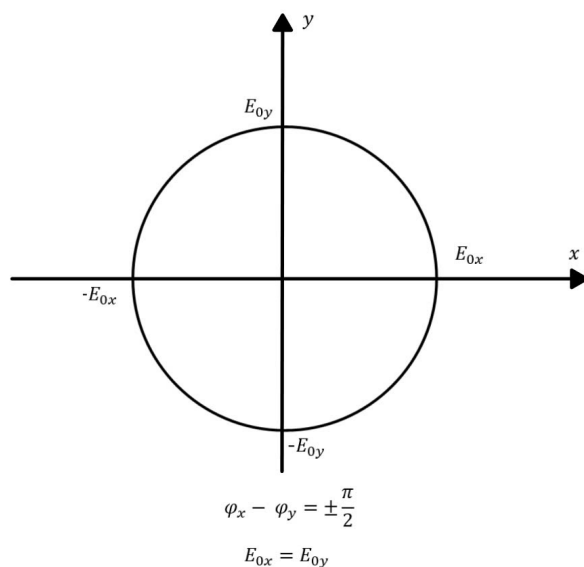
(\vec{E} có phương cố định, vuông góc với \vec{H} và cùng vuông góc với phương truyền)



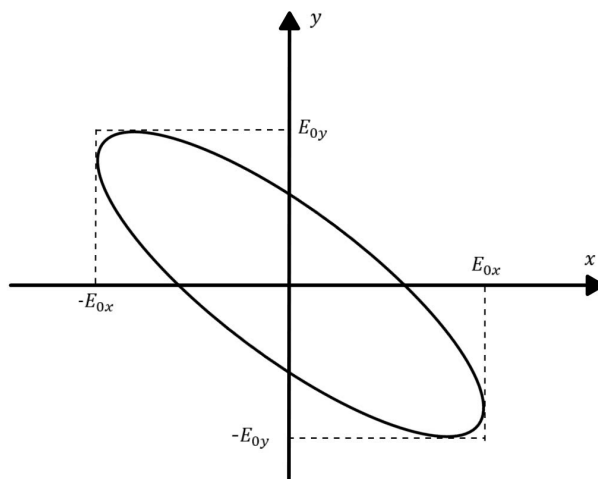
* Trường hợp 2: $\varphi_x - \varphi_y = \pm \frac{\pi}{2}$ và $E_{0x} = E_{0y} = E_0$

$$\begin{aligned} E_x^2 + E_y^2 &= E_0^2 \\ \rightarrow \text{Sóng phân cực tròn} \end{aligned} \quad (24)$$

(Khi t thay đổi thì \vec{E} sẽ quay và đầu mút \vec{E} sẽ vạch nên các vòng tròn)



* Trường hợp 3: Các trường hợp còn lại là phân cực ellip (Khi t thay đổi thì \vec{E} sẽ quay và đầu mút \vec{E} sẽ vạch nên các ellip)



2.4 Nhiễu xạ và giao thoa

2.4.1 Nhiễu xạ

Nhiễu xạ ánh sáng có thể được chia thành hai loại chính dựa trên khoảng cách giữa nguồn sáng, vật cản, và màn quan sát:

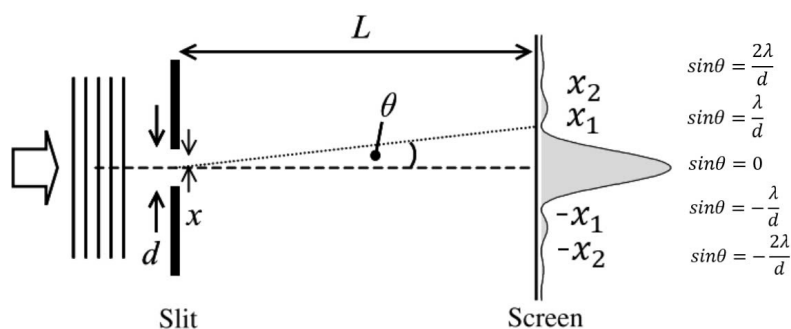
* Nhiễu xạ Fresnel:

- Khi khoảng cách từ khe tới màn bé hơn khoảng cách Rayleigh $L \lesssim \frac{d^2}{\lambda}$
- Ánh sáng đến vật cản có thể coi là sóng cầu.

* Nhiễu xạ Fraunhofer:

- Khi khoảng cách từ khe tới màn lớn hơn khoảng cách Rayleigh $L \gg \frac{d^2}{\lambda}$
- Ánh sáng đến vật cản có thể coi là sóng phẳng.
- Trong trường hợp một khe có bề rộng d . Dao động sóng thứ cấp phát ra từ dải sóng phẳng tọa độ x theo phương θ sẽ lệch pha một lượng $d\phi = 2\pi \frac{x \cdot \sin\theta}{\lambda}$

$$\begin{aligned}
 &\rightarrow dE \sim \exp\left(-i2\pi \frac{x \cdot \sin\theta}{\lambda}\right) dx \\
 \Rightarrow E &\sim \int_{-d/2}^{d/2} \exp(-ikx \cdot \sin\theta) dx \sim \frac{\sin(\beta)}{\beta}
 \end{aligned}
 \tag{25}$$



với $\beta = \frac{k d \sin\theta}{2}$. Mà $I \sim E^2$

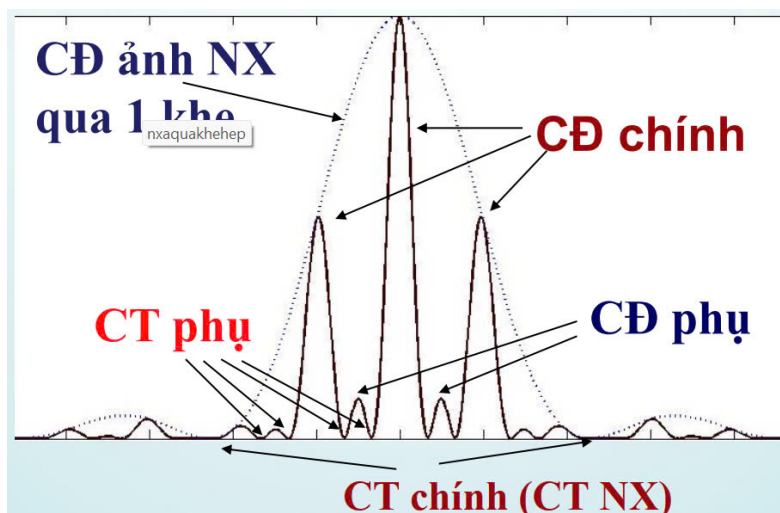
$$\Rightarrow I \sim \left(\frac{\sin(\beta)}{\beta} \right)^2 \quad (26)$$

+ Vân sáng trung tâm: $\lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{\sin\beta}{\beta} = 1 \rightarrow I = I_{max} = I_0$

+ Vân tối: $I = 0 \rightarrow \sin\beta = 0 \rightarrow \sin\theta = \frac{k\lambda}{d}$ với $k = \pm 1, \pm 2, \dots$

+ Vân sáng (khác vân sáng trung tâm): $\sin\beta \pm 1 \rightarrow \sin\theta = (k + 0,5) \frac{\lambda}{b}$ với $k = +1, \pm 2, \pm 3$ (bỏ 0, -1)

-Trong trường hợp có N khe hẹp có chu kỳ cách tử b.



+ Vân sáng chính: $\sin\theta = \frac{k\lambda}{b}$ với $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

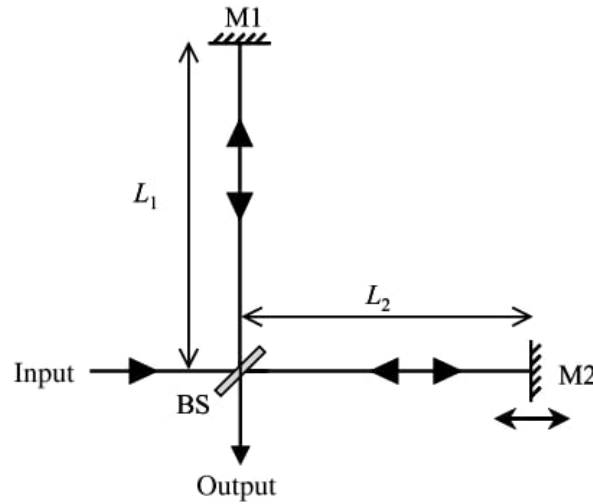
+ Vân tối chính: $I = 0 \rightarrow \sin\beta = 0 \rightarrow \sin\theta = \frac{k\lambda}{d}$ với $k = \pm 1, \pm 2, \dots$

2.4.2 Giao thoa

Khi các sóng tới là các sóng kết hợp và có sự khác biệt về quang trình (dẫn đến độ lệch pha) chồng chất lên nhau. Nếu cùng pha thì sẽ tăng cường (cực đại), còn nếu ngược pha sẽ triệt tiêu (cực tiểu)

Ví dụ giao thoa trong thiết bị Michelson

Khi ánh sáng từ nguồn tới gương chia tia (BS), nó được chia thành hai chùm: Một chùm phản xạ tới gương M1 và một chùm truyền thẳng tới gương M2. Sau khi phản xạ từ hai gương, các chùm sáng trở lại gương chia tia và kết hợp với nhau, rồi truyền đến màn quan sát hoặc máy dò để tạo ra hiện tượng giao thoa. Các vân giao thoa sẽ xuất hiện do sự chênh lệch pha giữa hai chùm sáng. Sự chênh lệch pha này phụ thuộc vào sự khác biệt về quang trình của hai chùm sáng, hay chính là hiệu quang trình $\Delta L = L'_2 - L'_1 = n_2 L_2 - n_1 L_1 = n L_2 - L_1$ (Cho dù $L_1 = L_2$ nhưng ΔL vẫn có thể khác không do chiết



suất của 2 môi trường khác nhau.).

Ta có:

$$\begin{aligned}
 E(\theta_{out}) &= E_1 + E_2 \\
 &= \frac{1}{2}E_0 e^{i2kL_1} + \frac{1}{2}E_0 e^{i2kL_2} e^{i\Delta\phi} \\
 &= \frac{1}{2}E_0 e^{i2kL_1} (1 + e^{i2k\Delta L} e^{i\Delta\phi}),
 \end{aligned} \tag{27}$$

$\Delta\phi$ đại diện cho độ lệch pha của 2 sóng trong trường hợp $L_1 = L_2$.

Vậy ta có độ lệch pha của 2 sóng: $\Delta\varphi = 2k\Delta L + \Delta\phi = \frac{4\pi}{\lambda}\Delta L + \Delta\phi$

$$\Rightarrow \begin{cases} \text{Cực đại: } \Delta\varphi = 2n\pi \rightarrow \frac{4\pi}{\lambda}\Delta L + \Delta\phi = 2n\pi \\ \text{Cực tiểu: } \Delta\varphi = (2n+1)\pi \rightarrow \frac{4\pi}{\lambda}\Delta L + \Delta\phi = (2n+1)\pi \end{cases} \tag{28}$$

3 Cơ học lượng tử.

3.1 Hình thức luận cơ học lượng tử.

3.1.1 Phương trình Schrodinger.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + V\Psi$$

Ta sẽ tìm được nghiệm của phương trình này là hàm sóng $\Psi(r, t)$, và là một hàm trạng thái lan truyền trong không gian (ở vị trí r và thời điểm t bất kì). Theo giải thích thống kê của Born,

$$\int_b^a |\Psi(r, t)|^2 dr = \text{Xác suất tìm thấy hạt ở giữa hai điểm } a \text{ và } b, \text{ tại thời điểm } t.$$

Toán tử Hamiltonian biểu diễn năng lượng toàn phần của hệ:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

ở đây \hat{T} và \hat{V} là toán tử động năng và thế năng. Toán tử vị trí $\hat{\mathbf{r}}$ được xác định bởi

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r},$$

và toán tử động lượng:

$$\hat{\mathbf{p}} = i\hbar \nabla$$

Ta có thể viết lại Hamiltonian dưới dạng các toán tử như sau:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}(\mathbf{r})$$

Nghiệm của phương trình Schrodinger lúc này có thể tách thành phần hàm sóng không gian và thời gian:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})\Theta(t)$$

với $\Theta(t) = \exp(-\frac{iEt}{\hbar})$ và ta cũng rút ra được phương trình Schrodinger độc lập thời gian như sau:

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + \hat{V}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

Trong hệ 1 chiều, các toán tử vị trí, động lượng, Hamiltonian được đơn giản hóa:

$$\hat{x} = x$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}(x)$$

và phương trình Schrodinger độc lập thời gian 1 chiều trở thành:

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

Các hàm sóng thỏa phương trình trên được gọi là trạng thái riêng của Hamiltonian. Mỗi trạng thái riêng này được kí hiệu tương ứng với một số lượng tử (hay bộ số lượng tử) n , vì thế ta có thể viết:

$$\hat{H}\psi_n(\mathbf{r}) = E_n\psi_n(\mathbf{r})$$

với E_n là năng lượng ở trạng thái thứ n .

3.1.2 Các tính chất của hàm sóng.

Tính chất đầu tiên là **tính trực chuẩn** của hàm sóng

$$\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} = 1$$

mô tả xác suất tìm thấy hạt trong toàn bộ miền không gian ở thời điểm t là bằng 1.

Hai hàm sóng $\psi(r)$ và $\phi(r)$ được gọi là **trực giao** nhau nếu:

$$\int \psi(x)^*\phi(x)d^3r = 0$$

Một hàm sóng được gọi là ở **trạng thái chồng chập** nếu nó được viết dưới dạng tổ hợp tuyến tính của các hàm sóng trực giao:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = c_1\Psi_1(\mathbf{r}, t) + c_2\Psi_2(\mathbf{r}, t) + \dots$$

Tính chất **trực chuẩn** được thể hiện qua các hàm riêng của Hamiltonian trực giao với nhau và chuẩn hóa,

$$\int \psi_n^*\psi_n d^3r = \delta_{nn'},$$

với $\delta_{nn'}$ là **hàm delta Kronecker** được định nghĩa:

$$\begin{aligned}\delta_{nn'} &= 1 \text{ if } n = n' \\ &= 0 \text{ if } n \neq n'\end{aligned}$$

Nếu ta xét tại thời điểm $t = 0$, một hàm sóng bất kì Ψ có thể được viết dưới dạng

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \sum_n c_n\psi_n(\mathbf{r})$$

Từ tính chất trực chuẩn của các trạng thái riêng, ta thấy rằng điều kiện chuẩn hóa thỏa mãn khi:

$$\sum_n |c_n|^2 = 1$$

3.1.3 Phép đo và giá trị trung bình.

Một toán tử \hat{O} trong không gian Hilbert có các hàm riêng và trị riêng của nó thông qua phương trình hàm riêng - trị riêng tương ứng:

$$\hat{O}\phi_i = O_i\phi_i$$

trong trường hợp toán tử Hamiltonian, các hàm riêng ϕ_i tạo 1 cơ sở trực chuẩn, vì thế một trạng thái ψ bất kì luôn được biểu diễn dưới dạng tổ hợp tuyến tính các vector cơ sở:

$$\psi = \sum_i c_i \psi_i$$

trong đó c_i là các số phức.

Giá trị trung bình của một toán tử được viết dưới dạng

$$\langle \hat{O} \rangle = \int \psi^* \hat{O} \psi d^3r$$

3.1.4 Các giao hoán tử và nguyên lý bất định.

Giao hoán tử của hai toán tử \hat{A} và \hat{B} được định nghĩa như sau

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

Hai toán tử được gọi là giao hoán nếu $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Giao hoán tử giữa toán tử vị trí và động lượng,

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

điều này cho thấy toán tử vị trí và toán tử động lượng không giao hoán với nhau.

Nguyên lý bất định nói rằng,

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{|[\hat{A}, \hat{B}]|^2}{4}$$

không thể xác định đồng thời chính xác cả vị trí và động lượng của một nguyên tử (như electron) với một mức độ chính xác tuyệt đối. Điều này có nghĩa là càng đo chính xác vị trí của một hạt, thì độ chính xác khi đo động lượng của hạt đó sẽ giảm, và ngược lại.

Nguyên lý bất định vị trí - động lượng thường được viết dưới dạng:

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

và nguyên lý bất định năng lượng - thời gian:

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

3.1.5 Momen động lượng.

Trong cơ học lượng tử, ta có hai loại momen động lượng, một là momen quỹ đạo, hai là spin. Định nghĩa momen động lượng quỹ đạo trong cơ học cổ điển như sau:

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

Ta có một số tính chất của toán tử momen động lượng quỹ đạo $\hat{\mathbf{L}}$:

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0$$

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \text{ và hoán vị vòng quanh.}$$

Vì $\hat{\mathbf{L}}^2$ và \hat{L}_z giao hoán với nhau, ta có thể tìm thấy hàm sóng mà nó đồng thời làm các hàm riêng của hai toán tử:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{l,m_l} = l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m_l}$$

và

$$\hat{l}_z Y_{l,m_l} = m_l \hbar Y_{l,m_l}$$

Hàm Y_{l,m_l} được gọi là hàm điều hòa cầu và có dạng:

$$Y_{l,m_l}(\theta, \phi) = C_l^{m_l} P_l^{m_l}(\cos(\theta)) e^{im_l \phi}$$

l được gọi là số lượng tử quỹ đạo có giá trị từ 0, 1, ..., và m_l được gọi là số lượng tử từ có giá trị từ -1 đến +1.

Tương tự cho toán tử Spin, ta có các tính chất như sau:

$$[\hat{s}^2, \hat{s}_z] = 0$$

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hbar \hat{s}_z, \text{ và hoán vị vòng quanh.}$$

Vì \hat{s}^2 và \hat{s}_z giao hoán với nhau, ta có thể tìm thấy hàm sóng mà nó đồng thời làm các hàm riêng của hai toán tử:

$$\hat{s}^2 \chi = s(s+1)\hbar^2 \chi$$

và

$$\hat{s}_z \chi = m_s \hbar \chi$$

s và m_s là các số lượng tử cho biên độ spin và thành phần z của nó, m_s có giá trị từ -s đến s. Các electron, proton hay neutron có spin $s = \frac{1}{2}$ vì thế $m_s = \pm \frac{1}{2}$.

Khi một hạt có momen động lượng quỹ đạo và spin, momen động lượng toàn phần được định nghĩa:

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$$

số lượng tử j gắn với \mathbf{j}^2 lấy bất kì số nguyên từ $|l-s|$ đến $|l+s|$, trong khi m_j có giá trị từ -j đến j.

3.1.6 Kí hiệu Dirac.

Trong kí hiệu Dirac, hàm sóng có thể được biểu diễn dưới dạng các vector ket:

$$\psi = |psi\rangle$$

và tương ứng với liên hợp phức của nó là một vector bra:

$$\psi^* = \langle \psi |$$

Các hàm riêng thường được kí hiệu theo các số lượng tử:

$$\psi_{lmn\dots} = |l, m, n, \dots\rangle$$

Tích phân chồng phủ có dạng:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int \psi^* \phi d^3 \mathbf{r}$$

Tương tự, giá trị trung bình của một toán tử được viết:

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \int \psi^* \hat{O} \psi d^3 \mathbf{r}$$

Cuối cùng, thành phần ma trận tương ứng:

$$\langle n | \hat{O} | m \rangle = \int \psi_n^* \hat{O} \psi_m d^3 \mathbf{r}$$

3.2 Lý thuyết dải chất rắn.

Trạng thái của electron trong mạng tinh thể được mô tả bởi lý thuyết dải chất rắn. Các nguyên tử ở trong chất rắn được gần rất gần nhau, ở khoảng cách của kích thước nguyên tử. Do đó, các quỹ đạo ngoài của nguyên tử chồng chập lên nhau và tương tác mạnh với nguyên tử khác. Điều này làm mở rộng các mức rời rạc của nguyên tử tự do vào các dải. Mỗi dải có thể có $2N$ electron trên một đơn vị thể tích, N là số nguyên tử trên đơn vị thể tích. Thừa số 2 phát sinh từ việc có 2 giá trị của spin cho mỗi hàm sóng không gian electron.

Chất bán dẫn silicon và germani đến từ nhóm IV B của bảng tuần hoàn, và vì thế có bốn electron hóa trị mỗi nguyên tử. Điều này cũng hoàn toàn đúng cho các thành phần nhóm III - V của chất bán dẫn như GaAs, bởi nhóm III và V đóng góp phần lớn 8 electron hóa trị.

Ở nhiệt độ 0 tuyệt đối, các dải có thể được xem như là lấp đầy, bắt đầu từ dải thấp nhất, cho đến khi các electron chiếm đóng. Với số electron hóa trị chẵn, có đúng số electron hoàn toàn lấp đầy cả dải, và dải cuối cùng được gọi là dải hóa trị. Có khoảng E_g ở năng lượng gọi là band gap với dải tiếp theo, gọi là dải dẫn, chưa được lấp đầy. Khi nhiệt độ tăng dần, số lượng electron nhất định có thể bị kích thích từ dải hóa trị đến dải dẫn, để lại trạng thái trống gọi là lỗ trống ở dải hóa trị. Những trạng thái trống này tương đương với việc mất đi 1 electron, và có điện tích là $+e$.

Những electron ở dải dẫn và lỗ trống dải hóa trị được xem như các hạt tự do, nhưng với khối lượng khác nhau. Khối lượng hiệu dụng và giá trị của electron và lỗ trống thường khác nhau. Dòng điện có thể được tải bởi electron dải dẫn và cả lỗ trống dải hóa trị. Ở nhiệt độ phòng, thường có ít hạt tải tự do hơn kim loại, điều này giải thích tại sao các vật liệu này gọi là bán dẫn.

Mật độ electron tự do và lỗ trống có thể được kiểm soát bởi việc đưa tạp chất vào tinh thể. Khi các nguyên tử nhóm V được thêm vào doping loại n, tạp chất này có electron hóa trị sẽ cho thêm electron tự do ở dải dẫn. Tương tự với việc thêm tạp chất loại p từ nhóm III sẽ gây ra sự thiếu hụt electron, vì vậy tăng lỗ trống.

3.2 Các trạng thái lượng tử trong nguyên tử

3.2.1 Cấu trúc thô

Cấu trúc thô (gross structure) là các mức năng lượng của nguyên tử khi chúng ta xem xét tương tác giữa các electron với các hạt nhân và lực đẩy Coulomb các electron với nhau.

Áp dụng phương trình Schrodinger (tọa độ cầu) cho nguyên tử đơn giản nhất là hydrogen, ta có:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) \quad (29)$$

Lưu ý đại lượng m xuất hiện trong phương trình trên là khối lượng rút gọn từ khối lượng electron m_0 và khối lượng hạt nhân m_N

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_0} + \frac{1}{m_N} \quad (30)$$

Hàm sóng có thể được viết theo dạng:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi) \quad (31)$$

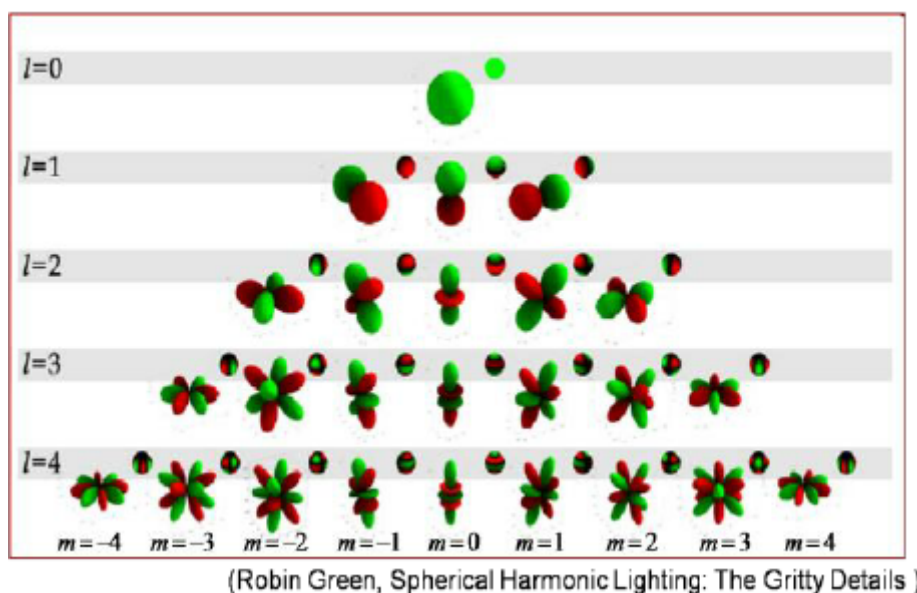
trong đó có hàm cầu điều hòa $Y(\theta, \varphi)$.

Ta có thể tra thêm trong bảng:

Bảng 1: Spherical harmonic functions.

l	m_l	$Y_{l,m_l}(\theta, \varphi)$
0	0	$(1/4\pi)^{1/2}$
1	0	$(3/4\pi)^{1/2} \cos \theta$
1	± 1	$\mp (3/8\pi)^{1/2} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$
2	0	$(5/16\pi)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$
2	± 1	$\mp (15/8\pi)^{1/2} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$
2	± 2	$(15/32\pi)^{1/2} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$

Ta có minh họa:



Dải năng lượng của nguyên tử hydrogen được xác định bởi số lượng tử chính n:

$$E_n = -\frac{m_e^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{Z^2}{n^2}, \quad (32)$$

hoặc dạng đơn giản hơn:

$$E_n = -\frac{m}{m_0} \frac{Z^2}{n^2} R_\infty hc, \quad (33)$$

trong đó $R_\infty = 1.0974 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ là hằng số Rhyberg và $R_\infty hc = 13.6 \text{ eV}$ là mức ground state tại $n = 1$ mà ta quen thuộc.

Bốn số lượng tử:

Bảng 2: Quantum numbers and their significance.

Ký hiệu	Hệ cơ lượng tử	Tên gọi	Phổ giá trị	Ý nghĩa
n	electron trong nguyên tử	số lượng tử chính	1, 2, 3, ...	Xác định năng lượng của Electron trong nguyên tử
l	electron trong nguyên tử	số lượng tử phụ	0, 1, ..., n-1	Xác định moment động lượng M của electron. Moment động lượng là đại lượng vector
m_l	electron trong nguyên tử	số lượng tử	-l, -l+1, 0, ..., l-1, l	Xác định hướng của vector moment động lượng. - Ứng với 1 giá trị của l , thì có $2l + 1$ giá trị của m_l - Ứng với 1 giá trị của n thì có n^2 giá trị của m_l
m_s	hạt cơ bản	số lượng tử spin	-1/2, 1/2 với electron	

Ứng với mỗi cặp giá trị n và l, hàm sóng xuyên tâm R_{nl} có dạng:

$$R_{nl}(r) = C_{nl} \left(\frac{r}{a} \right)^l F \left(\frac{r}{a} \right) e^{-\frac{r}{a}}, \quad (34)$$

trong đó, C_{nl} là hệ số chuẩn hóa, còn $F(x)$ là hàm Laguerre. Đại lượng a là khoảng cách, được tính:

$$a = \frac{n}{Z} \frac{m_0}{m} a_0 = \frac{n}{Z} \frac{m_0}{m} \left(\frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_0 e^2} \right) \quad (35)$$

với a_0 là bán kính Bohr ($5,29 \cdot 10^{-11} \text{m}$)

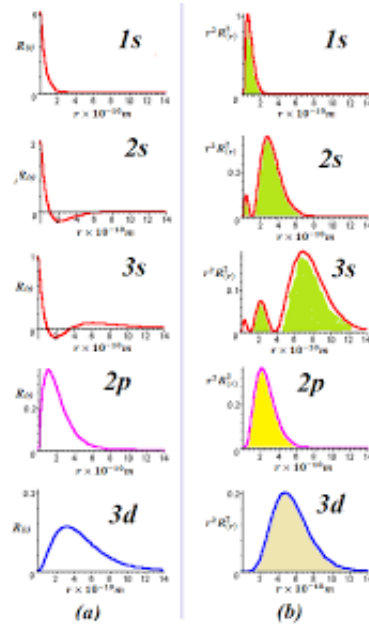
Tổng quát có nguyên tử có N electron:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right) + \sum_{i>j}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad (36)$$

Bảng 3: Radial wave functions of a hydrogenic atom with a nuclear charge of $+Ze$ and an infinitely heavy nucleus. a_0 is the Bohr radius defined in eqn 3.65 ($5.29 \times 10^{-11} \text{ m}$). The wave functions are normalized so that $\int_{r=0}^{\infty} R_{nl}^* R_{nl} r^2 dr = 1$.

n	l	$R_{nl}(r)$
1	0	$(Z/a_0)^{3/2} 2 \exp(-Zr/a_0)$
2	0	$(Z/a_0)^{3/2} 2 (1 - Zr/2a_0) \exp(-Zr/2a_0)$
2	1	$(Z/a_0)^{3/2} (2/\sqrt{3}) (Zr/2a_0) \exp(-Zr/2a_0)$
3	0	$(Z/3a_0)^{3/2} [1 - (2Zr/3a_0) + (2/3)(Zr/3a_0)^2] \exp(-Zr/3a_0)$
3	1	$(Z/3a_0)^{3/2} (4\sqrt{2/3}) (Zr/3a_0) (1 - Zr/6a_0) \exp(-Zr/3a_0)$
3	2	$(Z/3a_0)^{3/2} (2\sqrt{2/5}) (Zr/3a_0)^2 \exp(-Zr/3a_0)$

Ta có minh họa:



Số hạng thứ ba tương ứng với tương tác giữa các electron trong nguyên tử. Số hạng này có độ lớn đáng kể (như số hạng thứ nhất) và không thể bị bỏ qua. Khi này, phương trình Schrodinger trở nên phức tạp và không có nghiệm chính xác. Do đó, ta cần áp dụng gần đúng Trường trung tâm (Central field approximation). Trong gần đúng này, thế tương tác với hạt nhân có dạng đối xứng cầu, phụ thuộc vào khoảng cách r với trung tâm, và số hạng thứ ba được gọi là số hạng "dư" (residual), tượng trưng cho những tương tác "không trung tâm" (mà ta hy vọng là nhỏ). Và đây là một gần đúng khá tốt

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{\text{central}}(r_i) \right) + V_{\text{residual}} \quad (37)$$

Gần đúng trường trung tâm khá hữu ích, vì rằng các hàm cầu điều hòa được thỏa luận ở phần 3.1.5 là những hàm riêng của các trường đối xứng xuyên tâm, không chỉ riêng thế Coulomb, tức những nguyên

tử nhiều electron có thể được xây dựng dựa trên cách mà ta đã xây dựng nguyên tử Hydro, chỉ thay đổi một chút ở hàm $R_{nl}(r_i)$.

Trong gần đúng trường trung tâm này, các electron được đặc trưng bởi bộ bốn số lượng tử n, l, m_l, m_s mà tôi đã trình bày ở bảng 2. Vì các electron là những fermion không thể phân biệt, hàm sóng của N-electron sẽ phản đối xứng, được thể hiện bằng Định thức Slater:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_\alpha(1) & \psi_\alpha(2) & \cdots & \psi_\alpha(N) \\ \psi_\beta(1) & \psi_\beta(2) & \cdots & \psi_\beta(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_\nu(1) & \psi_\nu(2) & \cdots & \psi_\nu(N) \end{vmatrix} \quad (38)$$

trong đó mỗi giá trị $\alpha, \beta, \dots, \nu$ thể hiện một bộ bốn số lượng tử, còn các số $1, 2, \dots, N$ là số thứ tự của electron. Vì định thức sẽ bằng không khi có hai hàng bằng nhau, nên mỗi bộ số lượng tử là độc nhất. Đây là Nguyên Lý Loại Trừ Pauli.

(PHẦN TIẾP THEO SẼ HỎI NGHIÊNG VỀ HÓA MỘT CHÚT)

Cấu hình electron của một nguyên tử được quyết định bởi các trạng thái lượng tử bị chiếm bởi electron. Trong phép gần đúng đầu tiên, năng lượng của các trạng thái chỉ phụ thuộc vào n và l , và phụ thuộc mạnh hơn vào giá trị của n . Mỗi cặp nl cho ta một "phân lớp". Ví dụ: phân lớp s có $l=0$ nên $m_l=0$, ứng với hai m_s là $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ nên phân lớp s có 2 electron; tương tự, phân lớp p có $l=1$, $m_l = -1, 0, 1$, $m_s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ ứng với sức chứa 6 electron cho phân lớp này.

Bảng 4: Spectroscopic notation used to designate orbital states

l	0	1	2	3	4	...
Notation	s	p	d	f	g	...

Các phân lớp được điền đầy sẽ có m_l và m_s mang giá trị âm và dương đối xứng nhau, nên chúng có tổng bằng không, không có giá trị về mặt hóa học, nói cách khác là chúng "bền vững". Ngược lại, chỉ những electron lớp ngoài cùng chưa được điền đầy, nên chúng có thể tham gia vào các phản ứng hóa học. Nói cách khác, chúng có "giá trị về mặt hóa học" hay "hóa trị".

Một trường hợp riêng quan trọng trong quang lượng tử là các nguyên tố kim loại kiềm (nhóm 1A). Chúng có 1 electron ngoài cùng, và để đi từ mức này lên mức kia cần rất nhiều năng lượng, ta có thể xem những nguyên tố này như một dạng "giả nguyên tử đơn electron", tức giống như nguyên tử Hydro. Tuy nhiên, trái với một nguyên tử Hydro thực thụ, năng lượng thô của nguyên tử đơn ngoài cùng này phụ thuộc vào cả n và l . Trong nguyên tử nhiều electron, tùy theo cấp bậc, mà moment động lượng quỹ đạo và spin có thể kết hợp theo nhiều cấp. Hai trong số những hệ quả quan trọng nhất của sự kết hợp này là các tương tác Spin-orbit và tương tác tĩnh điện "dư" (đã nói ở trên). Tương tác tĩnh điện "dư" này có thể là xem như nhiễu loạn chính, dẫn đến hiện tượng LS coupling, trong đó tổng moment quỹ đạo và spin được định nghĩa:

$$L = \sum_i l_i, S = \sum_i s_i \quad (39)$$

Khi đã có hai đại lượng này, ta sẽ tìm được tổng moment động lượng theo công thức:

$$j = l + s \quad (40)$$

Như vậy, các electron hóa trị có thể được đặc trưng bởi bộ ba L, S và J . Trạng thái LS được gọi là các "hạng tử nguyên tử" (atomic terms), ứng với các "mức" (levels) J của hạng tử đó, được viết dưới dạng:

$$|L, S, J\rangle \equiv {}^{(2S+1)}L_J \quad (41)$$

với L có thể là s, p, d, f, ... Số $(2S+1)$ ứng với $2S+1$ trạng thái M_S cho mỗi giá trị spin S .

Ví dụ, electron ngoài cùng của kim loại kiềm có spin $1/2$, ở trạng thái $L \equiv s$ nên có $L=0$ (ở trạng thái ground state), suy ra $j=l+s=0+1/2=1/2$. Như vậy electron đó có thể được viết ${}^2S_{1/2}$. Ở trạng thái kích thích, electron có trạng thái l cao hơn, do đó có thể mang hai giá trị J thỏa là $1/2$ và $-1/2$. Hai giá trị này hơi "tách" nhau ra một chút (ta sẽ thấy sau).

3.2.2 Cấu trúc tinh tế và siêu tinh tế

Cấu trúc tinh tế

Ở phần trước, ta đã xây dựng cấu trúc thô, gồm tương tác Coulomb và tương tác "đur" là phần nhiễu loạn chính (mạnh hơn nhiều so với tương tác spin-quỹ đạo). Tuy nhiên, vẫn còn những tương tác nhỏ hơn ảnh hưởng đến cấu trúc năng lượng của nguyên tử, ta gọi chúng là "fine structure". Nhìn chung, các số hạng này là nhỏ, nhỏ hơn những số hạng của gross structure một hệ số tỉ lệ với $Z^2\alpha^2$, với $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c = 1/137$ là hằng số cấu trúc tinh tế.

Giờ ta xét đến hạng tử mà ta bỏ qua trong tính toán ban nãy: spin-orbit interaction. Số hạng này có thể được hiểu là tương tác giữa từ trường do electron chuyển động sinh ra với lưỡng cực từ do spin. Ta có thể tính được đóng góp năng lượng của tương tác này thông qua việc tính Hamilton hiệu dụng:

$$\hat{H}_{so} = C \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (42)$$

với giá trị của C phụ thuộc vào cấu hình điện tử.

Ta có:

$$J^2 = (L + S)^2 \quad (43)$$

khi đó:

$$\begin{aligned} \langle L \cdot S \rangle &= \frac{1}{2} \langle J^2 - L^2 - S^2 \rangle, \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]. \end{aligned} \quad (44)$$

Kết hợp lại, ta có độ dịch mức năng lượng:

$$\Delta E_{SO} = C' [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] \quad (45)$$

Như vậy ta thấy, giữa hai spin khác nhau trong cùng một bộ ba số lượng tử L, S, J có một sự chênh lệch năng lượng nhỏ nhỏ.

Ví dụ, tại phân lớp 3p (l=1), ta có hai giá trị $^2P_{3/2}$ và $^2P_{1/2}$ ứng với spin up và down cho ô đầu tiên. Độ chênh lệch năng lượng của hai mức này là 2.1×10^{-3} eV, một ngàn lần nhỏ hơn khoảng chênh 2.1eV giữa phân lớp 3s và 3p.

Cấu trúc siêu tinh tế

Kỹ lưỡng hơn nữa, ta cũng xét tương tác spin-orbital như trên, nhưng với spin của hạt nhân (I). Khi đó độ chênh lệch năng lượng có dạng:

$$E_{HFS} = A(J) \langle \mathbf{I} \cdot \mathbf{J} \rangle \quad (46)$$

Ta tái định nghĩa tổng moment động lượng của nguyên tử:

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J} \quad (47)$$

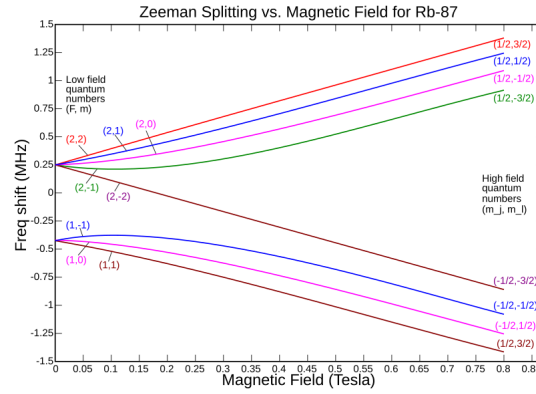
tương tự, ta có độ chênh lệch năng lượng:

$$\Delta E_{HFS} = A(J) \frac{\hbar^2}{2} [F(F+1) - J(J+1) - I(I+1)] \quad (48)$$

Ví dụ cho nguyên tử Hydro, hạt nhân chỉ gồm một proton nên I=1/2. Giả sử nó ở trạng thái ground state nên electron ở phân nhóm 1s, ứng với l=0 và spin của electron là 1/2 hoặc -1/2 (J=L+S). Khi đó ta có hai giá trị khả dĩ của F là 1 và 0.

Thay các giá trị vào, tính được $\Delta E_{HFS} = 5.9 \cdot 10^{-6}$ eV, một triệu lần nhỏ hơn đơn vị thường thấy của gross structure là eV. Mức năng lượng này ứng với bước sóng 21cm, nên có đóng góp lớn trong các hướng thiên văn học có dùng sóng radio.

3.2.3 Hiệu ứng Zeeman



Như đã thấy ở phần trên mỗi electron ở trạng thái đại diện bởi bộ ba số lượng tử L, S, J có $2J+1$ bậc suy biến ứng với $2J+1$ số M_J . Sự suy biến này có thể được thấy rõ khi ta áp vào nó một từ trường ngoài, dẫn đến sự tách vạch. Sự tách vạch này được gọi là Hiệu ứng Zeeman. Hiệu ứng Zeeman không thể được giải thích bởi cấu trúc thô, mà phải viện dẫn cấu trúc tinh tế, nơi các electron trong cùng một phân lớp có sự khác biệt về năng lượng.

Năng lượng của một nguyên tử trong từ trường B dọc theo trục z :

$$\begin{aligned}\Delta E &= -\mu_z \cdot B_z \\ &= -(g_J \mu_B B_z M_J) B_z \\ &= 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \mu_B B_z M_J B_z\end{aligned}\quad (49)$$

Ta thấy, sự chênh lệch năng lượng là hàm tuyến tính với từ trường. Ta có minh họa:

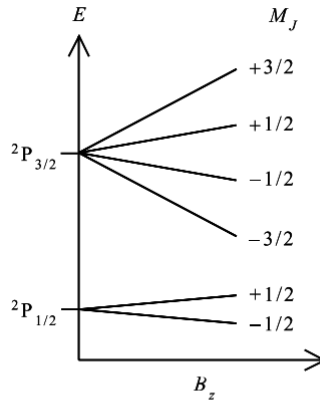


Fig. 3.5 Zeeman splitting of the $^2P_{3/2}$ and $^2P_{1/2}$ levels of an alkali atom.

Ta cũng có phiên bản cấu trúc siêu tinh tế (nếu cần):

$$\Delta E = g_F \mu_B B_z M_F \quad (50)$$

với

$$g_F \approx g_J \frac{F(F+1) + J(J+1) - I(I+1)}{2F(F+1)} \quad (51)$$

3.3 Dao động tử điều hòa

Đây là một gần đúng quan trọng trong quang lượng tử vì cơ lượng tử cho quang học được xây dựng dựa trên ý tưởng về các dao động tử điều hòa.

Ta có phương trình Schrodinger cho dao động tử điều hòa:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x) = E \psi(x) \quad (52)$$

có nghiệm

$$\psi_n(x) = u_n(x) \exp\left(-\frac{m\omega^2 x^2}{2\hbar}\right) \quad (53)$$

và năng lượng

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (54)$$

trong đó, các $u_n(x)$ là các đa thức Hermit

Bảng 5: The polynomial part $u_n(x)$ of the eigenfunctions of the simple harmonic oscillator as defined in eqn 3.92. $a = (\hbar/m\omega)^{1/2}$ and has the dimensions of length, while $H_n(x)$ is the Hermite polynomial of order n . Note that the prefactor of $u_n(x)$ must scale as $1/\sqrt{a}$ in order to ensure correct normalization.

n	$u_n(x)$
0	$(1/a\sqrt{\pi})^{1/2}$
1	$(1/2a\sqrt{\pi})^{1/2} 2(x/a)$
2	$(1/8a\sqrt{\pi})^{1/2} [2 - 4(x/a)^2]$
3	$(1/48a\sqrt{\pi})^{1/2} [12(x/a) - 8(x/a)^3]$
\vdots	
n	$(1/n!2^n a\sqrt{\pi})^{1/2} H_n(x/a)$

Độ bất định:

$$\Delta x \Delta p_x = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \quad (55)$$

Dễ thấy rằng, khi $n=0$, năng lượng vẫn khác không, đảm bảo Nguyên lý bất định Heisenberg. Năng lượng lạ kỳ này được quy gán cho Chuyển động Điểm không (hay Năng lượng điểm không ZPE). Trong Quang lượng tử, thứ năng lượng kỳ lạ này được cho là phần đóng góp của trường chân không.

3.4 Thí nghiệm Stern-Gerlach



Ở phần trước, ta đã thấy các electron ở cùng một phân lớp (ví dụ như 3p) có mức năng lượng khác nhau, sinh ra hiệu ứng Zeeman.

Tuy nhiên vào năm 1921, thí nghiệm Stern-Gerlach ra đời, cho ta biết một điều khác nữa. Họ dùng các electron từ các nguyên tử bạc, ở phân lớp 5s, tức chúng có cùng bộ ba số lượng tử. Theo bức tranh cổ điển, chúng phải có cách hành xử giống hệt nhau khi đi qua từ trường.

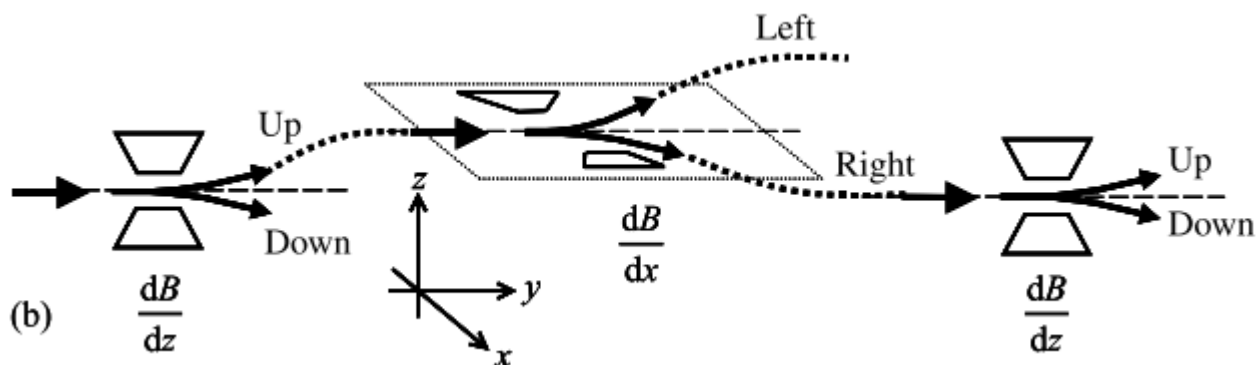
Tuy nhiên, khi cho chùm electron đó đi qua từ trường, chúng là bị tách thành hai vạch! Hai vạch là một hiện tượng đáng kinh ngạc, vì con số hai không trùng khớp với bức tranh nào đã có ở thời điểm đó.

Mãi sau này, chúng ta mới biết đến cách giải thích hợp lý, là sự ra đời của lý thuyết về spin.

Hàm sóng sau khi đi qua từ trường:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{up}(r)|\uparrow\rangle + \psi_{down}(r)|\downarrow\rangle) \quad (56)$$

Khác với sự tán xạ ánh sáng, chùm hạt spin up qua nam châm thứ nhất đặt theo phương z, nếu đi qua nam châm thứ hai đặt theo phương vuông góc với phương ban đầu (ví dụ như phương x so với z), vẫn bị tách thành hai, rồi giả như một trong hai chùm đó lại đi qua nam châm thứ ba theo phương z, vẫn bị tiếp tục tách thành hai như thường.



Trong quang lượng tử, ta cũng thấy xuất hiện hiện tượng tương tự, nhưng không phải do spin, mà được quy gán cho sự Phân cực photon.

Bảng 6: Equivalence between the spin states of particles with $S = 1/2$ and photon polarization states. In the case of photons, the double-ended arrows represent the direction of the linear polarization.

	Spin state	Photon polarization
Deflection apparatus	Stern–Gerlach magnet	Polarizing beam splitter
Eigenstate basis 1	$ \uparrow\rangle, \downarrow\rangle$	$ \uparrow\rangle, \leftrightarrow\rangle$
Eigenstate basis 2	$ \leftarrow\rangle, \rightarrow\rangle$	$ \nearrow\rangle, \searrow\rangle$