CHƯƠNG 8: CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

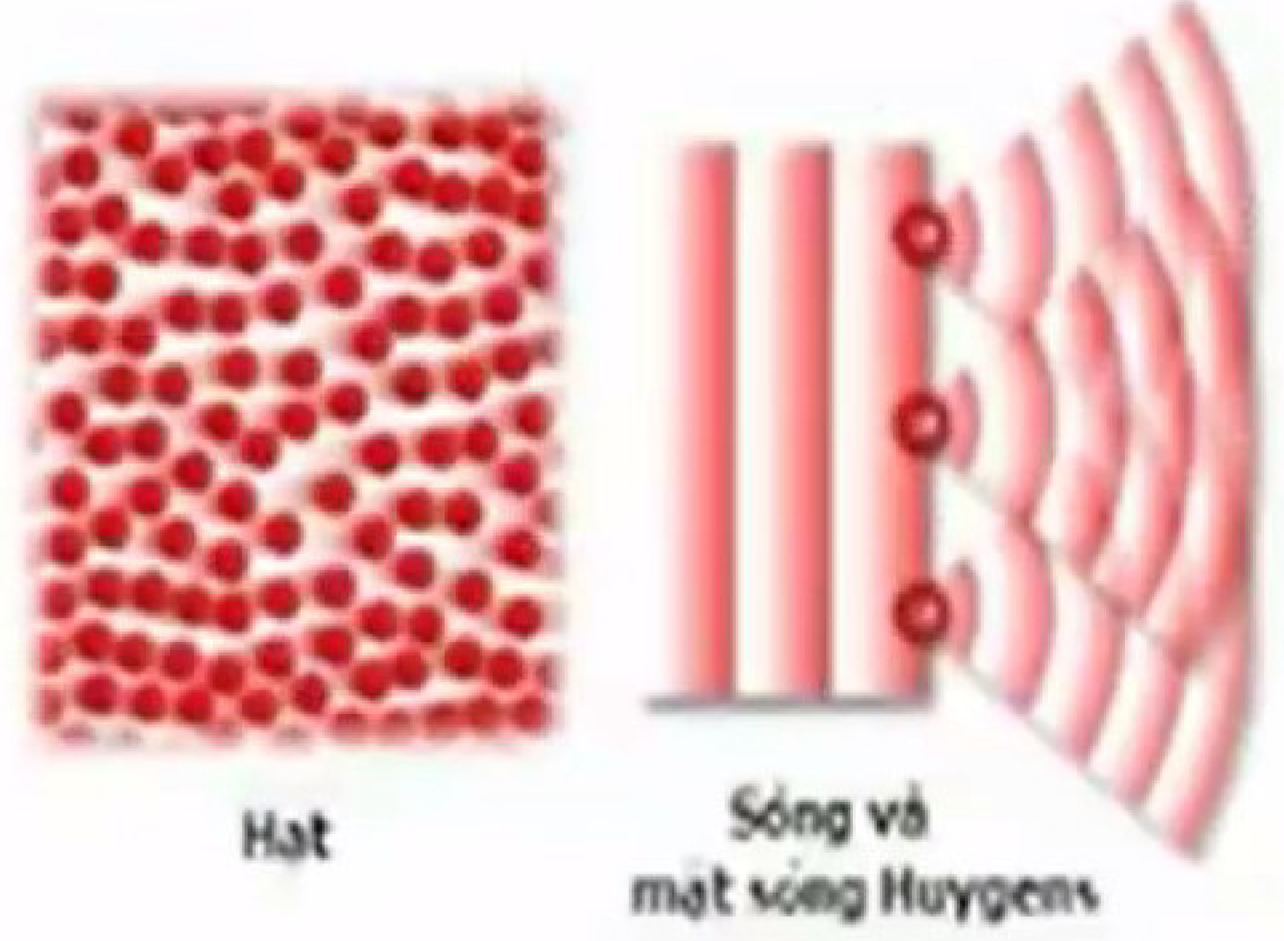
1. Lưỡng tính sóng-hạt của các hạt nguyên tố.
2. Hệ thức bất định Heisenberg
3. Hàm sóng và ý nghĩa thống kê
4. Phương trình Schrödinger và ứng dụng

1. Lưỡng tính sóng-hạt của các vi hạt.

1.1. Lưỡng tính sóng hạt của ánh sáng

+ Tính chất sóng thể hiện rõ trong các hiện tượng như giao thoa, nhiễu xạ...

+ Tính chất hạt thể hiện rõ trong các hiện tượng quang điện, hiệu ứng Compton...

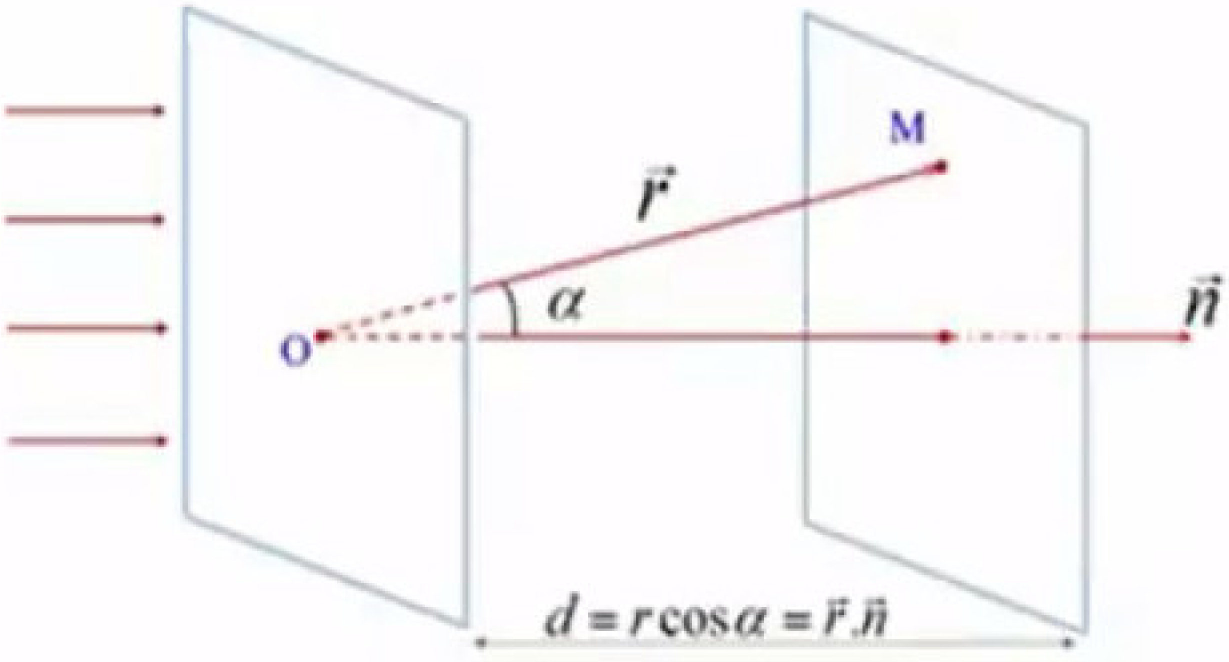


Tính chất hạt *(E,p)* và tính chất sóng (ν, λ) liên hệ trực tiếp với nhau qua

$$E = h\nu; \quad p = \frac{h}{\lambda}$$

1. Lưỡng tính sóng-hạt của các vi hạt.

Xét chùm ánh sáng đơn sắc, song song.



Dao động sáng tại O: $x_O = x(t) = A\cos 2\pi\nu t$

⇨ Dao động tại M:

$$x_M = x(t-\frac{d}{c}) = A\cos 2\pi\nu(t-\frac{d}{c}) = A\cos 2\pi(\nu t-\frac{d}{\lambda}) = A\cos(2\pi\nu-\frac{2\pi d}{\lambda})$$

$$d = r\cos\alpha = \vec{r}.\vec{n} \quad \Rightarrow \quad x_M = x(t-\frac{d}{c}) = A\cos 2\pi(\nu t-\frac{\vec{r}.\vec{n}}{\lambda})$$

biểu diễn dạng hàm phức:

$$\Rightarrow \quad \psi = Ae^{-2\pi i\left(\nu t-\frac{\vec{r}.\vec{n}}{\lambda}\right)}$$

thay $\nu = \dfrac{E}{h}$ $\quad p = \dfrac{h}{\lambda}$ $\quad \hbar = \dfrac{h}{2\pi}$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\psi = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\vec{r})}}$$

1. Lưỡng tính sóng-hạt của các vi hạt.

1.2. Giả thuyết de Broglie (1923).

+ Một vi hạt tự do có năng lượng, động lượng xác định tương ứng với một sóng phẳng đơn sắc xác định.

+ Năng lượng của vi hạt liên hệ với tần số dao động của sóng tương ứng thông qua hệ thức: $E = h\nu$ ***hay*** $E = \hbar\omega$

+ Động lượng của vi hạt liên hệ với bước sóng của sóng tương ứng theo hệ thức $p = \frac{h}{\lambda}$ ***hay*** $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ $\hbar = \frac{h}{2\pi}; \text{và} \left|\vec{k}\right| = \frac{2\pi}{\lambda}$

⇨ **Sóng de Broglie là sóng vật chất, sóng của các vi hạt.**

Hàm sóng De Broglie của vi hạt tự do:

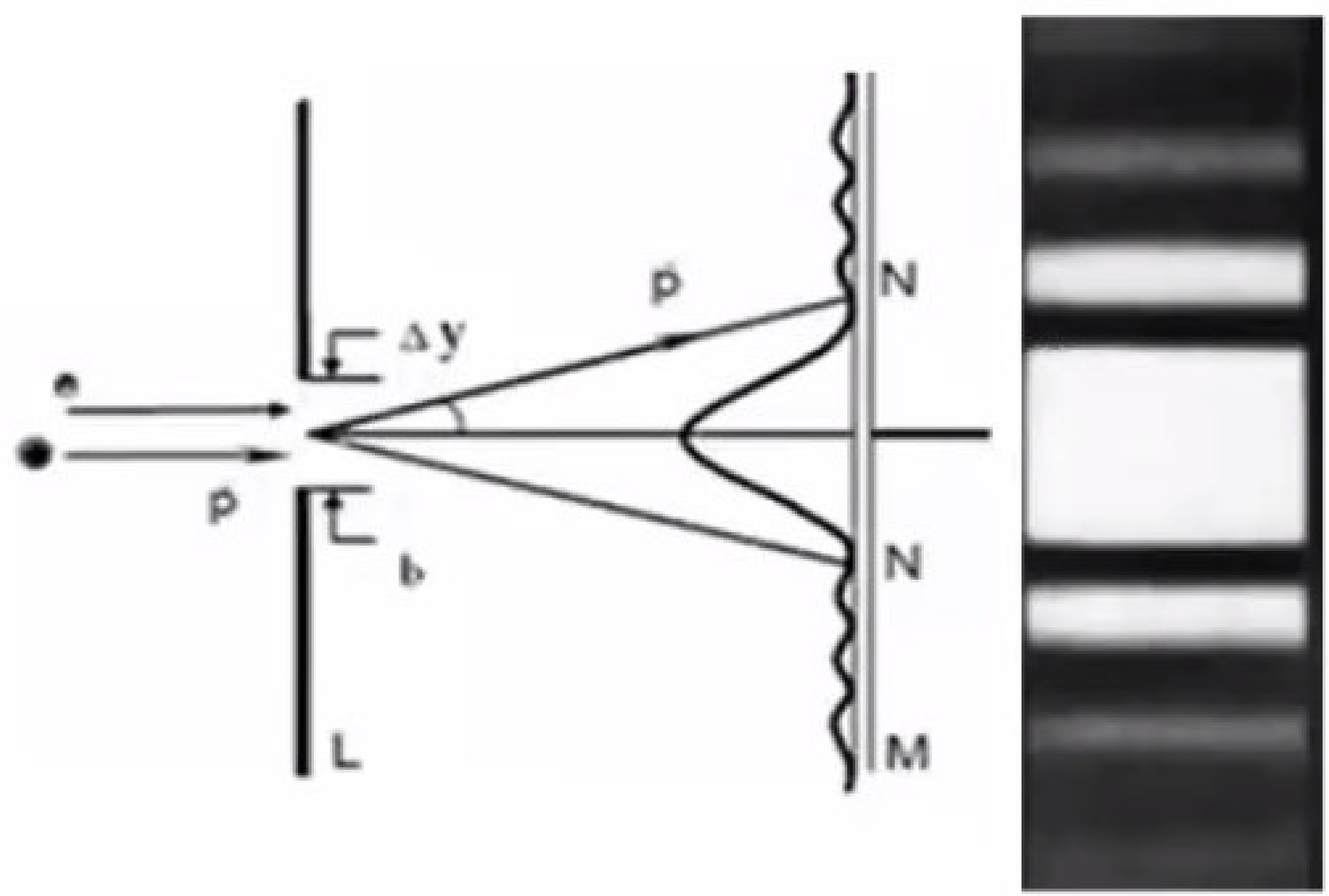
$$\boxed{\psi = \psi_o e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})}}$$

1. Lưỡng tính sóng-hạt của các vi hạt.

1.3. Thực nghiệm xác nhận lưỡng tính sóng - hạt của vi hạt

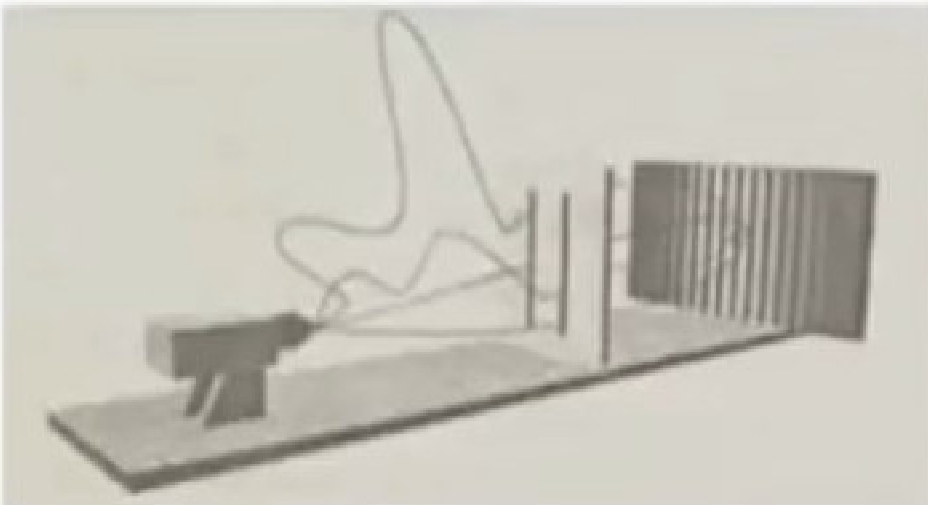
a. Nhiễu xạ của electron qua khe hẹp :

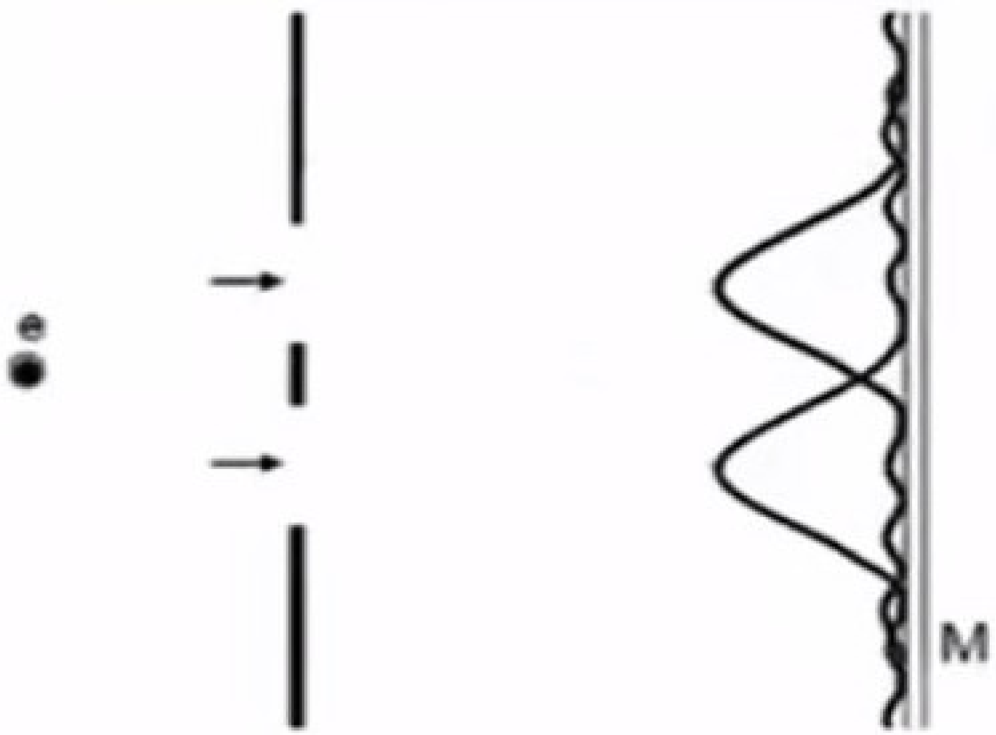
Cho chùm electrron đi qua khe, thu được hình ảnh nh màn huỳnh quang giống như hình ảnh nhiễu xạ của ánh sán

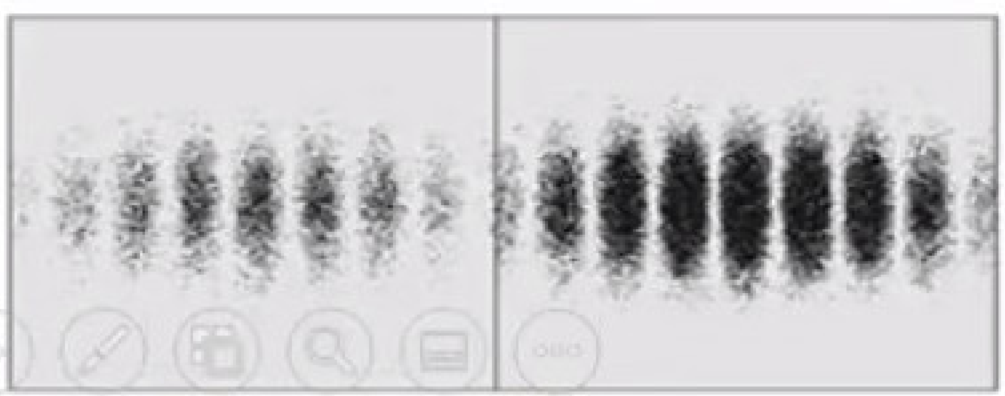


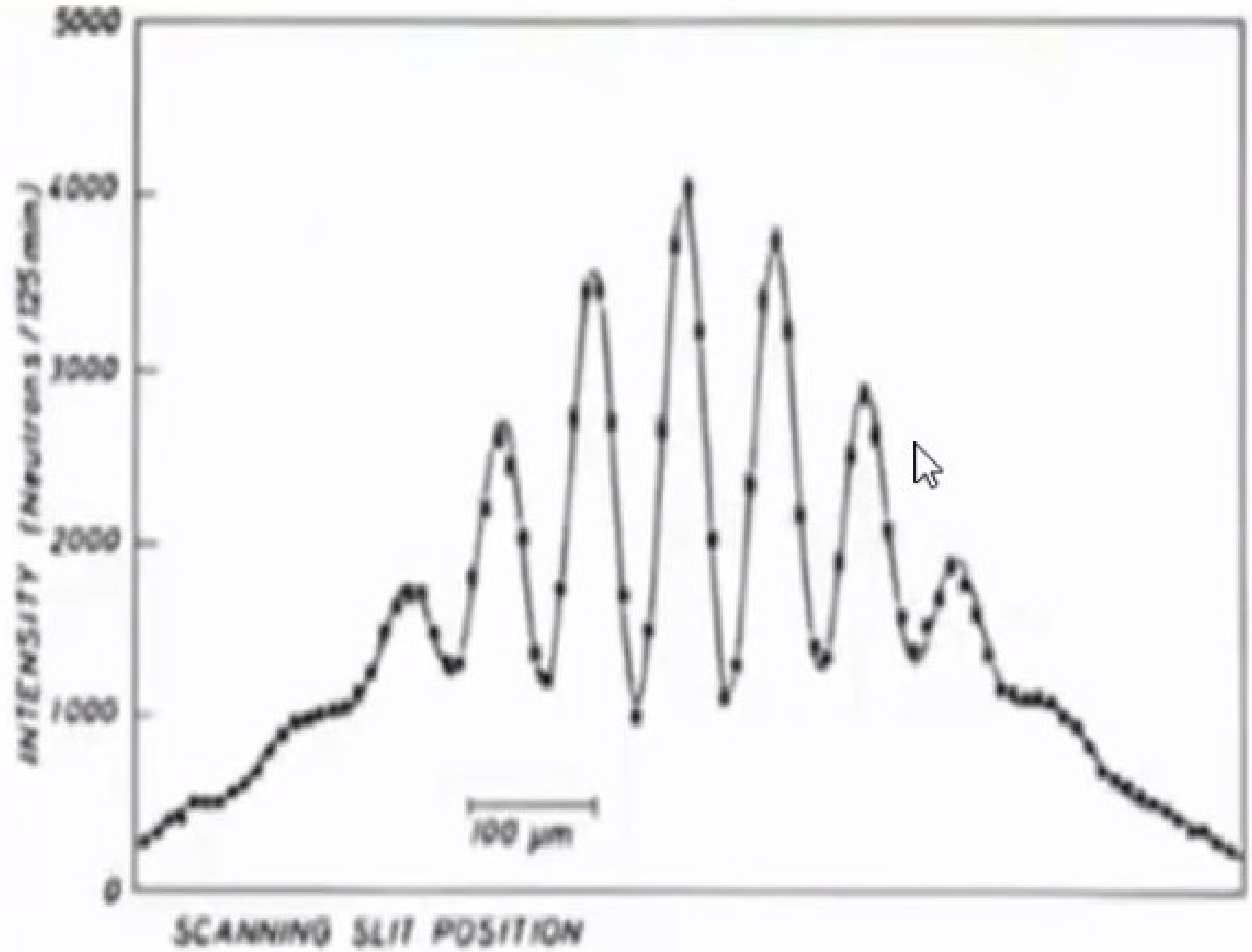
1. Lưỡng tính sóng-hạt của các vi hạt.

Sau đó mở đồng thời cả 2 khe hẹp :









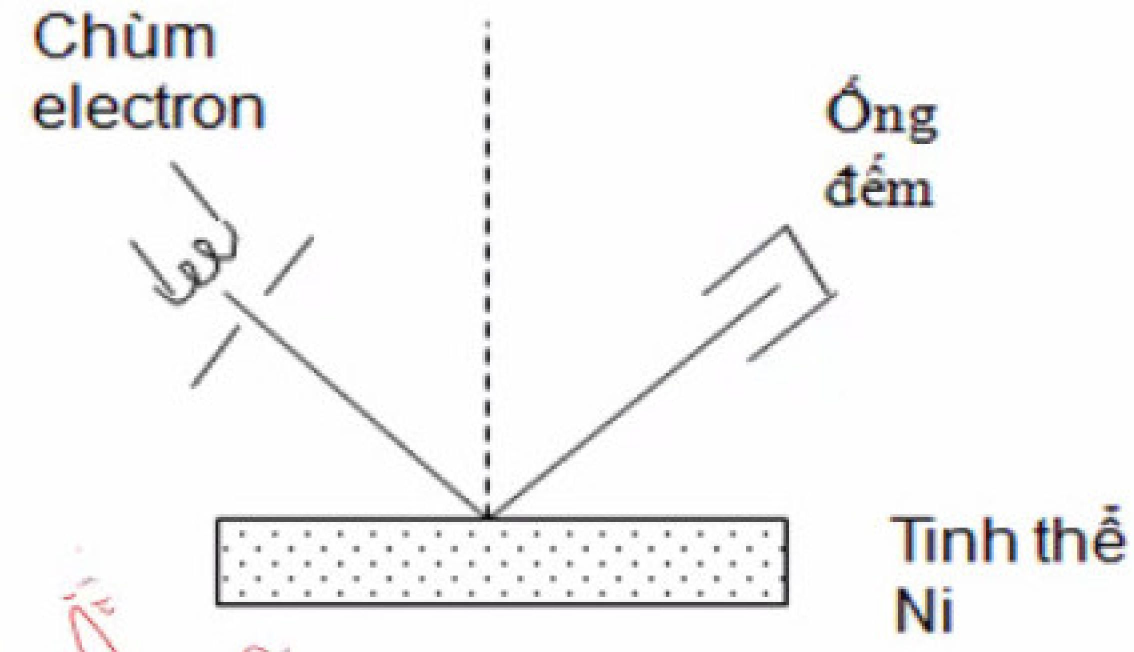
Nhiễu xạ neutron trên hai khe: *đo cường độ chùm hạt ở sau hai khe, người ta thu được sự phân bố cường độ theo vị trí như trong hiện tượng nhiễu xạ. (A. Zeilinger,R. Gähler, C.G. Shull, W. Treimer,and W. Mampe, Reviews of ModernPhysics, Vol. 60, 1988.)*

1. Lưỡng tính sóng-hạt của các vi hạt.

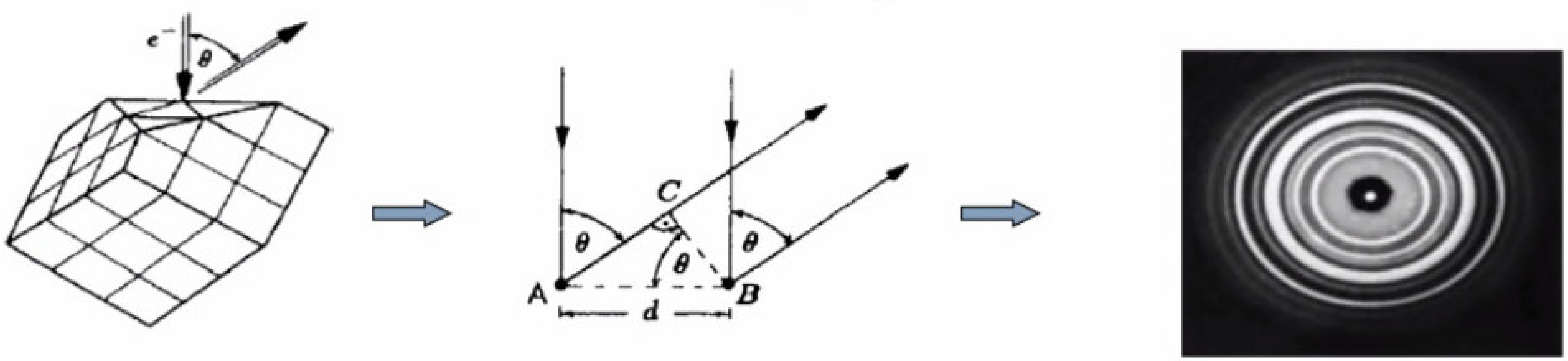
b. Nhiễu xạ của chùm hạt electron trên tinh thể

(Davisson – Germer 1927)

Cho một chùm điện tử đập thẳng góc vào mặt tinh thể Ni, chùm e- sẽ tán xạ trên mặt tinh thể Ni dưới các góc khác nhau. Trên màn hình ta thu được các vân nhiễu xạ.

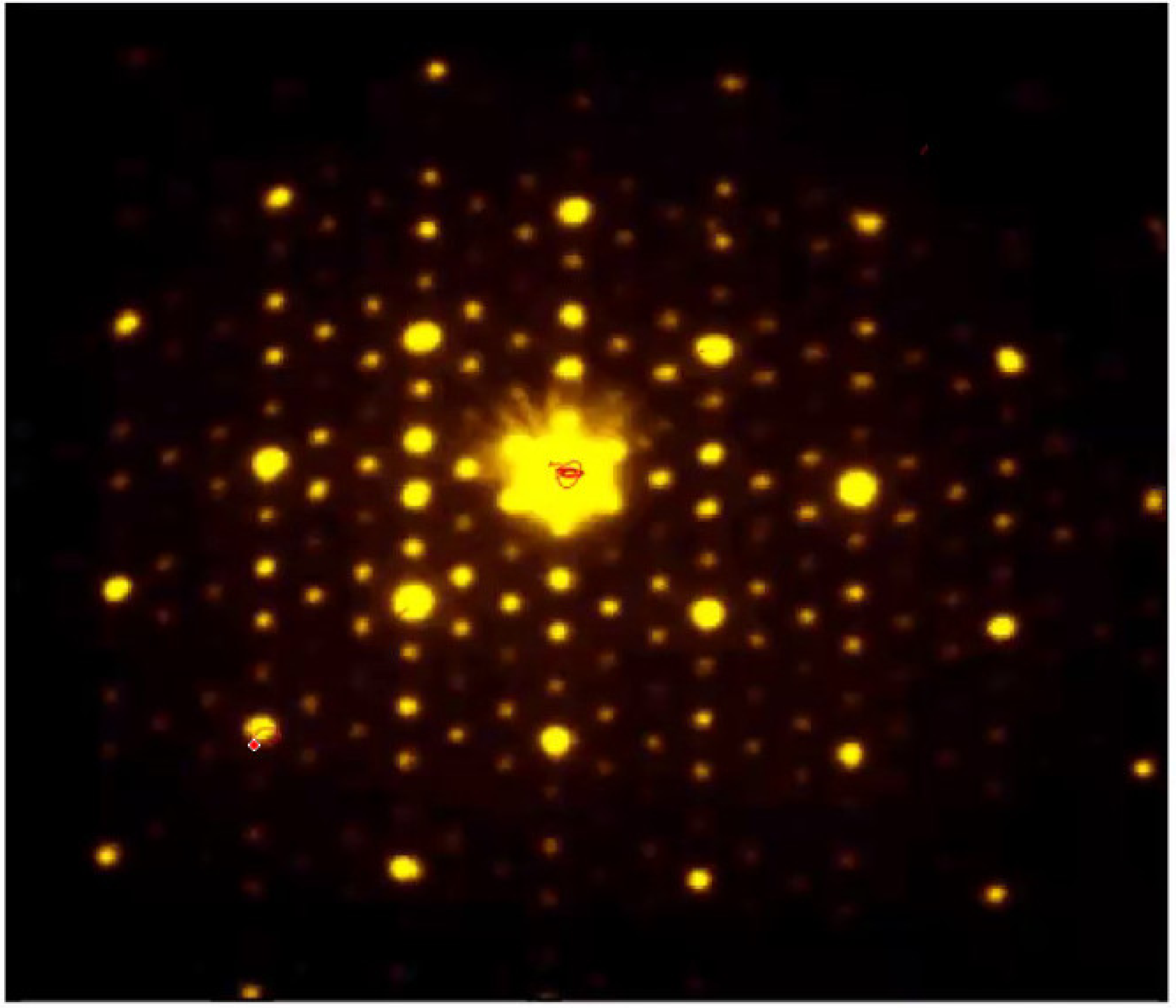


Tinh thể Ni như một cách tử nhiễu xạ. Do điện tử có tính chất sóng nên chúng bị nhiễu xạ trên cách tử.



1. Lưỡng tính sóng-hạt của các vi hạt.

Nhiễu xạ chùm netron lên mạng tinh thể (Nacl)



2. Hệ thức bất định Heisenberg

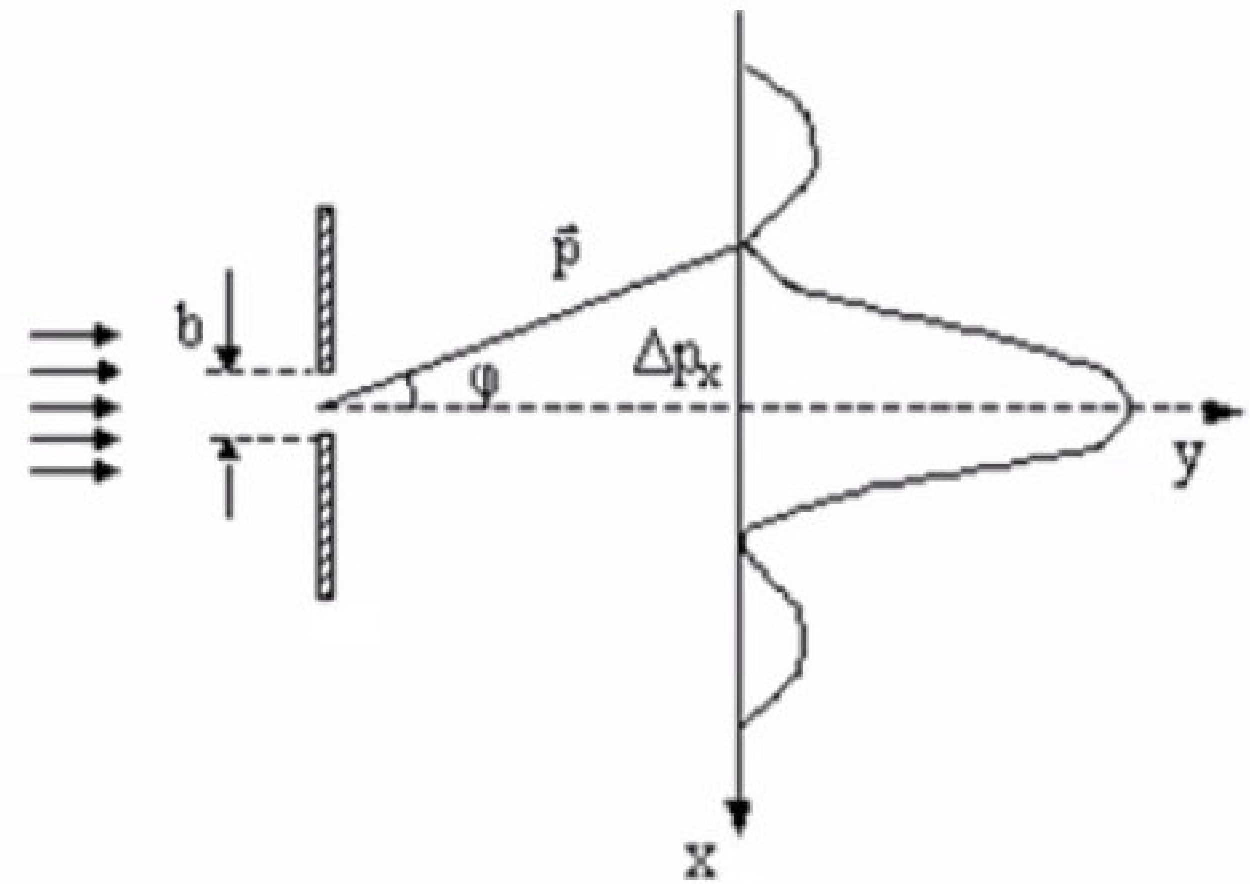
*** Hệ thức bất định Heisenberg**

Chùm vi hạt qua khe hẹp độ rộng b. ➡ chùm hạt bị nhiễu xạ.

Xét theo phương x.

Độ bất định về tọa độ của vi hạt: $\Delta x \approx b$

Hình chiếu $\vec{p}$ của vi hạt theo trục x:



$$0 \le p_x \le p\sin\varphi$$

Độ bất định : $$\Delta p_x \approx p\sin\varphi$$

Xét trường hợp các hạt rơi vào cực đại giữa: $\Delta p_x \approx p\sin\varphi_1$

Cực tiểu nhiễu xạ $\sin\varphi_1 = \dfrac{\lambda}{b},\ p = \dfrac{h}{\lambda}$ ➡ $\boxed{\Delta x.\Delta p_x \approx b.p\sin\varphi_1 = p.\lambda \approx h}$

Lập luận tương tự với các phương y, z ta có: $\boxed{\Delta y.\Delta p_y \approx h\ ;\ \ \Delta z.\Delta p_z \approx h}$

2. Hệ thức bất định Heisenberg

Hệ thức bất định *Heisenberg* : $\boxed{\Delta x.\Delta p_x \approx h\ ;\quad \Delta y.\Delta p_y \approx h\ ;\ \Delta z.\Delta p_z \approx h}$

$$\boxed{\Delta x.\Delta p_x \geq \hbar;\quad \Delta y.\Delta p_y \geq \hbar;\quad \Delta z.\Delta p_z \geq \hbar}$$

➡ ***Ý nghĩa*: Vị trí và động lượng của hạt nguyên tố không được xác định chính xác một cách đồng thời. Vị trí càng xác định thì động lượng càng bất định và ngược lại.**

➡ **Quy luật vận động của vi hạt theo quy luật thống kê.**

**** Hệ thức bất định giữa năng lượng và thời gian :*** $\boxed{\Delta E.\Delta t \approx h}$ $\quad \Delta E.\Delta t \geq \hbar;$

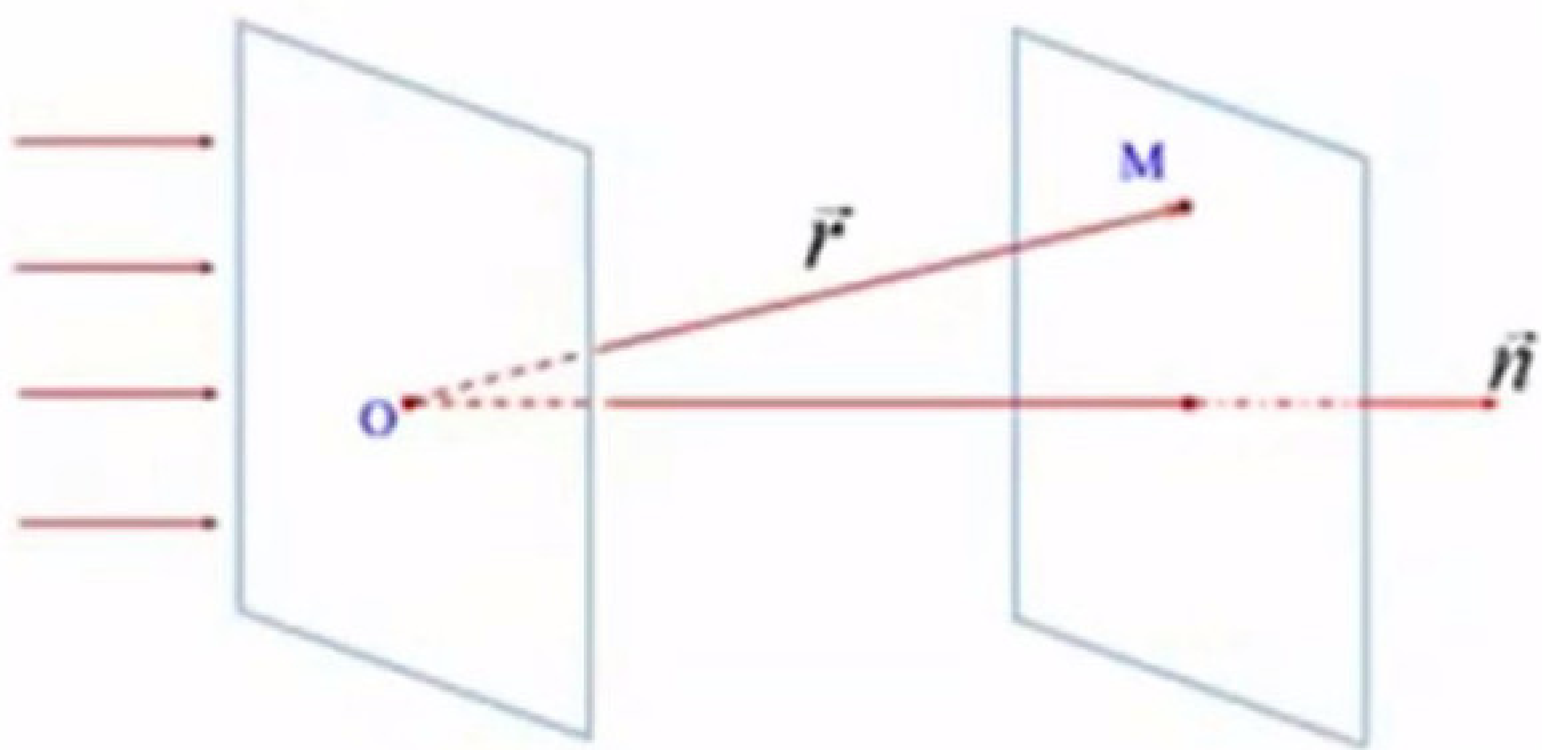
➡ ***Ý nghĩa* : nếu năng lượng của hệ ở một trạng thái nào đó càng bất định thì thời gian để hệ tồn tại ở trạng thái đó càng ngắn và ngược lại.**

3. Hàm sóng và ý nghĩa thống kê

3.1. Hàm sóng:

+ Trạng thái của một hệ được mô tả một cách đầy đủ bởi một hàm số gọi là hàm sóng (hay hàm trạng thái) của hệ.

+ trạng thái của hệ như: vị trí, vận tốc, xung lượng, mô men xung lượng, năng lượng, ...



$$\psi(\vec{r},t)=\psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}.\vec{r})}$$

3. Hàm sóng và ý nghĩa thống kê

Theo giả thuyết Đơbrơi: chuyển động của vi hạt tự do được mô tả bởi hàm sóng tương tự như sóng ánh sáng phẳng đơn sắc:

$$\psi = \psi_o e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})} = \psi_o e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}$$

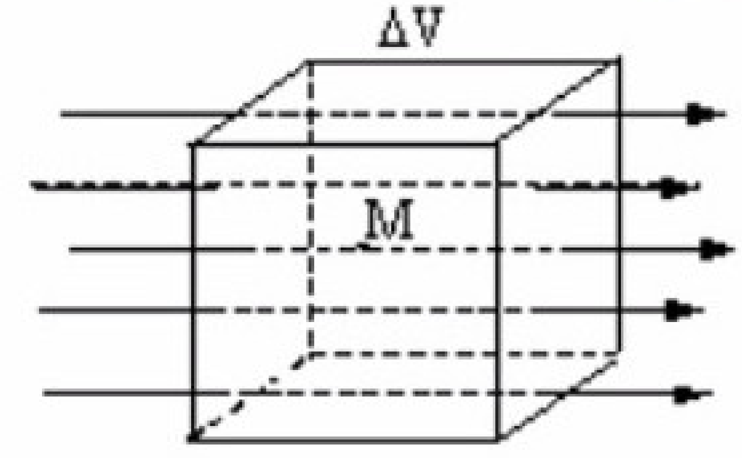
Trong đó: ψ_o **biên độ;** $\psi_o^2 = |\psi|^2 = \psi\psi^*$

ψ^* **là liên hợp phức của** ψ $E = \hbar\omega; \vec{p} = \hbar\vec{k}$

Nếu hạt vi mô chuyển động trong trường thế, thì hàm sóng của nó là một hàm phức tạp của toạ độ và thời gian: $\psi(\vec{r}, t) = \psi(x, y, z, t)$

3. Hàm sóng và ý nghĩa thống kê

3.2. Ý nghĩa thống kê của hàm sóng



Xét chùm hạt phôtôn truyền trong không gian.

***Theo quan điểm sóng**: $I_M \sim \psi_o^2$ $= |\psi|^2$

***Theo quan điểm hạt**: $I_M \sim$ **năng lượng các hạt trong đơn vị thể tích bao quanh M,** $\Leftrightarrow I_M \sim N_{hạt}$ **trong đơn vị thể tích đó.**

➡ **$N_{hạt}$ trong đơn vị thể tích** $\sim \psi_o^2$

$N_{hạt}$ **trong đơn vị thể tích càng lớn ➡ khả năng tìm thấy hạt càng lớn.**

➡ $|\psi|^2$ **đặc trưng cho khả năng tìm thấy hạt trong đơn vị thể tích quanh M**

➡ $|\psi|^2$ **là mật độ xác suất**

Xác suất tìm thấy hạt trong thể tích V: $\int_V |\psi|^2 dV = 1$

➡ **ĐK chuẩn hoá.**

3. Hàm sóng và ý nghĩa thống kê

Ý nghĩa

Gọi $\psi(x,y,z)$ là hàm sóng vật chất tại vị trí (x,y,z) của một hạt vi mô, và dV là một thể tích nhỏ bao quanh vị trí này, ta có:

Đại lượng $\left|\psi(x,y,z)\right|^2$ là **mật độ xác suất** tìm thấy hạt

+ Xác suất tìm thấy hạt trong thể tích dV là: $\left|\psi(x,y,z)\right|^2 dV$

+ Xác suất tìm thấy hạt trong toàn bộ không gian :

$$\int_{\infty}\left|\psi(x,y,z)\right|^2 dV = 1$$

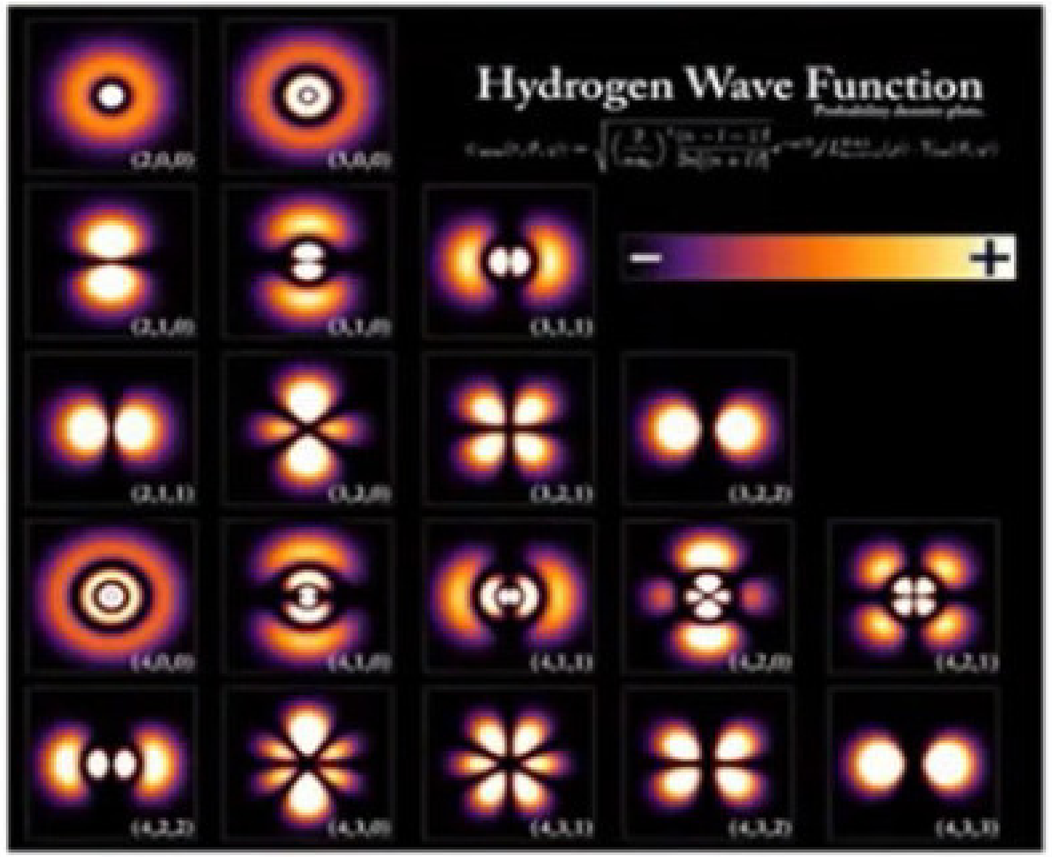
(điều kiện chuẩn hóa)

3. Hàm sóng và ý nghĩa thống kê

Tóm lại:

Để mô tả trạng thái của vi hạt người ta dùng hàm sóng ψ.

- ψ **không mô tả một sóng thực trong không gian.**
- ψ **mang tính chất thống kê, nó liên quan đến xác suất tìm hạt.**
- $|\psi|^2$ **biểu diễn mật độ xác suất tìm thấy hạt ở trạng thái đó.**



Mật độ xác suất của một e của nguyên tử H

3. Hàm sóng và ý nghĩa thống kê

3.3. Điều kiện của hàm sóng

- Hàm sóng phải hữu hạn
- Hàm sóng phải đơn trị
- Hàm sóng phải liên tục
- Đạo hàm bậc nhất của hàm phải liên tục

4. Phương trình Schrödinger và ứng dụng

Vào năm 1935, Erwin Schrödinger-người đoạt giải Nobel người Áo đã mô tả một thí nghiệm tưởng tượng với một con mèo trong một cái hộp để minh họa cho những hệ quả vô lí của sự hoán chuyển giữa thế giới vi mô của vật lí lượng tử và thế giới vĩ mô hằng ngày của chúng ta.

4.1. Phương trình Schrödinger

Hàm sóng De-Broglie mô tả chuyển động của vi hạt tự do :

$$\psi(\vec{r},t)=\psi_o\, e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\vec{r})}=\psi(\vec{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$\psi(\vec{r})=\psi_o\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}=\psi_o\, e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x+p_y y+p_z z)} \rightarrow \frac{\partial\psi}{\partial x}=\left(\frac{i}{\hbar}p_x\right)\psi \rightarrow \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=\frac{i^2}{\hbar^2}p_x^2\psi=-\frac{p_x^2}{\hbar^2}\psi$$

Tương tự cho biến y **,** z

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}=-\frac{p_y^2}{\hbar^2}\psi$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}=-\frac{p_z^2}{\hbar^2}\psi$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi=-\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{\hbar^2}\psi$$

$$\Rightarrow \Delta\psi=-\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{\hbar^2}\psi$$

Trong đó $\Delta\psi=\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi$ *gọi là Toán tử Laplace*

$$\Rightarrow \Delta\psi=-\frac{p^2}{\hbar^2}\psi$$

động năng của hạt: $E_d=\frac{mv^2}{2}=\frac{p^2}{2m}$

$$\rightarrow p^2=2mE_d$$

$$\Rightarrow \Delta\psi(\vec{r})+\frac{2m}{\hbar^2}E_d\psi(\vec{r})=0$$

4.1. Phương trình Schrödinger

➡ **Phương trình Schrödinger cho hạt nguyên tố tự do ở trạng thái dừng:**

$$\Delta \psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} E_d \psi(\vec{r}) = 0$$

Nếu hạt trong trường lực có thế năng $U \notin (t)$: $E_d = E - U$

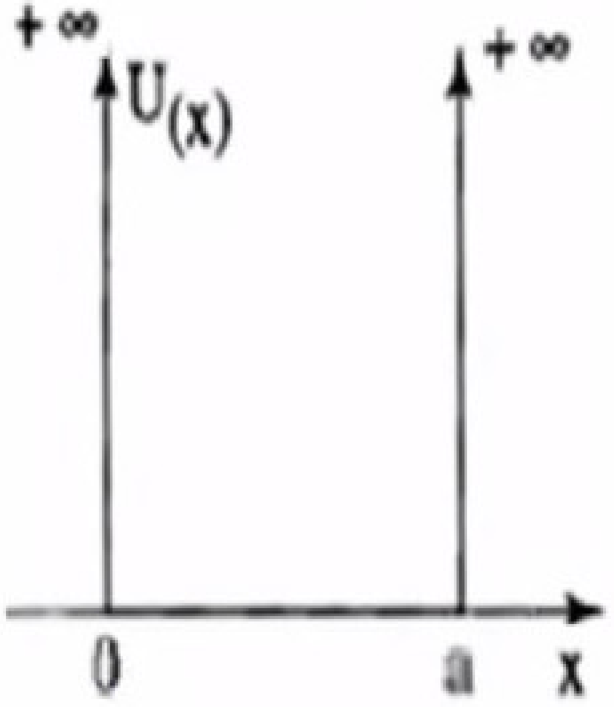
➡ **Phương trình Schrödinger tổng quát cho hạt nguyên tố ở trạng thái dừng:**

$$\Delta \psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - U(\vec{r})\right] \psi(\vec{r}) = 0$$

➡ **Ý nghĩa: Nếu biết được dạng cụ thể của thế năng** U **thì biết được trạng thái** ψ **và năng lượng** E **của hạt nguyên tố.**

4.2. Ứng dụng Phương trình Schrödinger

a. Hạt trong giếng thế một chiều sâu vô hạn



Phương trình Schrodinger của hạt trong giếng $(0<x<a)$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \Rightarrow \psi''_{(x)} + k^2\psi_{(x)} = 0$$ **với:** $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$$\Rightarrow \psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$$

Hạt chỉ ở trong giếng thế

$$U = \begin{cases} 0 & khi\ 0<x<a \\ \infty & khi\ x\le 0\ ,\ x\ge a \end{cases}$$

⇒ **xác suất tìm hạt tại $x = 0$ và $x = a$ bằng 0**

$$\Rightarrow \psi(0) = 0, \quad \psi(a) = 0$$

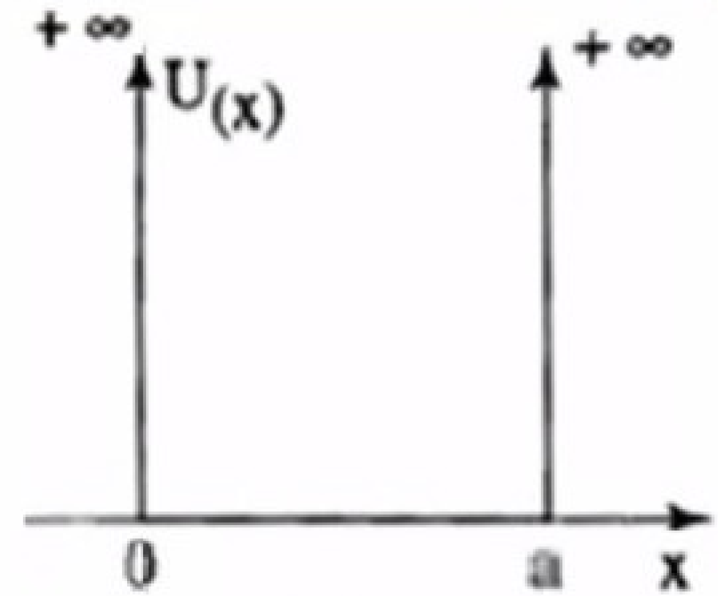
ĐK liên tục: ⇒ $\psi(0) = A\sin(0) + B = 0$ ⇒ $B = 0$

$\psi(a) = A\sin(ka) = 0$ ⇒ $\sin ka = 0 = \sin n\pi$ ⇒ $k = \frac{n\pi}{a}$

⇒ **Hàm sóng có dạng:** $\psi_n(x) = A\sin\frac{n\pi}{a}x \qquad n=1,2,3,\ldots$

4.2. Ứng dụng Phương trình Schrödinger

Từ điều kiện chuẩn hóa ⇨ $\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1$



$$U = \begin{cases} 0 & khi\ \ 0<x<a \\ \infty & khi\ \ x\le 0\ \ ,\ \ x\ge a \end{cases}$$

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

$$\Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad \Rightarrow \boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x} \quad n=1,2,3,\ldots$$

- Năng lượng của hạt trong giếng thế: $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{n\pi}{a} \Rightarrow \boxed{E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2}$

- Mật độ xác suất tìm thấy hạt trong giếng thế: $\boxed{|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi}{a}x}$

4.2. Ứng dụng Phương trình Schrödinger

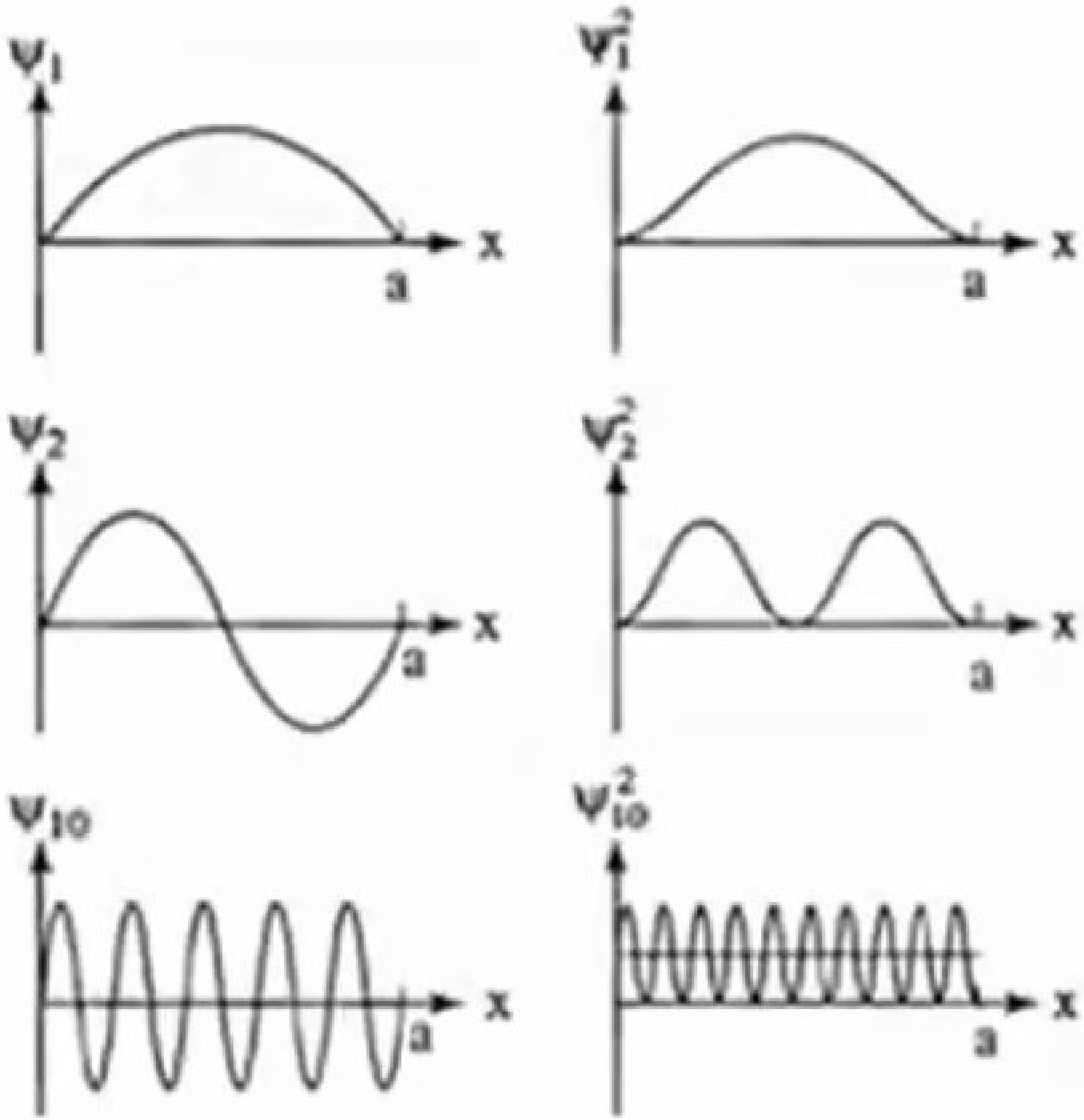
Nhận xét:

- Mỗi trạng thái có một hàm sóng: $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x$ ***n=1,2,3,…***

- Năng lượng của hạt biến thiên gián đoạn: $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$

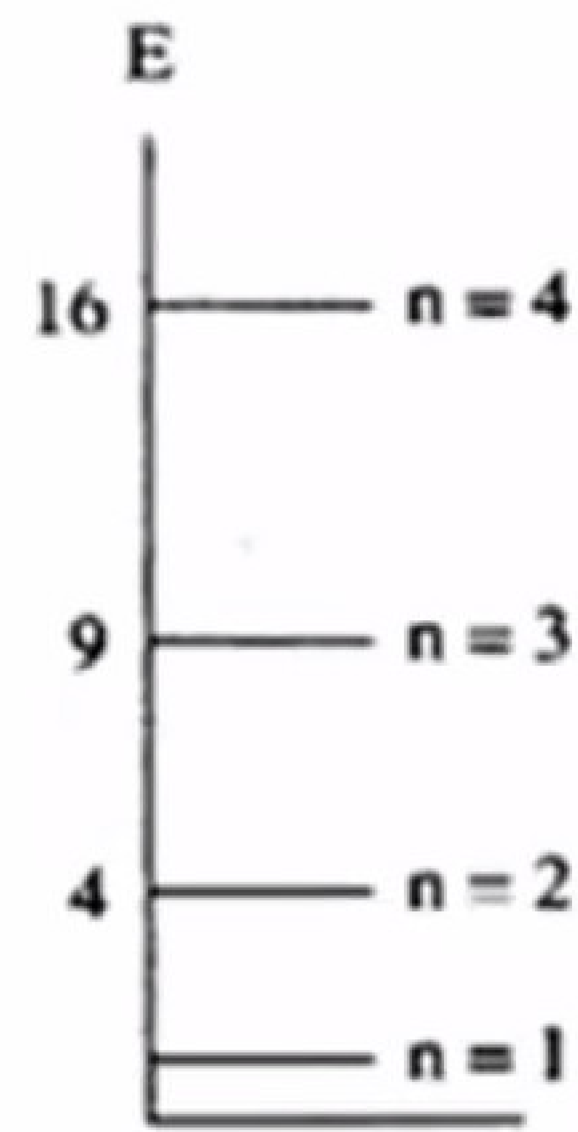
- Khoảng cách giữa hai mức năng lượng kế tiếp nhau:

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}(2n+1)$$



- Mật độ xác suất tìm thấy hạt trong giếng thế:

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{n\pi}{a} x$$



4.2. Ứng dụng Phương trình Schrödinger

c. Dao tử điều hòa lượng tử (một chiều)

Xét vi hạt dao động trong trường thế năng : $U = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$

Pt Schrödinger: $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\psi = 0$

Năng lượng của dao tử điều hòa: $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ với $n=0,1,2...$

Năng lượng của dao tử đã bị lượng tử hóa.

Năng lượng thấp nhất của dao tử điều hòa : $E_o = \frac{\hbar\omega}{2}$

được gọi là năng lượng "***không***". E_0 liên quan đến dao động "***không***" của dao tử, nghĩa là khi $T=0K$, dao tử vẫn dao động.

lý thuyết

1- Giả thuyết de Broglie về lưỡng tính sóng - hạt của vi hạt, viết hàm sóng de Broglie cho vi hạt tự do và nêu ý nghĩa của các đại lượng có trong biểu thức đó.

2- Hệ thức bất định Heisenberg cho vị trí và động lượng, nêu ý nghĩa của hệ thức.

3- Hệ thức bất định cho năng lượng và nêu ý nghĩa của hệ thức.

4- Tại sao trong cơ học lượng tử khái niệm quĩ đạo của vi hạt không còn có ý nghĩa? Khái niệm quĩ đạo của vi hạt được thay thế bằng khái niệm gì ?

5- Thiết lập phương trình Schrodinger cho vi hạt tự do và cho vi hạt chuyển động trong trường thế. Nêu ý nghĩa các đại lượng có trong phương trình.

Bài tập

Tìm bước sóng de Broglie của

a. Electron có vận tốc 10^8 cm/s

b. Một quả cầu có khối lượng m = 1g và vận tốc 1 cm/s.

c. Electrôn có động năng 150eV.

$\lambda = ...(m)$

$v \ll c \rightarrow$ CHCĐ.

$\rightarrow$ CHCĐ

CHCĐ

CHTĐ

Từ gt Đe $\rightarrow p = \frac{h}{\lambda} \rightarrow \lambda = \frac{h}{p} \rightarrow p$?

a/ $p = m.v$; $\rightarrow m = m_e = 9,1.10^{-31}$ kg.

b) $p = m.v$, $m = 1g \rightarrow \dots$ $v = \dots$

c). $E_đ = 150$ eV, $E_0 = m_0c^2 = 0,51.10^6$ eV $= 510.10^3$ eV.

$\rightarrow E_đ \ll E_0 \rightarrow$ CHCĐ $\rightarrow p = mv$, $E_đ = \frac{1}{2}mv^2$

$E_đ = \frac{p^2}{2m} \rightarrow p = \sqrt{2mE_đ}$

$m = m_0$ CHCĐ

$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$

Bài tập

Hạt electron có vận tốc ban đầu bằng không được gia tốc bởi một hiệu điện thế U= 510 kV. Tìm bước sóng de Broglie của hạt sau khi được gia tốc.

Công của lực điện trường bằng A = eU = Ed. ; U = 510 kV

→ Động năng mà e- thu được từ năng lượng điện trường eU = 0,51 MeV = E_{0e}

→ phải áp dụng cơ học tương đối

$$E_d = m_o c^2\left[\frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}} - 1\right] = eU \qquad \sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} = \frac{m_o c^2}{eU + m_o c^2} \qquad \mathrm{v} = \frac{c\sqrt{eU(eU+2m_o c^2)}}{eU + m_o c^2}$$

$$p = \frac{m_o \mathrm{v}}{\sqrt{1-\mathrm{v}^2/c^2}} = \frac{\sqrt{eU(eU+2m_o c^2)}}{c} \qquad \rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{\sqrt{eU(eU+2m_o c^2)}} = 0{,}014(\mathring{A})$$

Bài tập

Hạt electron nằm trong giếng thế sâu vô cùng, có bề rộng là a. Tìm hiệu nhỏ nhất giữa hai mức năng lượng kề sát nhau ra đơn vị eV trong hai trường hợp a=20cm, a=20Å. Có nhận xét gì về kết quả thu được?

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$$

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}(2n+1)$$

Thay số với n=1 $\rightarrow$ a = 20 cm, ΔE = 4,5.10^{-36} J

a = 20Å , ΔE = 4,5.10^{-20} J

Bài tập

Hạt α chuyển động trong một từ trường đều theo một quĩ đạo tròn có bán kính r = 0,83 cm. Cảm ứng từ B = 0,025T. Tìm bước sóng de Broglie của hạt đó. Cho biết điện tích của hạt α là q=2e.

---

gần 2

$\vec{v} \perp \vec{B}$ → Lực Loren giữ vai trò lực hướng tâm $\rightarrow F_L = qvB = \dfrac{mv^2}{r}$

→ v = rqB/m (q = 2e).

$$\rightarrow \lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{rqB} = \frac{h}{2erB} = 10^{-11} m$$

Bài tập

Dùng hệ thức bất định Heisenberg hãy đánh giá động năng nhỏ nhất E_{min} của electron chuyển động trong miền có kích thước l cỡ 0,1 nm.

$$\Delta x \Delta p \approx \hbar \quad \rightarrow p_{min} = \Delta p \approx \frac{\hbar}{\Delta x} \approx \frac{2\hbar}{l} = \frac{2\hbar}{l} \quad E_d = \frac{p_{min}^2}{2m} = \frac{2h^2}{ml^2} = 15eV$$

$\rightarrow$