## BÀI GIẢNG VÀ BÀI TẬP CHƯƠNG CƠ LƯỢNG TỬ

**Tóm tắt lý thuyết**

**- Hàm sóng phẳng đơn sắc của ánh sáng**

Theo thuyết photon ánh sáng của Einstein, ánh sáng có cấu tạo gián đoạn, gồm những hạt chuyển động trong chân không, cũng như trong mọi môi trường với vận tốc là c ($c = 3.10^8$ m/s), mang một năng lượng và động lượng p xác định:

$$\varepsilon = h\nu = \frac{hc}{\lambda}; p = mc = \frac{\varepsilon}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

**Hàm sóng:**

$$\Psi\left(\vec{r}, t\right) = \Psi_0 \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left(\varepsilon t - \vec{p}\,\vec{r}\right)\right\}$$

Hoặc:

$$\Psi\left(\vec{r}, t\right) = \Psi_0 \exp\left\{-i\left(\omega t - \vec{k}\,\vec{r}\right)\right\}$$

Trong đó $\Psi_0$ là biên độ sóng viết thay cho a. Biểu thức trên được gọi là hàm sóng phẳng đơn sắc của ánh sáng.

**- Giả thuyết của de Broglie (1892-1987)**

"*Mọi vi hạt tự do, có năng lượng xác định, động lượng xác định đều liên hợp với 1 sóng phẳng đơn sắc*".

Hàm sóng phẳng đơn sắc của vi hạt tương tự như hàm sóng phẳng ánh sáng:

$$\Psi\left(\vec{r}, t\right) = \Psi_0 \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left(Wt - \vec{p}\,\vec{r}\right)\right\}$$

$W = h\nu$ và động lượng: $p = mv = \frac{h}{\lambda}$, trong đó v là vận tốc của hạt.

**- Ý nghĩa xác suất của sóng de Broglie**

+ sóng de Broglie không phải sóng điện từ, sóng de Broglie có bản chất đặc thù lượng tử.

+ Đại lượng $|\Psi|^2$ ***gọi là mật độ xác suất*** tìm thấy hạt (tức là xác suất tìm thấy hạt trong 1 đơn vị thể tích).

***Xác suất $P_V$*** tìm thấy hạt trong thể tích V nào đó bằng:

$$P_V = \int_V |\Psi|^2 dV$$

Vì chắc chắn tìm thấy hạt tại 1 nơi nào đó trong toàn không gian nên xác suất $P_\infty = 1$ nên miền lấy tích phân là toàn không gian.

$P_\infty = \int_\infty |\Psi|^2 dV = 1$ - ***điều kiện chuẩn hóa của hàm sóng***.

**Hệ thức bất định của Heisenberg (1901-1976)**

Hệ thức bất định đối với tọa độ và động lượng**:** $\Delta x.\Delta p_x \approx h$ hoặc có thể viết $\Delta x.\Delta p_x \approx \hbar$

**Ý nghĩa của hệ thức bất định Heisenberg**

Từ hệ thức trên, thấy rằng $\Delta x$ càng nhỏ thì $\Delta p_x$ càng lớn và ngược lại. Như vậy, vị trí x càng xác định bao nhiêu thì động lượng (và do đó là vận tốc) càng bất định. Đặc biệt nếu $\Delta x = 0$ thì $\Delta p_x = \infty$ tức là nếu vị trí xác định thì vận tốc không xác định.

Như vậy, hệ thức bất định Heisenberg cho ta biết giới hạn ứng dụng của cơ học cổ điển khi áp dụng vào thế giới vĩ mô, mà không hạn chế khả năng nhận thức của chúng ta.

**Hệ thức bất định cho năng lượng**

$\Delta W.\Delta t \approx h$ hoặc $\Delta W.\Delta t \approx \hbar$

Chúng ta thấy, nếu năng lượng của 1 hệ càng bất định, thì thời gian tồn tại của hệ trong trạng thái đó càng nhỏ, ngược lại nếu năng lượng của hệ trong một trạng thái nào đó càng xác định, thì thời gian tồn tại của hệ trong trạng thái đó càng lớn. Như vậy, trạng thái của hệ có năng lượng xác định ( $\Delta W$ nhỏ) là trạng thái bền ( $\Delta t$ lớn), còn trạng thái của hệ có năng lượng bất định là trạng thái không bền.

**Phương trình Schrodinger**

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2} W_đ \Psi = 0$$

Phương trình này gọi là ***phương trình Schrodinger cho hạt tự do***.

Mở rộng phương trình này cho trường hợp hạt không tự do, nghĩa là hạt chuyển động trong trường lực có thế năng U không phụ thuộc thời gian, ta viết được:

$W_đ = W - U$

Trong đó W là năng lượng toàn phần của hạt, từ đó, ta có phương trình:

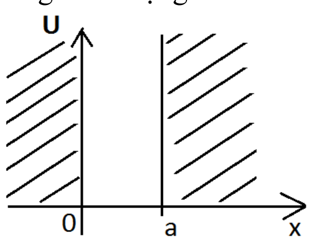
$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(W - U\right)\Psi = 0$$

Đây là phương trình Schrodinger cho hạt chuyển động trong trường lực đặc trưng bởi thế năng U. Ta giới hạn chỉ xét hệ là kín hay đặt trong ***trường ngoài không biến thiên theo thời gian t***. Năng lượng của hệ khi đó không đổi và trạng thái của hệ được gọi là **trạng thái dừng.** Phương trình trên được gọi là ***phương trình Schrodinger cho trạng thái dừng.***

**Ứng dụng của phương trình Schrodinger**

**Hạt trong giếng thế vuông góc 1 chiều có độ sâu vô cùng.**

Giếng có bề rộng là a. Giếng thế được mô tả bằng thế năng:




$$U\left(x\right) = \begin{cases} \infty \text{ khi } x \le 0,\ x \ge a \\ 0 \text{ khi } 0 < x < a \end{cases}$$

Xét phương trình Schrodinger cho hạt nằm trong giếng (U = 0) một chiều.

$\dfrac{d^2\Psi}{dx^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2} W\Psi = 0$ , đặt $k^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2} W > 0$, k là số thực.

Suy ra: $\dfrac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0$

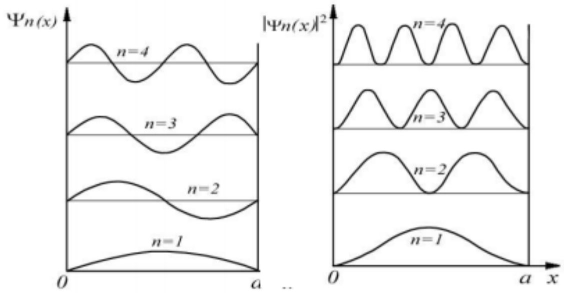
Giải phương trình trên cho ta:

$$W = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} n^2,\ \ n = 1, 2, ...$$

Như vậy ta thấy năng lượng $W_n$ chỉ lấy những giá trị gián đoạn, phụ thuộc vào $n^2$. Ta nói ***năng lượng của hạt bị lượng tử hóa. Số n được gọi là số lượng tử chính.***

Mỗi trạng thái của hạt ứng với 1 hàm sóng:

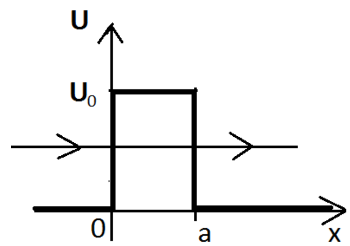
$$\Psi_n\left(x\right) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$




Từ hình trên ta thấy mật độ xác suất ở trong giếng tại các điểm khác nhau và trong những trạng thái khác nhau đều khác nhau. Trong cơ học cổ điển, xác suất tìm thấy hạt tại mọi điểm trong giếng thế đều bằng nhau nhưng trong cơ lượng tử thì hoàn toàn khác.

**Hiệu ứng đường ngầm**

***Hiện tượng:*** Hiệu ứng đường ngầm là hiện tượng 1 vi hạt vượt qua 1 rào thế năng có độ lớn $U_0$ lớn hơn năng lượng W của hạt. Rào thế năng là 1 miền không gian có thế năng lớn hơn thế năng các miền bao quanh. Xét 1 rào thế năng vuông góc:




$$U(x)=\begin{cases}0 \text{ khi } -\infty < x < 0 \text{ (I)}\\ U_0 \text{ khi } 0 \le x \le a \text{ (II)}\\ 0 \text{ khi } a < x < \infty \text{ (III)}\end{cases}$$

Gia sử hạt chuyển động theo chiều dương của trục x. Nếu năng lượng của hạt là W, động năng của hạt là $W_đ$ và thế năng là $U_0$, theo cơ học cổ điển khi $W-U_0=W_đ<0$ tức là $W<U_0$ thì hạt không thể sang miền 3 được, tuy nhiên cơ lượng tử dẫn đến các kết quả hoàn toàn khác, đó là hạt vẫn có khả năng hạt vượt qua rào sang miền 3 với 1 xác suất nào đó. Hiện tượng này được gọi là **hiệu ứng đường ngầm.**

Gọi $\Psi_1,\Psi_2,\Psi_3$ là hàm sóng của hạt lần lượt trong 3 miền. Ta viết phương trình Schrodinger cho 3 miền này:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}+k_1^2\Psi=0; k_1^2=\frac{2m}{\hbar^2}W>0$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}-k_2^2\Psi=0; k_2^2=\frac{2m}{\hbar^2}(U_0-W)>0$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}+k_1^2\Psi=0; k_1^2=\frac{2m}{\hbar^2}W>0$$

***Trong miền 1,*** có cả sóng tới và sóng phản xạ, nghiệm có dạng:

$$\Psi_1=A_1e^{ik_1x}+B_1e^{-ik_1x}$$

Số hạng thứ nhất biểu diễn sóng tới, số hạng thứ 2 biển diễn sóng phản xạ.

***Trong miền 2,***

$$\Psi_2=A_2e^{-k_2x}+B_2e^{k_2x}$$

***Trong miền 3,***

$$\Psi_3=A_3e^{ik_1(x-a)}+B_3e^{-ik_1(x-a)}$$

$B_3e^{-ik_1(x-a)}$ biểu diễn sóng truyền từ vô cực về (từ phải sang trái) nhưng sóng này không tồn tại, nên $B_3$=0.

Dựa vào điều kiện liên tục của hàm sóng và đạo hàm của nó tại x = 0, x = a, ta tìm được mối quan hệ giữa $A_1$, $B_1$, $A_2$, $B_2$, $A_3$

Hệ số truyền qua:

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \exp\left\{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m\left(U_0 - W\right)}\right\}$$

Như vậy, khi năng lượng W của hạt nhỏ hơn thế năng hàng rào thì hệ số truyền qua vẫn luôn khác 0, nghĩa là vẫn có hạt xuyên qua hàng rào.

**Các bài tập cần làm**

**5.1-5.6. 5.11, 5.12, 5.13, 5.21, 5.23, 5.24, 5.26, 5.28**

**Bài 5.1.** Tính bước sóng de Broglie của electron và proton chuyển động với vận tốc $10^6$ m/s.

**Bài giải:**

Với bài toán này ta thấy vận tốc của electron và proton là rất nhỏ so với vận tốc ánh sáng nên ta coi electron và proton là những hạt cổ điển.

$$\lambda_e = \frac{h}{m_{oe}v} = \frac{6.626.10^{-34}}{9,1.10^{-31}.10^6} = 728.10^{-12}\ m$$

$$\lambda_p = \frac{h}{m_{op}v} = \frac{6.626.10^{-34}}{1,672.10^{-27}.10^6} = 0,396.10^{-12}\ m$$

**Bài 5.2.** Hạt electron tương đối tính chuyển động với vận tốc $2.10^8$ m/s. Tính bước sóng de Broglie của nó.

**Bài giải:** Với bài toán này cần lưu ý, hạt electron tương đối tính có khối lượng thay đổi, nên động lượng của nó được tính như sau:

$p = \dfrac{m_{0e}v}{\sqrt{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}$ , từ đó suy ra bước sóng:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_{0e}v}\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} = \frac{6,625.10^{-34}}{9,1.10^{-31}.2.10^8}\sqrt{1-\frac{2^2}{3^2}} =$$

$$= 2,71.10^{-12}\ m$$

**Bài 5.12.** Hạt vi mô có độ bất định về động lượng bằng 1% động lượng của nó. Tính tỷ số giữa bước sóng de Broglie $\lambda$ và độ bất định về tọa độ ($\Delta x$) của hạt đó.

**Bài giải:**

Có: $\dfrac{\Delta p}{p} = 1\%; \Delta x = \dfrac{\hbar}{\Delta p} = \dfrac{100\hbar}{p}; \lambda = \dfrac{h}{p} = \dfrac{2\pi\hbar}{p}$

$$\rightarrow \frac{\Delta x}{\lambda} = \frac{100}{2\pi} = \frac{50}{\pi}$$

**Bài 5.23.** Hạt trong giếng thế năng một chiều, chiều cao vô cùng

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

a) Hạt ở trạng thái ứng với n = 2. Xác định những vị trí ứng với cực đại và cực tiểu của mật độ xác suất tìm hạt;

b) Hạt ở trạng thái n = 2. Tìm xác suất để tìm hạt có vị trí trong khoảng $\dfrac{a}{3} \le x \le \dfrac{2a}{3}$ ;

c) Tìm vị trí x tại đó xác suất tìm hạt ở các trạng thái n = 1 và n = 2 là như nhau;

d) Chứng minh rằng:

$$\int \psi_m(x)\psi_n(x)dx = \delta_{mn}$$

Với

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0 \text{ khi } m \ne n \\ 1 \text{ khi } m = n \end{cases} \text{ (ký hiệu Kronecker)}$$

e) Chứng minh rằng tại trạng thái n, số điểm nút của mật độ xác suất tìm hạt (tức là những điểm tại đó mật độ xác suất = 0) bằng n+1.

**Bài giải:**

a) Hàm sóng ứng với trạng thái n = 2:

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$$

Mật độ xác suất:

$$\left|\psi_2(x)\right|^2 = \frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$$

Mật độ xác suất nói trên cực đại khi:

$$\sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right) = 1 \rightarrow \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) = \pm 1$$

$$\rightarrow \frac{2\pi}{a}x = \frac{\pi}{2} + k\pi \rightarrow x = \frac{a}{4} + \frac{ka}{2}$$

Vì $0 < x < a \rightarrow x = \frac{a}{4};\frac{3a}{4}$

Mật độ xác suất cực tiểu khi:

$$\sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right) = 0 \rightarrow \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) = 0$$

$$\rightarrow \frac{2\pi}{a}x = k\pi \rightarrow x = \frac{ka}{2}$$

Vì $0 < x < a \rightarrow x = \frac{a}{2}$

b) Xác suất tìm thấy hạt trong khoảng $\frac{a}{3} \le x \le \frac{2a}{3}$ là:

$$\int_{a/3}^{2a/3}\left|\psi_2(x)\right|^2 dx = \int_{a/3}^{2a/3}\frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right)dx =$$

$$= \int_{a/3}^{2a/3}\frac{1}{a}\left(1 - \cos\frac{4\pi}{a}x\right)dx =$$

$$= \frac{1}{a}\left(\frac{2a}{3} - \frac{a}{3}\right) - \frac{1}{a}\frac{a}{4\pi}\sin\frac{4\pi}{a}x\Big|_{\frac{a}{3}}^{\frac{2a}{3}} =$$

$$= \frac{1}{3} - \frac{1}{4\pi}\left[\sin\left(\frac{4\pi}{a}\frac{2a}{3}\right) - \sin\left(\frac{4\pi}{a}\frac{a}{3}\right)\right] =$$

$$= \frac{1}{3} - \frac{1}{4\pi}\left[\sin\left(\frac{8\pi}{3}\right) - \sin\left(\frac{4\pi}{3}\right)\right] = \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{4\pi}$$

c) Trạng thái n = 1 ta có:

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

Trạng thái n = 2 ta có:

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$$

Điều kiện bài toán là:

$\left|\psi_1(x)\right|^2 = \left|\psi_2(x)\right|^2$, tức là:

$$\frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)=\frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$$

$$\to\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)=\cos\left(\frac{4\pi}{a}x\right)$$

$$\to\left[\begin{array}{l}\frac{4\pi}{a}x=\frac{2\pi}{a}x+2k\pi\\ \frac{4\pi}{a}x=-\frac{2\pi}{a}x+2k\pi\end{array}\right.\to\left[\begin{array}{l}\frac{2\pi}{a}x=2k\pi\\ \frac{6\pi}{a}x=2k\pi\end{array}\right.$$

Suy ra:

$$\to\left[\begin{array}{l}x=ka;0<x<a\to \text{vô nghiệm}\\ x=\frac{ka}{3};0<x<a\to x=\frac{a}{3};\frac{2a}{3}\end{array}\right.$$

d)

$$\int_0^a\psi_m(x)\psi_n(x)dx=\int_0^a\frac{2}{a}\sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$$

$$=\int_0^a\frac{1}{a}\left\{\cos\left[\frac{(m-n)\pi}{a}x\right]-\cos\left[\frac{(m+n)\pi}{a}x\right]\right\}dx$$

Xét trường hợp m = n, tích phân trên trở thành:

$$\int_0^a\frac{1}{a}\left\{1-\cos\left[\frac{(m+n)\pi}{a}x\right]\right\}dx=$$

$$=\frac{1}{a}(a-0)-\frac{1}{a}\frac{a}{(m+n)\pi}\sin\left[\frac{(m+n)\pi}{a}x\right]\Bigg|_0^a$$

$$=1$$

Trường hợp $m\neq n$ ta có tích phân trên trở thành:

$$\int_0^a\frac{1}{a}\left\{\cos\left[\frac{(m-n)\pi}{a}x\right]-\cos\left[\frac{(m+n)\pi}{a}x\right]\right\}dx=$$

$$=\frac{1}{a}\frac{a}{(m-n)\pi}\sin\left[\frac{(m-n)\pi}{a}x\right]\Bigg|_0^a-$$

$$-\frac{1}{a}\frac{a}{(m+n)\pi}\sin\left[\frac{(m+n)\pi}{a}x\right]\Bigg|_0^a=0$$

e) Với hàm sóng ứng với mức n bất kỳ:

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

Tại những điểm mật độ xác suất tìm hạt bằng 0 ta có:

$$\sin\left(\frac{\pi nx}{a}\right)=0\to\frac{\pi nx}{a}=k\pi\to x=\frac{ka}{n}$$

$$0\le x\le a\to x=0;\frac{a}{n};\frac{2a}{n};...;\frac{na}{n}$$

Tổng cộng những điểm thỏa mãn điều kiện trên là n+1 điểm.