

## HƯỚNG DẪN HỌC CHƯƠNG 8

### CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

#### I. MỤC ĐÍCH - YÊU CẦU

1. Nắm được giả thuyết de Broglie về lưỡng tính sóng - hạt của vi hạt. Từ đó đi đến biểu thức của hàm sóng  $\psi$  và phương trình Schrodinger.
2. Hiểu và vận dụng được hệ thức bất định Heisenberg.
3. Hiểu và vận dụng phương trình Schrodinger để giải một số bài toán cơ học lượng tử đơn giản như hạt trong giếng thế, hiệu ứng đường ngầm, dao động tử điều hòa lượng tử.

#### II. TÓM TẮT NỘI DUNG

##### 1. Lưỡng tính sóng hạt của vi hạt

Trên cơ sở lưỡng tính sóng hạt của ánh sáng, de Broglie đã mở rộng ra cho các vi hạt. Theo giả thuyết này, mọi vi hạt tự do có năng lượng xác định, động lượng xác định tương đương với sóng phẳng đơn sắc. Lưỡng tính sóng hạt của các vi hạt được biểu diễn bằng các hệ thức:

$$E = h\nu \quad \text{và} \quad p = mv = h/\lambda.$$

Ngoài ra, theo thuyết tương đối Einstein, mọi hạt vật chất có khối lượng  $m$  đều mang năng lượng bằng

$$E = mc^2$$

trong đó

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

$m_0$  là khối lượng nghỉ của hạt (khi  $v = 0$ ).

##### 2. Hàm sóng

Hàm sóng của vi hạt tự do có dạng của hàm sóng phẳng:

$$\psi = \psi_0 \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})\right] = \psi_0 \exp[-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})]$$

trong đó  $\hbar = h/2\pi$  gọi là hằng số Planck rút gọn và  $|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$  được gọi là số sóng.

Hàm sóng  $\psi$  không những mô tả những tính chất của hệ tại một thời điểm nào đó, mà nó còn xác định được động thái của hệ ở những thời điểm tiếp theo. Hàm sóng có ý nghĩa thống kê.  $|\psi|^2$  là mật độ xác suất tìm thấy hạt tại một điểm nào đó đối với một trạng thái lượng tử đang xét. Như

vậy, hàm sóng  $\psi$  không mô tả một sóng thực, mà mô tả sóng xác suất. Do đó hàm sóng phải thỏa mãn ba điều kiện: hàm sóng phải liên tục, hữu hạn và đơn trị. Điều kiện chuẩn hóa của hàm sóng là

$$\int_V |\psi|^2 dV = 1$$

### 3. Nguyên lý bất định Heisenberg

Nguyên lý này thu được từ lưỡng tính sóng hạt của vi hạt, được biểu diễn qua hệ thức dưới đây khi xét vị trí  $x$  và động lượng  $p$  của vi hạt:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx h \quad \text{hay} \quad \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Nếu  $\Delta x$  càng nhỏ (vị trí càng xác định) thì  $\Delta p_x$  càng lớn (động lượng càng bất định) và ngược lại. Như vậy đối với vi hạt, vị trí và động lượng không được xác định chính xác đồng thời. Do đó, trong thế giới vi mô khái niệm quỹ đạo không có ý nghĩa. Nếu ta biết được vị trí  $x$  ở thời điểm  $t$ , thì đến thời điểm  $t + dt$  ta chỉ có thể xác định vị trí hạt với một xác suất nào đó thôi. Đối với các vi hạt khái niệm quỹ đạo được thay thế bằng khái niệm xác suất tìm thấy hạt tại một vị trí nào đó ở trạng thái lượng tử đang xét.

Ngoài hệ thức giữa vị trí và động lượng, vi hạt còn tuân theo hệ thức bất định cho năng lượng

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx h$$

Ý nghĩa của hệ thức bất định giữa năng lượng và thời gian: 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, nếu năng lượng của hệ ở một trạng thái nào đó càng xác định thì thời gian tồn tại của hệ ở trạng thái đó càng dài.

### 4. Phương trình Schrodinger và ứng dụng

Từ biểu thức của hàm sóng, Schrodinger đã đưa ra phương trình cơ bản của cơ học lượng tử mang tên ông cho vi hạt.

Đối với vi hạt tự do:

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

Đối với vi hạt trong trường thế

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

Cần chú ý rằng các phương trình Schrodinger thu được trên cơ sở của giả thuyết de Broglie, thuyết lượng tử của Planck và thuyết photon của Einstein, do đó cũng được coi là các tiên đề. Hệ thức bất định Heisenberg và phương trình Schrodinger là những nguyên lý cơ bản của cơ học lượng tử.

Ứng dụng của phương trình Schrodinger:

- Phương trình Schrodinger được áp dụng để giải một số bài toán đơn giản của cơ học lượng tử như tìm năng lượng và hàm sóng của vi hạt khối lượng  $m$  trong giếng thế năng, có bề rộng  $a$  và thành cao vô hạn. Kết quả ta có năng lượng của vi hạt trong giếng thế bị lượng tử hóa:

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

Mỗi giá trị của năng lượng  $E_n$  tương ứng với một trạng thái lượng tử

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

Từ đây ta tìm được xác suất tìm thấy hạt tại các điểm khác nhau trong giếng ứng với mỗi trạng thái lượng tử.

- Vận dụng phương trình Schrodinger, ta xét chuyển động của vi hạt qua hàng rào thế  $U_0$ . Từ đó phát hiện hiệu ứng đường ngầm. Đó là hiệu ứng một vi hạt có năng lượng  $E < U_0$  vẫn có xác suất vượt qua được rào thế  $U_0$ . Đây là hiệu ứng thuần túy lượng tử, vì trong cơ học cổ điển một hạt có năng lượng  $E < U_0$  thì không thể vượt qua được hàng rào thế năng.

- Một ứng dụng nữa hay gặp của cơ học lượng tử là dao động tử điều hòa. Đó là một vi hạt thực hiện các dao động nhỏ bậc nhất quanh vị trí cân bằng. Chuyển động nhiệt của mạng tinh thể cũng được biểu diễn dưới dạng tập hợp của các dao động tử điều hòa tuyến tính. Thay biểu thức thế năng  $U$  của dao động tử điều hòa vào phương trình Schrodinger, ta tìm được các mức năng lượng của dao động tử:

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

Nếu  $n = 0$ , ta tìm được mức năng lượng thấp nhất của dao động tử  $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ .  $E_0$  được gọi là

“năng lượng không”. Kết quả này đã được thực nghiệm xác nhận. Nó nói lên rằng các nguyên tử của mạng tinh thể không bao giờ đứng yên. Suy rộng ra, sự vận động của vật chất không bao giờ bị tiêu diệt. Đó là cơ sở khoa học của triết học duy vật biện chứng.

### III. CÂU HỎI LÝ THUYẾT

1. Phát biểu giả thuyết de Broglie về lưỡng tính sóng hạt của vi hạt.
2. Viết biểu thức hàm sóng cho vi hạt và nêu ý nghĩa của các đại lượng có trong biểu thức đó.
3. Viết phương trình Schrodinger cho vi hạt tự do và vi hạt chuyển động trong trường lực thế. Nêu ý nghĩa các đại lượng có trong phương trình.
4. Hãy nêu bản chất và ý nghĩa thống kê của hàm sóng. Các điều kiện của hàm sóng.
5. Phát biểu và nêu ý nghĩa của hệ thức bất định Heisenberg cho vị trí và động lượng.
6. Phát biểu và nêu ý nghĩa của hệ thức bất định cho năng lượng.
7. Phân tích tại sao trong cơ học lượng tử khái niệm quỹ đạo của vi hạt không còn có ý nghĩa. Khái niệm quỹ đạo của vi hạt được thay thế bằng khái niệm gì ?
8. Hãy tìm biểu thức của hàm sóng và năng lượng của vi hạt trong giếng thế năng một chiều, có chiều cao vô cùng.

9. Định nghĩa dao động tử điều hòa lượng tử. Viết phương trình Schrodinger và biểu thức năng lượng của dao động tử điều hòa. Từ đó rút ra biểu thức của “năng lượng không”, nêu ý nghĩa của biểu thức này.

#### IV. BÀI TẬP

**Thí dụ 1:** Electron chuyển động tương đối tính với vận tốc  $2.10^8 \text{ m/s}$ . Tìm:

1. Bước sóng de Broglie của electron.
2. Động lượng của electron.

**Bài giải**

1. Áp dụng cơ học tương đối tính:

$$\lambda = \frac{h}{mv}; m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \Rightarrow \lambda = \frac{h \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{m_0 v} = 2,72.10^{-12} \text{ m}$$

2. Động lượng của electron:  $p = \frac{h}{\lambda} = 2,44.10^{-22} \text{ kg.m/s}$

**Thí dụ 2:** Động năng của electron trong nguyên tử hydro có giá trị vào cỡ  $10 \text{ eV}$ . Dùng hệ thức bất định hãy đánh giá kích thước nhỏ nhất của nguyên tử.

**Bài giải:** Ta có hệ thức bất định giữa vị trí và động lượng

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (8.50)$$

Giả sử kích thước của nguyên tử bằng  $\ell$ , vậy vị trí của electron theo phương x xác định bởi:

$$0 \leq x \leq \frac{\ell}{2}, \text{ nghĩa là } \Delta x \approx \frac{\ell}{2}$$

$$\text{Từ hệ thức bất định: } \rightarrow \frac{\ell}{2} \Delta p_x \approx \hbar \rightarrow \ell \approx \frac{2\hbar}{\Delta p_x}$$

Mặt khác  $\Delta p_x \leq p$  mà  $p = \sqrt{2m_e E_d}$ , trong đó  $E_d$  là động năng.

$$\text{Vậy giá trị nhỏ nhất của kích thước nguyên tử: } \ell_{\min} = \frac{2\hbar}{\sqrt{2m_e E_d}} = 1,24.10^{-10} \text{ m}$$

**Thí dụ 3:** Dòng hạt có năng lượng  $E$  xác định chuyển động theo phương x từ trái sang phải đến gặp một hàng rào thế năng xác định bởi:

$$U = \begin{cases} 0 & x \leq 0 \\ U_0 & (U_0 < E) \quad x > 0 \end{cases}$$

Xác định hệ số phản xạ và hệ số truyền qua hàng rào thế đối với electron đó.

**Bài giải:**

Giải phương trình Schrodinger ở hai miền I và II.

Trong miền I hàm sóng  $\psi_1(x)$  thỏa mãn:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} E \psi_1 = 0$$

Đặt  $\frac{2m_e}{\hbar^2} E = k^2$ , nghiệm của phương trình:

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Số hạng  $Ae^{ikx}$  mô tả sóng truyền từ trái sang phải (sóng tới), số hạng  $Be^{-ikx}$  mô tả sóng truyền từ phải sang trái (sóng phản xạ trong miền I).

Trong miền II, hàm sóng  $\psi_2(x)$  thỏa mãn:  $\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - U_0) \psi_2 = 0$

Đặt  $\frac{2m_e}{\hbar^2} (E - U_0) = k_1^2$ , phương trình có nghiệm tổng quát:  $\psi_2 = Ce^{ik_1x} + De^{-ik_1x}$ . Trong

miền II chỉ có sóng truyền từ trái sang phải, không có sóng phản xạ từ vô cùng về nên  $D = 0$ .

Vậy  $\psi_2 = Ce^{ik_1x}$ .

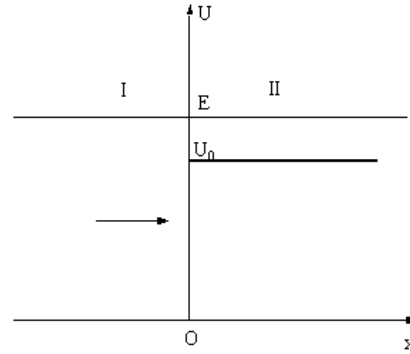
Để tìm A, B, C ta viết điều kiện liên tục của hàm sóng và của đạo hàm cấp 1 của hàm sóng:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \frac{d\psi_1(0)}{dx} = \frac{d\psi_2(0)}{dx}$$

Ta được:  $A + B = C, \quad k(A - B) = k_1 C \rightarrow \frac{A + B}{A - B} = \frac{k}{k_1}, \quad \frac{B}{A} = \frac{k - k_1}{k + k_1}$

$$\text{Hệ số phản xạ: } R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left( \frac{k - k_1}{k + k_1} \right)^2 = \left( \frac{1 - \frac{k_1}{k}}{1 + \frac{k_1}{k}} \right)^2 = \left( \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}} \right)^2$$

$$\text{Hệ số truyền qua: } D = 1 - R = 1 - \left( \frac{k - k_1}{k + k_1} \right)^2 = \frac{4kk_1}{(k + k_1)^2}$$

**Bài tập tự giải**

1. Tìm khối lượng của các lượng tử sau:

a. Ánh sáng đỏ ( $\lambda = 0,7 \mu\text{m}$ )

b. Tia Rongten ( $\lambda = 0,25 \text{ \AA}$ )

c. Tia Gamma ( $\lambda = 0,0124 \text{ \AA}$ )

2. Tìm năng lượng, khối lượng và động lượng của photon có bước sóng  $\lambda = 0,016 \text{ \AA}$
3. Electron phải có vận tốc bằng bao nhiêu để động năng của nó bằng năng lượng của photon có bước sóng  $\lambda = 5200 \text{ \AA}$ .
4. Tìm vận tốc của electron để động lượng của nó bằng động lượng của photon có bước sóng  $\lambda = 5200 \text{ \AA}$ .
5. Tìm bước sóng de Broglie của
  - a. Electron có vận tốc  $10^8 \text{ cm/s}$
  - b. Một quả cầu có khối lượng  $m = 1 \text{ g}$  và vận tốc  $1 \text{ cm/s}$
6. So sánh tỷ số giữa các bước sóng de Broglie của electron và quả cầu khối lượng  $1 \text{ g}$  có cùng vận tốc.
7. Tìm bước sóng của photon có năng lượng bằng  $1 \text{ eV}$
8. Vận tốc của electron và proton bằng  $10^6 \text{ m/s}$ . Xác định bước sóng de Broglie của chúng. ( $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ )
9. Bức xạ gồm các photon có năng lượng  $6,4 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ . Tìm tần số dao động và bước sóng trong chân không của bước sóng đó.
10. Vận tốc lan truyền của tia tím có tần số  $\nu = 7,5 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$  ở trong nước bằng  $\nu = 2,23 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ . Tìm độ biến thiên tần số và độ biến thiên bước sóng của tia đó khi chuyển từ nước vào chân không.
11. Tìm số photon có trong bức xạ xanh bước sóng  $520 \text{ nm}$  trong chân không. Cho biết năng lượng của chùm bức xạ đó bằng  $10^{-3} \text{ J}$ .
12. Tìm động lượng và bước sóng của electron chuyển động với vận tốc  $v = 0,6c$ .
13. Tìm bước sóng de Broglie của:
  - a. Electron được tăng tốc bởi hiệu điện thế  $1 \text{ V}$ ,  $100 \text{ V}$ ,  $1000 \text{ V}$ .
  - b. Electron đang chuyển động tương đối tính với vận tốc  $10^8 \text{ m/s}$ .
14. Tìm sự phụ thuộc giữa bước sóng de Broglie của hạt tương đối tính và hiệu điện thế tăng tốc  $U$ . Khối lượng và điện tích của hạt là  $m$  và  $e$ .
15. Xác định bước sóng de Broglie của electron có động năng
  - a.  $E_d = 100 \text{ eV}$ .
  - b.  $E_d = 3 \text{ MeV}$
16. Một hạt mang điện được gia tốc bởi hiệu điện thế  $U = 200 \text{ V}$ , có bước sóng de Broglie  $\lambda = 0,0202 \cdot 10^{-8} \text{ m}$  và điện tích về trị số bằng điện tích của electron. Tìm khối lượng của hạt đó.
17. Electron có bước sóng de Broglie  $\lambda = 6 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ . Tìm vận tốc chuyển động của electron.
18. Electron không vận tốc ban đầu được gia tốc bởi một hiệu điện thế  $U$ . Tính  $U$  biết rằng sau khi gia tốc hạt chuyển động ứng với bước sóng de Broglie  $10^{-10} \text{ m}$ .
19. Hạt  $\alpha$  chuyển động trong một từ trường đều theo một quỹ đạo tròn có bán kính  $r = 0,83 \text{ cm}$ . Cảm ứng từ  $B = 0,025 \text{ T}$ . Tìm bước sóng de Broglie của hạt đó.
20. Hạt electron có vận tốc ban đầu bằng không được gia tốc bởi một hiệu điện thế  $U$ . Tìm bước sóng de Broglie của hạt sau khi được gia tốc trong hai trường hợp  $U = 51 \text{ V}$  và  $U = 510 \text{ kV}$ .

- 21.** Electron có động năng  $E_d = 15\text{eV}$ , chuyển động trong một giọt kim loại kích thước  $d = 10^{-6}\text{m}$ . Xác định độ bất định về vận tốc (ra %) của hạt đó.
- 22.** Hạt vi mô có độ bất định về động lượng bằng 1% động lượng của nó. Xác định tỷ số giữa bước sóng de Broglie và độ bất định về tọa độ của hạt.
- 23.** Hạt vi mô có độ bất định về vị trí cho bởi  $\Delta x = \lambda / 2\pi$ , với  $\lambda$  là bước sóng de Broglie của hạt. Tìm độ bất định về vận tốc của hạt đó.
- 24.** 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.
- 25.** Vị trí của một quả cầu khối lượng  $2\mu\text{g}$  được xác định với độ bất định bằng  $2\mu\text{m}$ . Trong trường hợp này, độ bất định về vận tốc bằng bao nhiêu? Hạt có thể tuân theo cơ học cổ điển không?
- 26.** Ước lượng độ bất định của động lượng electron bị giam trong trường thế một chiều

$$U(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0 \\ eEx & x > 0 \end{cases}$$

trong trường hợp năng lượng của hạt có giá trị cực tiểu khả dĩ. Cho cường độ điện trường  $E = 3 \cdot 10^7 \text{V/cm}$ .

- 27.** Một vi hạt có khối lượng  $m$  chuyển động trong trường thế có dạng  $U = k|x|^3$ . Dựa vào hệ thức bất định Heisenberg ước lượng kích thước dài của miền trong đó vi hạt tồn tại với năng lượng cực tiểu khả dĩ.
- 28.** Dựa vào hệ thức bất định cho năng lượng ước lượng độ rộng của mức năng lượng electron trong nguyên tử hydro ở trạng thái

a. Cơ bản ( $n = 1$ )

b. Kích thích với thời gian sống  $\Delta t \sim 10^{-8}\text{s}$

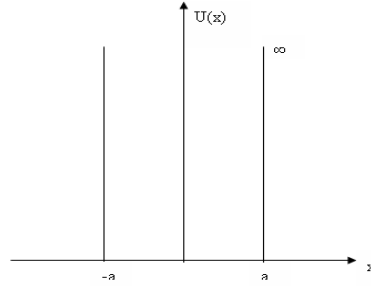
- 29.** Viết phương trình Schroedinger cho hạt chuyển động dưới tác dụng của lực  $F = -kx$ .

**30.** Viết phương trình Schroedinger cho electron chuyển động trong trường Coulomb gây bởi hạt nhân đứng yên mang điện tích  $Ze$ .

- 31.** Viết phương trình Schrodinger đối với hạt vi mô chuyển động một chiều trong trường thế

$$U = \frac{kx^2}{2}$$

32. Tìm hàm sóng và mức năng lượng của các trạng thái dừng của hạt khối lượng  $m$  nằm trong giếng thế một chiều có dạng vuông góc với các thành cao vô hạn, bề rộng  $2a$  (hình vẽ)



33. 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  $a=10\text{cm}$ ,  $a=10\text{\AA}$ . Có nhận xét gì về kết quả thu được ?

34. Hạt nằm ở trạng thái cơ bản ( $n = 1$ ) trong giếng thế một chiều bề rộng  $a$ , có các thành tuyệt đối không thấm ( $0 < x < a$ ). Tìm xác suất tồn tại của hạt trong các miền:  $0 < x < a/3$  (miền I) và  $a/3 < x < 2a/3$  (miền II).

35. Một vi hạt chuyển động trong giếng thế năng một chiều có bề rộng  $a$  và thành cao vô cùng:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & x \leq 0, x \geq a \end{cases}$$

Hạt ở trạng thái lượng tử  $n = 2$ . Tìm những vị trí  $x$  ứng với cực đại và cực tiểu của xác suất tìm thấy hạt.

Hạt ở trạng thái lượng tử  $n = 2$ . Tìm xác suất để hạt nằm trong khoảng  $a/3 < x < 2a/3$ . Tìm vị trí  $x$  để tại đó xác suất tìm thấy hạt ở các trạng thái  $n = 1$  và  $n = 2$  bằng nhau.

36. Một chùm electron mang năng lượng  $E = 25 \text{ eV}$  gặp trên đường đi một hàng rào thế có độ cao  $U_0 = 9 \text{ eV}$ . Xác định hệ số phản xạ  $R$  và hệ số truyền qua  $D$  của sóng de Broglie qua hàng rào này.

37. Một chùm electron mang năng lượng  $E = 25 \text{ eV}$  gặp trên đường đi một hàng rào thế có độ cao  $U = 26 \text{ eV}$ . Xác định xác suất tỷ đối  $\eta$  tìm thấy hạt electron trong các miền II tại khoảng cách  $x = 1 \text{\AA}$  tính từ giới hạn của các miền I, II (nghĩa là tỉ số giữa mật độ xác suất tồn tại electron tại điểm  $x = 1 \text{\AA}$  và mật độ xác suất tồn tại electron ở giới hạn miền với  $x=0$ ).