



CHƯƠNG VIII: CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

Bài giảng môn Vật lý 3 và thí nghiệm

Giảng viên: Tô Thị Thảo

Ngày 30 tháng 10 năm 2024

- 1 Lưỡng tính sóng-hạt của hạt vi mô
 - 1.1 Lưỡng tính sóng-hạt của ánh sáng
 - 1.2 Giả thuyết de Broglie
 - 1.3 Hệ thức bất định Heisenberg và ý nghĩa
- 2 Hàm sóng trong cơ học lượng tử, ý nghĩa, điều kiện
- 3 Phương trình Schrödinger
- 4 Ứng dụng của phương trình Schrödinger
 - 4.1 Chuyển động của vi hạt trong giếng thế năng một chiều
 - 4.2 Hiệu ứng đường hầm

1.1 Lượng tính sóng hạt của ánh sáng

Ánh sáng

- **sóng**: giao thoa, nhiễu xạ, phân cực...
- **hạt**: hiệu ứng quang điện, tán xạ Compton, bức xạ nhiệt...

Thuyết photon của Einstein: Ánh sáng là chùm hạt

- **Năng lượng**: $\varepsilon = h\nu$
- **Động lượng**: $p = \frac{h}{\lambda}$

⇒ Tính chất sóng và hạt có liên quan → biểu thị qua ε và p .

Thiết lập biểu thức hàm sóng ánh sáng đơn sắc

1.1 Lượng tính sóng hạt của ánh sáng

Thiết lập hàm sóng phẳng của ánh sáng đơn sắc:

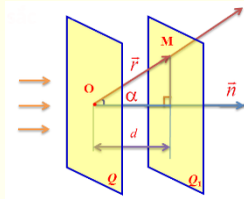
Tại $O \in Q$: $\psi_0 = a \cos 2\pi \nu t$

Tại $M \in Q_1$:

$$\psi_M = a \cos 2\pi \nu \left(t - \frac{d}{c} \right) = a \cos 2\pi \left(\nu t - \frac{d}{\lambda} \right)$$

do $d = r \cos \alpha = \vec{r} \cdot \vec{n}$

$\Rightarrow \psi = \psi_0 \cos 2\pi \left(\nu t - \frac{\vec{r} \cdot \vec{n}}{\lambda} \right)$: hàm sóng phẳng của ánh sáng đơn sắc.



Biểu diễn hàm sóng dưới dạng phức: $\psi = \psi_0 e^{-2\pi i \left(\nu t - \frac{\vec{r} \cdot \vec{n}}{\lambda} \right)}$

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

với $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34}$ J.s: hằng số Planck rút gọn.

Biểu diễn qua vectơ sóng $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n}, \vec{p} = \hbar \vec{k}$

$$\psi = \psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$$

1.2 Giả thuyết de Broglie

Một vi hạt tự do có năng lượng xác định, 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 theo hệ thức:

$$\varepsilon = h\nu \text{ hay } \varepsilon = \hbar\omega$$

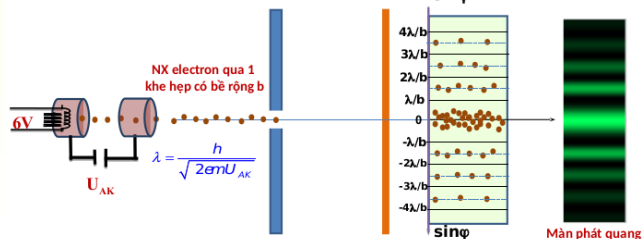
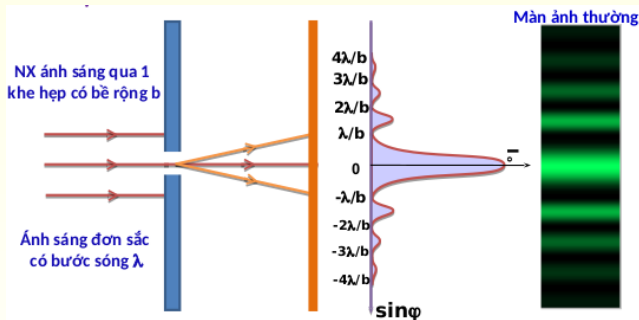
- Động lượng của vi hạt liên hệ với bước sóng của sóng tương ứng theo hệ thức:

$$p = \frac{h}{\lambda} \text{ hay } \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

Thực nghiệm xác nhận tính chất sóng của hạt vi mô

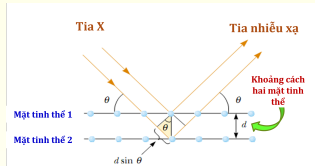
- Nhiễu xạ của chùm electron qua khe hẹp.
- Thí nghiệm 2: Nhiễu xạ của chùm electron trên tinh thể.

Thí nghiệm giao thoa của chùm electron qua khe hẹp



Tán xạ electron trên tinh thể

- Nhiễu xạ của electron trên tinh thể tuân theo định luật Bragg giống nhiễu xạ của tia X trên tinh thể.
- Bước sóng electron đo được phù hợp với giả thuyết de Broglie.



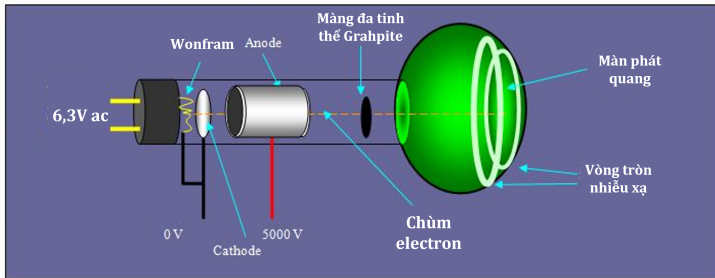
Nhiễu xạ cực đại:

$$2d \sin \theta = k\lambda$$

với $k = 1, 2, 3, \dots$

Công thức Bragg

Sơ đồ thí nghiệm

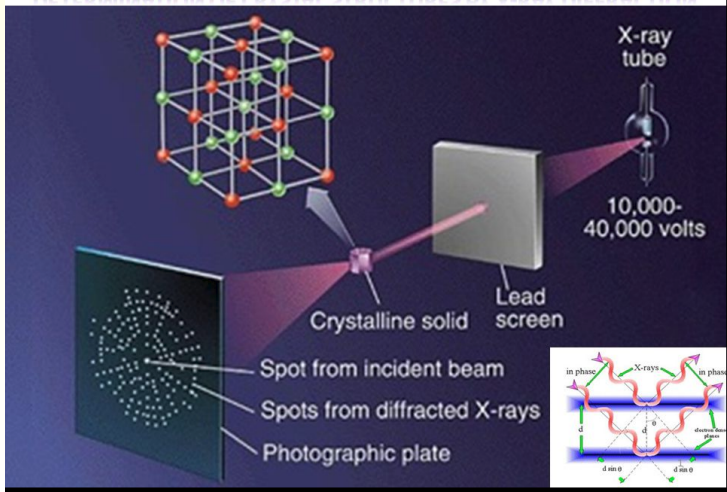


- Kính hiển vi điện tử dùng sóng electron thay cho sóng ánh sáng, có độ phóng đại lên đến 2 triệu lần.
- Nhiều xạ electron, nhiều xạ neutron được dùng để tìm hiểu cấu trúc vật chất, tương tự như nhiều xạ tia X.

Hình ảnh của con mạt bụi được quan sát bằng kính hiển vi điện tử:



DETERMINATION OF CRYSTAL STRUCTURES BY X-RAY DIFFRACTION



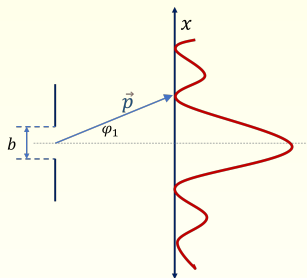
1.3 Hệ thức bất định Heisenberg

- Sau khi qua khe, vị trí và động lượng \vec{p} của hạt thay đổi.

- Xét phương $x \in$ mặt phẳng khe:

Vị trí của hạt trong khe: $0 \leq x \leq b$

$$\Delta x \approx b$$



Hình chiếu của \vec{p} : $0 \leq p_x \leq p \sin \varphi$

Sau khi qua khe, hạt có thể rơi vào cực đại giữa hoặc phụ

\Rightarrow Hình chiếu p_x được xác định với độ bất định nhỏ nhất khi:

$$\Delta p_x \approx p \sin \varphi_1, \sin \varphi_1 = \lambda/b \Rightarrow \Delta x \Delta p_x \approx p \lambda \text{ mà } p = h \lambda$$

$$\Delta x \Delta p_x \approx h$$

Tương tự

$$\Delta y \Delta p_y \approx h, \Delta z \Delta p_z \approx h$$

1.3 Hệ thức bất định Heisenberg

Hệ thức bất định giữa tọa
và động lượng

hay còn viết dưới dạng:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta x \cdot \Delta p_x \approx \hbar \\ \Delta y \cdot \Delta p_y \approx \hbar \\ \Delta z \cdot \Delta p_z \approx \hbar \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \Delta x \cdot \Delta p_x \approx \hbar \\ \Delta y \cdot \Delta p_y \approx \hbar \\ \Delta z \cdot \Delta p_z \approx \hbar \end{array} \right.$$

Ý nghĩa: Tọa độ và động lượng không đồng thời xác định. Nếu động lượng càng xác định thì tọa độ càng bất định và ngược lại.

→ Các vi hạt chuyển động không theo quy luật của cơ học cổ điển mà tuân theo quy luật thống kê lượng tử.

Hệ thức bất định giữa năng lượng và thời gian: $\Delta \varepsilon \cdot \Delta t \approx \hbar$

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.

→ trạng thái có năng lượng bất định là trạng thái không bền, còn trạng thái có năng lượng xác định là trạng thái bền.

1.3 Hệ thức bất định Heisenberg

Ví dụ 1: Trong nguyên tử, electron chuyển động trong phạm vi 10^{-10} m (kích thước nguyên tử)

- Độ bất định về vị trí: $\Delta x \approx 10^{-10}$ m
- Độ bất định về vận tốc:

$$\Delta v_x = \frac{\Delta p_x}{m} \approx \frac{1}{m} \frac{h}{\Delta x} = \frac{6,625 \cdot 10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} 10^{-10}} \approx 7 \cdot 10^6 \text{ m/s}$$

không có vận tốc xác định \Rightarrow electron chuyển động với quỹ đạo không xác định.

Ví dụ 2: Xét hạt vĩ mô, $m = 10^{-15}$ kg, $\Delta x \approx 10^{-8}$

- Độ bất định về vận tốc:

$$\Delta v_x = \frac{\Delta p_x}{m} \approx \frac{1}{m} \frac{h}{\Delta x} = \frac{6,625 \cdot 10^{-34}}{10^{-15} 10^{-8}} \approx 6.6 \cdot 10^{-11} \text{ m/s}$$

\Rightarrow với hạt vĩ mô, Δv_x nhỏ \rightarrow vị trí và vận tốc xác định đồng thời.

- ❶ Vi hạt tự do: Chuyển động của nó được mô tả bởi hàm sóng tương tự như sóng phẳng đơn sắc:

$$\psi = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(\epsilon t - \vec{p} \cdot \vec{r})}$$

ψ_0 : biên độ của hàm sóng: $\psi^2 = |\psi|^2 = \psi \cdot \psi^*$;

ψ^* là liên hợp phức của ψ

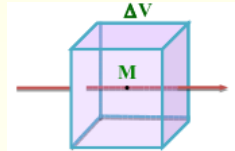
- ❷ Vi hạt chuyển động trong trường thế, hàm sóng của nó là một hàm phức tạp của tọa độ và thời gian:

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(x, y, z, t)$$

b. Ý nghĩa thống kê của hàm sóng

Tính cường độ sáng tại M

- Theo quan điểm sóng: $I_M \sim \psi_0^2 = |\psi|^2$
- Theo quan điểm hạt I : $I_M \sim$ số hạt trong một đơn vị thể tích ΔV bao quanh M.



Nhận xét: $|\psi|^2$: mật độ xác suất tìm hạt trong một đơn vị thể tích ΔV bao quanh M.

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

$$\iiint |\psi|^2 dV = 1: \text{điều kiện chuẩn hóa của hàm sóng.}$$

c. Điều kiện hàm sóng

- ✓ Hàm sóng phải giới nội
- ✓ Hàm sóng phải đơn trị
- ✓ Hàm sóng phải liên tục, đạo hàm bậc nhất của hàm sóng phải liên tục.

- Hàm sóng của vi hạt tự do $\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(\epsilon t - \vec{p} \cdot \vec{r})} = e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t} \psi(\vec{r})$
- Vi hạt chuyển động trong trường thế $U(\vec{r})$, hàm sóng là một hàm phức tạp của tọa độ và thời gian:

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(t)\psi(\vec{r})$$

Trạng thái dừng, hàm $\psi(\vec{r})$ phải thỏa mãn phương trình Schrödinger

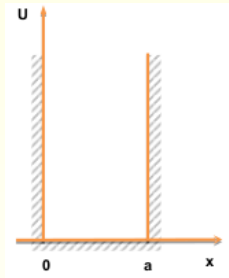
$$\Delta\psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} [\epsilon - U(\vec{r})] \psi(\vec{r}) = 0$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}: \text{toán tử Laplace}$$

Biết được dạng cụ thể của $U(\vec{r}) \rightarrow$ tìm được hàm sóng $\psi(\vec{r})$ và năng lượng ϵ của vi hạt.

Xét chuyển động của vi hạt theo phương x , trong một miền mà thế năng U được xác định theo điều kiện:

$$U = \begin{cases} 0 & \text{khi } 0 < x < a \\ \infty & \text{khi } x \leq 0 \text{ và } \geq a \end{cases}$$



Phương trình Schrödinger của hạt trong giếng có dạng:

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

$$\Leftrightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\psi = 0 \text{ Đặt } \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} = k^2$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \text{ Nghiệm có dạng: } \psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

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

Nhận xét: Hàm sóng phải liên tục, giới nội, ta có:

$$\begin{cases} \psi(0) = B = 0 \\ \psi(a) = A \sin ka = 0 \end{cases}$$

Nếu $A = 0$ thì phương trình có nghiệm tầm thường, do đó $A \neq 0$
 $\Rightarrow k = \frac{n\pi}{a}$.

A được xác định từ điều kiện chuẩn hóa của hàm sóng:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1 \rightarrow \int_0^a A^2 \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx = 1 \rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Hàm sóng:

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

Năng lượng:

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

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

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

Kết luận

- ✓ Mỗi trạng thái của hạt ứng với một hàm sóng $\psi_n(x)$
- ✓ Năng lượng của hạt trong giếng phụ thuộc vào số nguyên n , nghĩa là biến thiên một cách gián đoạn, ta nói **năng lượng bị lượng tử hóa**.
- ✓ Mật độ xác suất tìm thấy hạt trong giếng

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

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

Với $n = 1$: $\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi}{a} x$

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

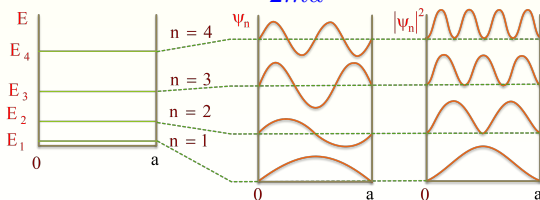
Với $n = 2$: $\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi}{a} x$

$$E_2 = 4 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = 4E_1$$

Tương tự với $n = 3, 4, 5, \dots$

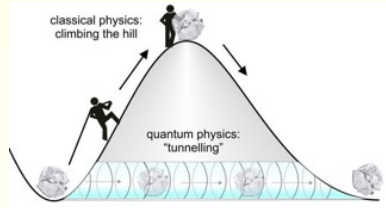
Khoảng cách giữa 2 mức năng lượng:

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



4.2 Hiệu ứng đường hầm

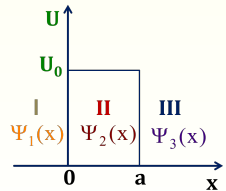
Đối với cơ học cổ điển, nếu hạt có năng lượng $E < U$ thì hạt không thể vượt qua được hàng rào thế.



Đối với cơ học lượng tử, vì hạt có khả năng xuyên qua hàng rào thế cao hơn năng lượng của nó \Rightarrow Hiệu ứng chui ngầm

Xét vì hạt chuyển động từ miền I với hàng rào thế có dạng:

$$U = \begin{cases} 0 & x \leq 0 & \text{miền I} \\ U_0 & 0 < x < a & \text{miền II} \\ 0 & x \geq a & \text{miền III} \end{cases}$$



4.2 Hiệu ứng đường hầm

Phương trình Schrödinger cho ba miền:

Miền I: $\Delta\psi_1(\vec{r}) + k_1^2\psi_1(\vec{r}) = 0$

với $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Miền II: $\Delta\psi_2(\vec{r}) - k_2^2\psi_2(\vec{r}) = 0$

với $k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)$

Miền III: $\Delta\psi_3(\vec{r}) + k_1^2\psi_3(\vec{r}) = 0$

với $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Nghiệm của các phương trình:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}$$

$$\psi_3(x) = A_3 e^{ik_1(x-a)} + B_3 e^{-ik_1(x-a)}$$

Hệ số truyền qua (xuyên hầm):

$$D = \frac{\psi_3 \psi_3^*}{\psi_1 \psi_1^*} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$$

4.2 Hiệu ứng đường hầm

Theo tính chất liên tục của hàm sóng và đạo hàm bậc nhất của hàm sóng:

Điều kiện biên bờ:

Các hệ thức:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2$$

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$$

$$ik_1(A_1 - B_1) = -k_2(A_2 - B_2)$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a)$$

$$A_2e^{-k_2a} + B_2e^{k_2a} = A_3$$

$$\psi_2'(a) = \psi_3'(a)$$

$$-k_2(A_2e^{-k_2a} - B_2e^{k_2a}) = ik_1A_3$$

Do không có sóng phản xạ từ $\infty \Rightarrow B_3 = 0$

Từ hai phương trình cuối, ta xác định A_2, B_2 qua A_3 được

$$A_2 = \frac{1 - in}{2} A_3 e^{k_2a}$$

$$B_2 = \frac{1 + in}{2} A_3 e^{-k_2a}$$

Trong đó:

$$n = \frac{k_1}{k_2} = \sqrt{\frac{E}{U_0 - E}}$$

4.2 Hiệu ứng đường hầm

Giả thiết độ cao hàng rào thế rất lớn $E \ll U_0$ hoặc bề rộng của khá lớn

$$k_2 a \ll 1: A_1 = \frac{(1 - in) \left(1 + \frac{i}{n}\right)}{4} A_3 e^{k_2 a}$$

Khi đó, hệ số truyền qua D:

$$D = \frac{16n^2}{(1 + n^2)} e^{-2k_2 a} \quad \text{nếu } \frac{16n^2}{(1 + n^2)} \sim 1 \leftrightarrow (U_0 = 10E)$$

$$\text{Khi đó: } D = e^{-2k_2 a} = e^{-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}} \neq 0$$

Như vậy, dù $E < U_0$ vẫn có hạt xuyên qua hàng rào thế

a(m)	10^{-10}	$1,5 \cdot 10^{-10}$	$2 \cdot 10^{-10}$	$5 \cdot 10^{-10}$
D	0,1	0,03	0.008	$5 \cdot 10^{-7}$

Hệ số D đáng kể khi a nhỏ \Rightarrow hiệu ứng chui ngầm chỉ xảy ra rõ rệt trong kích thước vi mô.