Chương 8: Cơ học lượng tử

Cơ học cổ điển

- Cơ học Newton – 3 định luật cơ học.
- Không gian và thời gian là tuyệt đối.
- Khối lượng là bất biến.
- Vận tốc truyền tương tác là vô hạn.
- Áp dụng cho thế giới vĩ mô chuyển động với vận tốc bé $v \ll c$.
- Nguyên lý tương đối của Galileo.

↓

Cơ học tương đối

- Lý thuyết tương đối của Einstein.
- Không gian và thời gian có tính tương đối.
- Khối lượng của vật phụ thuộc vào vận tốc.
- Áp dụng cho thế giới vĩ mô chuyển động với vận tốc lớn.

↓

Cơ học lượng tử

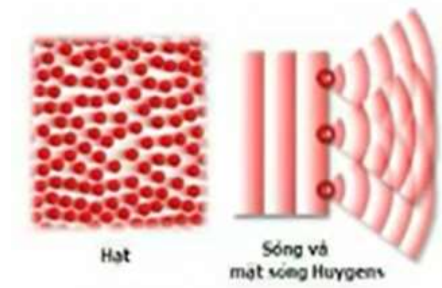
- Các vi hạt mang lưỡng tính sóng-hạt (giả thuyết của de Broglie).
- Hệ thức bất định Heisenberg.
- Chuyển động của hạt được mô tả bởi hàm sóng (phương trình Schrödinger).
- Áp dụng cho thế giới vi mô.

Chương 8: Cơ học lượng tử

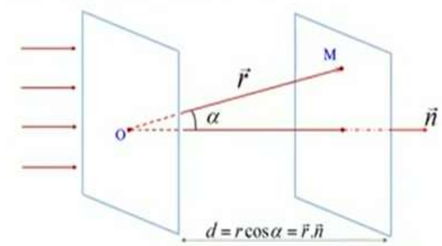
1. Lưỡng tính sóng-hạt của các hạt nguyên tố
2. Hệ thức bất định Heisenberg
3. Hàm sóng và ý nghĩa thống kê
4. Phương trình Schrödinger và ứng dụng

1. Lưỡng tính sóng-hạt của các hạt nguyên tố

1.1. Lưỡng tính sóng hạt của ánh sáng



- **Tính chất song: hiện tượng giao thoa, nhiễu xạ….**
- **Tính chất hạt:hiện tượng quang điện, hiệu ứng Compton….**
- **Tính chất hạt và sóng liên hệ trực tiếp với nhau:** $E = h\nu\,;\ p = \dfrac{h}{\lambda}$



➡ ***Phương trình sóng cho hạt:***

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

➡ **Dao động tại M:** $x_M = x(t\text{-}\dfrac{d}{c}) = A\cos(2\pi\nu t\text{-}\dfrac{2\pi d}{\lambda})$

$$d = r\cos\alpha = \vec{r}.\vec{n} \quad \rightarrow x_M = A\cos 2\pi(\nu t - \frac{\vec{r}.\vec{n}}{\lambda}) \quad \rightarrow \boxed{\psi = A e^{-2\pi i\left(\nu t - \frac{\vec{r}.\vec{n}}{\lambda}\right)}}$$

thay $\nu = \dfrac{E}{h}$ $p = \dfrac{h}{\lambda}$ $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$ $\rightarrow \boxed{\psi = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})}}$

1. Lưỡng tính sóng-hạt của các hạt nguyên tố

1.2. Giả thuyết de Broglie

- ***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:***

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad \text{hay} \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}; \text{và } |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

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

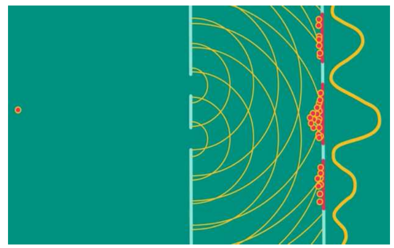
Hàm sóng De Broglie của vi hạt tự do:

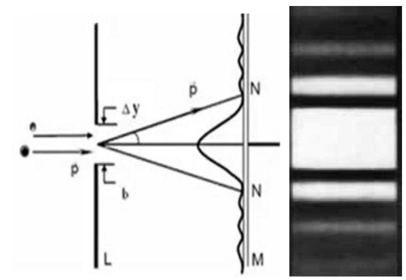
$$\psi = \psi_o e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})}$$

1. Lưỡng tính sóng-hạt của các hạt nguyên tố

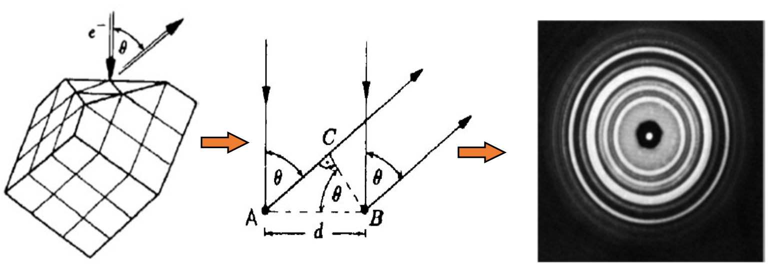
1.3. Thực nghiệm xác nhận lưỡng tính sóng - hạt của hạt nguyên tố (1927: Davission và Germer)

- ***Nhiễu xạ của e^- qua khe hẹp :***

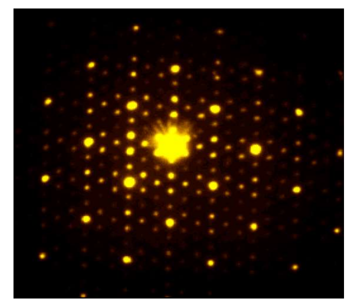




- ***Nhiễu xạ của chùm hạt e^- trên tinh thể***



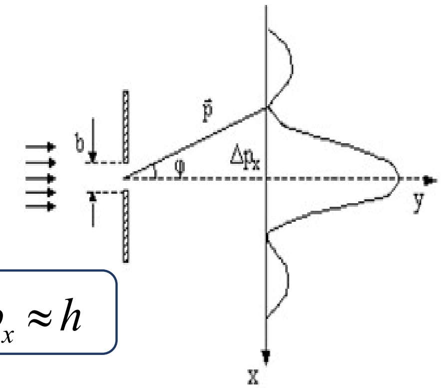
- Tinh thể Ni như cách tử nhiễu xạ



Nhiễu xạ chùm netron trên 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.**

Theo phương x, $\Delta x \approx b$ $\quad 0 \le p_x \le p\sin\varphi$ ➡ $\Delta p_x \approx p\sin\varphi$

Với các hạt ở cực đại giữa: $\Delta p_x \approx p\sin\varphi_1$ $\quad \sin\varphi_1 = \dfrac{\lambda}{b}, \ p = \dfrac{h}{\lambda}$ ➡ $\boxed{\Delta x.\Delta p_x \approx h}$

Hệ thức

$$\Delta x.\Delta p_x \approx h;\ \Delta y.\Delta p_y \approx h;\ \Delta z.\Delta p_z \approx h$$

Vị trí và động lượng của hạt nguyên tố không được xác định chính xác một cách đồng thời.

$$\Delta x.\Delta p_x \ge \hbar;\ \ \Delta y.\Delta p_y \ge \hbar;\ \ \Delta z.\Delta p_z \ge \hbar$$

➞ **Quy luật vận động của hạt nguyên tố theo quy luật thống kê.**

**** Hệ thức bất định giữa năng lượng và thời gian*:**

$$\Delta E.\Delta t \ge \hbar;\ \ \Delta E.\Delta t \approx h$$

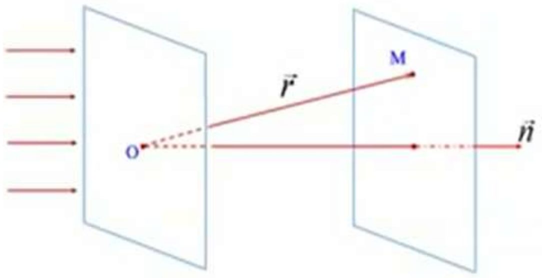
⟶ ***Ý nghĩa:* về *khoảng thời gian tồn tại có trạng thái năng lượng xác định.***

3. Hàm sóng và ý nghĩa thống kê

3.1. Hàm sóng

Theo giả thuyết Đơbrơi: chuyển động của vi hạt tự do được mô tả bởi hàm sóng:

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



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

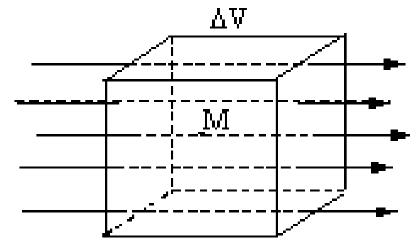
ψ^* **là liên hợp phức của** ψ

$$E = \hbar\omega; \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

Nếu vi hạt chuyển động trong trường thế thì: $\psi(\vec{r}, t) = \psi(x, y, z, t)$

TS. Nguyễn Thị Thúy Liễu

3. Hàm sóng và ý nghĩa thống kê



Xét chùm hạt phôtôn truyền trong không gian.

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

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

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

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

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

$\Rightarrow$ $|\psi|^2$ là mật độ xác suất

Xác suất tìm thấy hạt trong thể tích V: $\int_V |\psi|^2 dV = 1$ $\Rightarrow$ **ĐK chuẩn hoá.**

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

4.1. Phương trình Schrödinger

Hàm sóng De-Broglie mô tả chuyển động của vi hạt tự do: $\psi(\vec{r},t) = \psi_o \, e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})} = \psi(\vec{r}) \, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

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

Tương tự với *y* ,*z*

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

Trong đó $\Delta\psi = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi \longrightarrow \Delta\psi = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi$

Động năng của hạt: $E_đ = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} \to p^2 = 2mE_d \longrightarrow$

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

4. Phương trình Schrödinger và ứng dụng

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

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

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

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

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

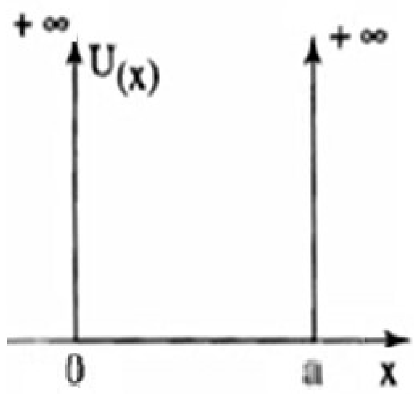
⟹ Nếu biết được dạng cụ thể của thế năng ***U*** thì biết được trạng thái ψ và năng lượng E của hạt nguyên tố.

TS. Nguyễn Thị Thúy Liễu

4. Phương trình Schrödinger và ứng dụng

4.2. Ứng dụng Phương trình Schrödinger

❖ ***Hạt trong giếng thế một chiều sâu vô hạn***



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

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

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

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

Hạt chỉ ở trong giếng thế ⇒ **xác suất tìm hạt tại *x = 0* và *x = a* bằng *0***

ĐK liên tục: ⇒ $\psi(0)=0,\quad \psi(a)=0$

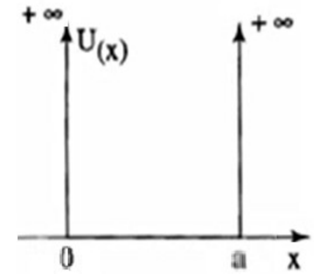
$$\Rightarrow \psi(0)=A\sin(0)+B=0 \Rightarrow B=0$$

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

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

4. Phương trình Schrödinger và ứng dụng

Từ điều kiện chuẩn hóa ➡ $\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1$ ➡ $\int_0^a A^2 \sin^2\frac{n\pi}{a}x dx = \frac{A^2}{2}\int_0^a (1-\cos\frac{2n\pi}{a}x)dx = \frac{A^2 a}{2} = 1$



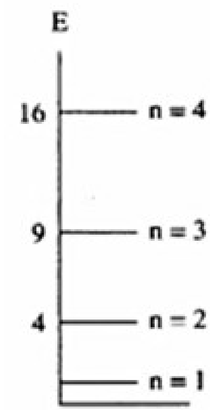
➡ $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ ➡ $\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x}$ $n = 1, 2, 3, \ldots$

- Năng lượng của hạt trong giếng thế: $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{n\pi}{a}$ ➡ $\boxed{E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2 = \frac{h^2}{8ma^2}n^2}$

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

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

Nhận xét:

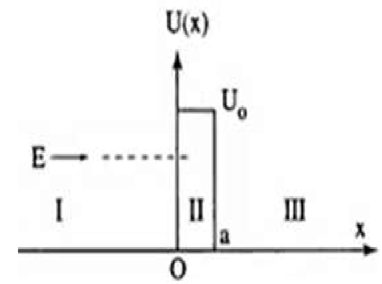


- Mỗi trạng thái có một hàm sóng: $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x$ $n = 1, 2, 3, \ldots$
- Năng lượng của hạt biến thiên gián đoạn: $E_n = \frac{h^2}{8ma^2}n^2$
- Khoảng cách giữa hai mức năng lượng kế tiếp nhau: $\boxed{\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{h^2}{8ma^2}(2n+1)}$
- Mật độ xác suất tìm thấy hạt trong giếng thế: $|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi}{a}x$

4. Phương trình Schrödinger và ứng dụng

❖ ***Hiệu ứng đường hầm***

Xét hạt mang năng lượng E chuyển động theo trục x, chiều dương, $E < U_0$



$$U=\begin{cases} 0 & x\le 0 \\ U_0 & 0<x<a \\ 0 & x\ge a \end{cases}$$

P trình Schrödinger:

$$\begin{cases} \text{(I)}: \dfrac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0 \\ \text{(II)}: \dfrac{d^2\psi_2}{dx^2} - k_2^2\psi_2 = 0 \\ \text{(III)}: \dfrac{d^2\psi_3}{dx^2} + k_1^2\psi_3 = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \psi_1(x) = A_1e^{ik_1x} + B_1e^{-ik_1x} \\ \psi_2(x) = A_2e^{-k_2x} + B_2e^{k_2x} \\ \psi_3(x) = A_3e^{ik_1(x-a)} + B_3e^{-ik_1(x-a)} \end{cases}$$

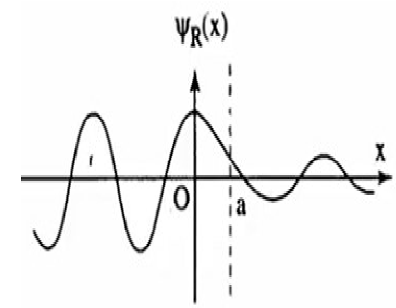
với $k_1^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$

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

Hệ số truyền qua hàng rào: $D = \dfrac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$ Hệ số phản xạ : $R = \dfrac{|B_1|^2}{|A_1|^2}$

Trong miền (III) không có sóng phản xạ: $B_3 = 0$

Từ điều kiện hàm sóng: $\rightarrow D \approx e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}}$



Khi $E < U_0$ thì vẫn luôn có $D \neq 0$ $\leftrightarrow$ **vẫn có hạt xuyên qua rào.**

Khi a nhỏ $\leftrightarrow$ D đáng kể $\leftrightarrow$ hiệu ứng đường ngầm xảy ra rõ rệt.

4. Phương trình Schrödinger và ứng dụng

❖ ***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: $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ → **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.

Bài tập ví dụ

Bài 1: **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.

(a) và (b): có v << c → áp dụng CHCĐ $\lambda = \dfrac{h}{m\text{v}} = 6,6.10^{-29} m$

(c): $W_đ << W_0 = 0,51 MeV$ → áp dụng CHCĐ

$$W_d = \frac{m_e v^2}{2};\ p_e^2 = \frac{2W_d}{m_e};\ \lambda_e = \frac{h}{p_e}$$

Thay số ra KQ: $\lambda = 1,00.10^{-10} m$

Bài tập ví dụ

Bài 2: **Tìm bước sóng de Broglie của**

a. e^- đang chuyển động với vận tốc $10^8 m/s$.

b. e^- có động năng $E_đ = 3MeV$.

a,. Dùng CHTĐT:

$$\lambda = \frac{h}{mv}; m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \Rightarrow \lambda_e = \frac{h\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{m_{0e} v} = 0.69.10^{-11} m$$

b. $E_d > E_0$; $\rightarrow$ áp dụng CHTĐT:

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

$$p = \frac{\sqrt{E_d (E_d + 2m_o c^2)}}{c} \qquad \lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{\sqrt{E_d (E_d + 2m_o c^2)}} = 0,62 \quad (Å)$$

Bài tập ví dụ

Bài 3: **Hạt điện tử 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: $A = eU = E_{đ}\ ;\ U = 510\ kV$

→ Động năng e⁻ thu được từ năng lượng điện trường: $eU = 0{,}51\ MeV = E_{0e}$

→ Áp dụng cơ học tương đối:

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

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

Bài tập ví dụ

Bài 4: **Hạt e⁻ 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?**

$$E_n = \frac{h^2}{8ma^2} n^2$$

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{h^2}{8ma^2}(2n+1)$$

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

$a = 20\mathring{A}\ ,\ \Delta E = 4{,}5.10^{-20}\ J$

Nhận xét về tính lượng tử.

Bài tập ví dụ

Bài 5: **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*.**

$\vec{v} \perp \vec{B}$ → Lực Loren giữ vai trò lực hướng tâm

$$\rightarrow F_L = qvB = \frac{mv^2}{r}$$

$$\rightarrow V = rqB/m \qquad (q = 2e).$$

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

Bài tập ví dụ

Bài 6:

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

$$\Delta x \Delta p \approx \hbar \quad \rightarrow p_{\min} = \Delta p \approx \frac{\hbar}{\Delta x} \approx \frac{2\hbar}{l} = \frac{2\hbar}{l}$$

$$E_d = \frac{p_{\min}^2}{2m} = \frac{2h^2}{ml^2} = 15eV$$

Chương 8: Cơ học lượng tử

- 1900: Khi nghiên cứu hiện tượng bức xạ của vật đen, M. Planck đưa ra thuyết lượng tử: giả thiết bức xạ điện từ là gián đoạn, năng lượng của bức xạ điện từ là bội nguyên của lượng tử năng lượng ($h\nu$)
- 1905: A. Einstein đề xuất thuyết photon, ánh sáng có bản chất hạt. Từ đó giải thích được hiện tượng quang điện.
  1923: Hiệu ứng Compton đã kiểm chứng một cách đầy đủ bản chất hạt của ánh sáng.
- 1913: N. Bohr cho rằng, năng lượng của điện tử trong nguyên tử cũng bị gián đoạn, tương ứng có các mức năng lượng.
  1914: Franck và Hertz đã kiểm chứng giả thuyết của Bohr bằng thực nghiệm.
- 1923: L. de Broglie đưa ra giả thiết về lưỡng tính sóng hạt của các hạt nguyên tố như e^-, proton….
  1927: Davission và Germer bằng thực nghiệm quan sát thấy hiện tượng nhiễu xạ của chùm tia điện tử trên tinh thể.
- 1925: Heisenberg đưa ra hệ thức bất định.
- 1926: Schrödinger đưa ra phương trình chuyển động của hạt nguyên tố.