

PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER VÀ ỨNG DỤNG

Hàm sóng và ý nghĩa thống kê của nó

- Vận động của hạt và vi hệ (tập hợp hạt) luôn tuân theo quy luật thống kê
- Trạng thái của vi hạt, vi hệ được mô tả bởi một hàm sóng, hàm này cho phép xác định xác suất tìm hạt, vi hệ tại một trạng thái xác định
- Đối với chuyển động tự do (thế năng bằng không):

$$\begin{aligned}\psi &= \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Wt - \vec{p} \cdot \vec{r})} = \\ &= \psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})},\end{aligned}$$

trong đó biên độ được xác định:

$$\psi_0^2 = |\psi|^2 = \psi \psi^*.$$

chính là mật độ xác suất (xác suất tìm thấy hạt, vi hệ trong đơn vị thể tích)

- Đối với những hệ chuyển động trong trường thế hàm rất phức tạp phụ thuộc vào các biến số tọa độ và thời gian:

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

- Tóm lại trạng thái của vi hệ, vi hạt được mô tả bởi hàm sóng và mô mật độ xác suất tìm thấy vi hạt, vi hệ ở trạng thái đó

Phương trình schrodinger và ứng dụng

- Đối với vi hệ (vi hạt) chuyển động trong một trường lực thế hàm sóng có dạng

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

W- là năng lượng của vi hệ (vi hạt); là phần phụ thuộc tọa độ không gian của hàm sóng và là nghiệm của phương trình:

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

- phương trình (*) chính là phương trình Schrodinger, trong đó là toán tử Laplace

Nghiệm của phương trình Schrodinger:

- Nếu biết dạng cụ thể của hàm $U(r)$ ta có thể giải được phương trình trên

Nghiệm của phương trình là hàm và W: xác định trạng thái và năng lượng của vi hệ (vi hạt) trong trường thế năng

Khi $U(r)=0$ ta thu được nghiệm thể hiện trạng thái và năng lượng của vi hệ (vi hạt) chuyển động tự do

Ứng dụng của phương trình Schrodinger:

Phương trình Schrodinger được ứng dụng rộng rãi để xác định trạng thái và năng lượng của vi hệ và hạt vi mô: trạng thái và năng lượng của điện tử tự do, điện tử trong trường tuần hoàn của mạng tinh thể, của dao động tử, quay tử, để giải thích hiệu ứng đường hầm.... Xét một vài ví dụ ứng dụng trong các phương pháp phân tích vật lý và hoá lý

- ***Xác định trạng thái và năng lượng của dao tử điều hoà lượng tử:***

- dao tử chuyển động theo phương X trong trường thế năng

$$U = \frac{1}{2} kx^2$$

và do đó

$$U = \frac{m\omega^2 x^2}{2},$$

được gọi là dao tử điều hoà (dao động của iôn quanh nút mạng, dao động của nguyên tử trong phân tử...)

- phương trình Schrodinger đối với dao tử điều hoà có dạng:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(W - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0.$$

- giải phương trình này ta thu được:

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

n là số lượng tử dao động

khi $n=0$

$$W_0 = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

nghĩa là khi không bị kích thích dao tử vẫn dao động

- được ứng dụng để giải bài toán phổ hồng ngoại dao động trong phân tử phổ hồng ngoại
-

Xác định trạng thái và năng lượng của quay tử:

- quay tử là một vi hạt chuyển động tự do trên một mặt cầu xác định
- thế năng $V(r)=V(a)=0$ (a -bán kính mặt cầu) do mặt cầu là gốc thế năng
- phương trình Schrodinger đối với quay tử là:

$$\Delta\psi + \frac{2mW}{\hbar^2} \psi = 0.$$

ng nghiệm của phương trình có dạng:

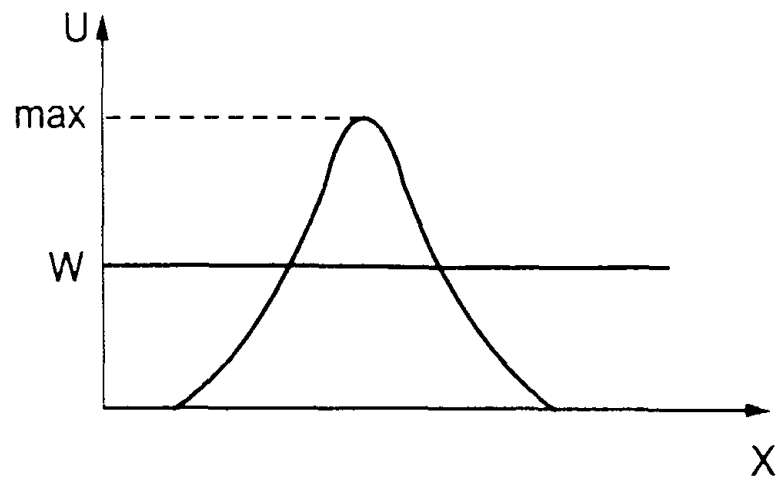
$$W_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2ma^2},$$

l - là số lượng tử quay. $l=0$ phân tử không bị kích thích quay do $W=0$

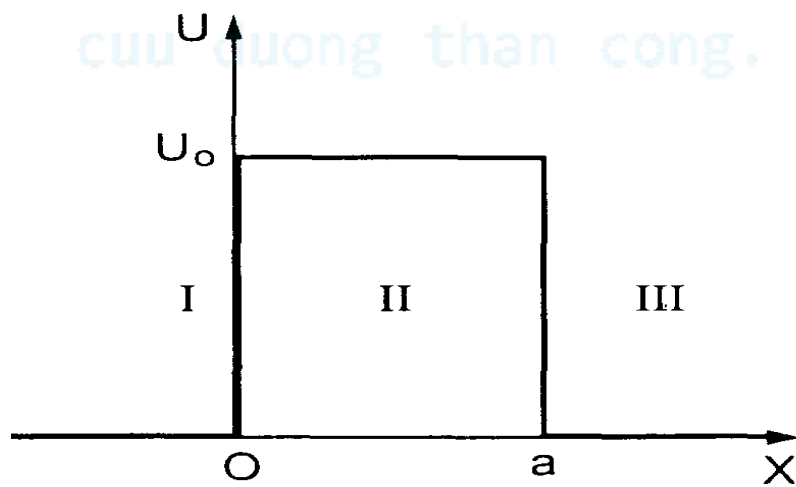
- nghiệm của phương trình được ứng dụng trực tiếp vào nghiên cứu phổ của nguyên tử hai phân tử, lý thuyết về nguyên tử hydro...

Giải bài toán và giải thích hiện tượng xuyên hầm điện tử:

- xét một rào thế năng như hình dưới đây



hạt mang năng lượng W chuyển động theo phương X từ trái qua phải đập vào hàng rào thế năng



H.6-13
Hàng rào thế có dạng hình chữ nhật

$$\text{miền I : } \frac{d^2\psi_I}{dx^2} + k_1^2\psi_I = 0 \text{ với } k_1^2 = \frac{2mW}{\hbar^2},$$

$$\text{miền II : } \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - k_2^2\psi_{II} = 0, \text{ với } k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_o - W),$$

$$\text{miền III : } \frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} + k_1^2\psi_{III} = 0.$$

- hệ số truyền qua hàng rào

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}.$$

- từ các điều kiện biên:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0),$$

$$\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0),$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a),$$

$$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a).$$

ta tìm được

$$D \simeq e^{-2k_2a},$$

$$D \simeq e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(U_o - W)}}$$

từ biểu thức này ta thấy rằng mặc dù $W < U_0$ nhưng D vẫn luôn khác không nghĩa là hạt vẫn có thể xuyên rào.

- D càng lớn khi W càng lớn, khi cung cấp cho điện tử năng lượng (bằng một điện trường chẳng hạn) D sẽ càng lớn phụ thuộc vào trạng thái trước đó (W của điện tử). Đây là nguyên lý chính trong *kính hiển vi điện tử xuyên hầm*.

Tóm lại, phương trình Schrodinger giúp ích rất nhiều trong việc giải thích cũng như giải những bài toán phức tạp của một vi hệ (gồm một hay nhiều vi hạt). *Nghiệm của phương trình cho biết trạng thái và năng lượng của vi hệ.*

cuu duong than cong. com

cuu duong than cong. com

PHÂN LOẠI PHỔ THEO BƯỚC SÓNG

Bảng 1.1. Phân loại các vùng bức xạ điện từ

| Bức xạ | λ , cm | E , eV |
|----------------------|----------------------|----------------|
| Tia γ | $10^{-11} - 10^{-8}$ | $\sim 10^7$ |
| Tia Röntgen | $10^{-8} - 10^{-6}$ | $\sim 10^5$ |
| Tử ngoại và khả kiến | $10^{-6} - 10^{-4}$ | ~ 10 |
| Hồng ngoại | $10^{-4} - 10^{-2}$ | $\sim 10^{-1}$ |
| Vĩ sóng | $10^{-1} - 10$ | $\sim 10^{-3}$ |
| Sóng vô tuyến | > 100 | $< 10^{-6}$ |

Dựa theo chiều dài bước sóng từ dài đến ngắn, các bức xạ điện từ được chia thành vùng

Bảng 1.2. Vùng phổ quang học và vật liệu quang học

| νcm^{-1} | 10 | 100 | 500 | 1000 | 2000 | 5000 | 10^4 | $5 \cdot 10^4$ | 10^5 | $2 \cdot 10^6$ |
|----------------------|--|--------|-----|------|------------|------------|---------------------|----------------|--------|----------------|
| Vùng quang phổ | Hồng ngoại | | | | | | Nhìn thấy | Tử ngoại | | |
| | Xa | Cơ bản | | Gần | Trung bình | Vùng Suman | | Vùng Laiman | | |
| Vật liệu quang học | <div><div><div>Cách tử</div><div><div>KBr</div><div>CaF₂</div></div><div><div>NaCl</div><div>CsI</div><div>LiF</div></div></div><div><div>Thủy tinh</div><div>Thạch anh</div></div><div>Cách tử</div></div> | | | | | | | | | |
| λ | 1000 μ | 100 | 20 | 10 | 5 | 2 | 10 000 \AA | 2000 | 1000 | 50 |

- Vùng tia X và tia tử ngoại ứng với phương pháp phân tích phổ tia X và tia tử ngoại
- Vùng Laiman: 50 – 1200 Å. Không có ý nghĩa với vật liệu hữu cơ
- Vùng Suman: 1200 – 1850 Å, dùng vật liệu quang học là CaF₂, ứng dụng để nghiên cứu các hợp chất hoá học
- Vùng UV- vùng tử ngoại: 1850 – 4000 Å vùng phổ tử ngoại (phổ UV), dùng vật liệu quang học là thạch anh

- Vùng khả kiến: 4000 – 7000 (0,4-0,7) : phổ khả kiến, phổ phát xạ, huỳnh quang
- Vùng hồng ngoại gần: 0,8 – 50 phổ dao động
- Vùng hồng ngoại xa: 50 - 2mm: phổ quay
- Vùng sóng radio và viba: phổ cộng hưởng từ

CÁC KIỂU CẤU TRÚC CƠ BẢN

Dựa vào đặc điểm phân bố khoảng cách các phần tử cấu trúc trong cấu trúc người ta chia tinh thể ra làm các loại sau

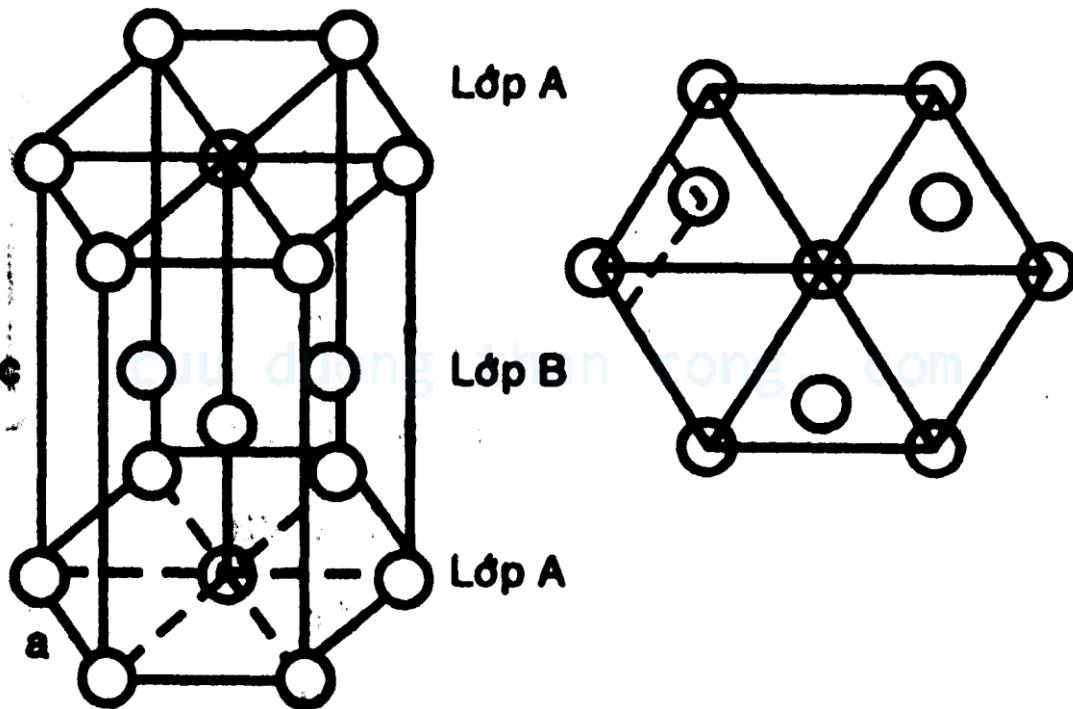
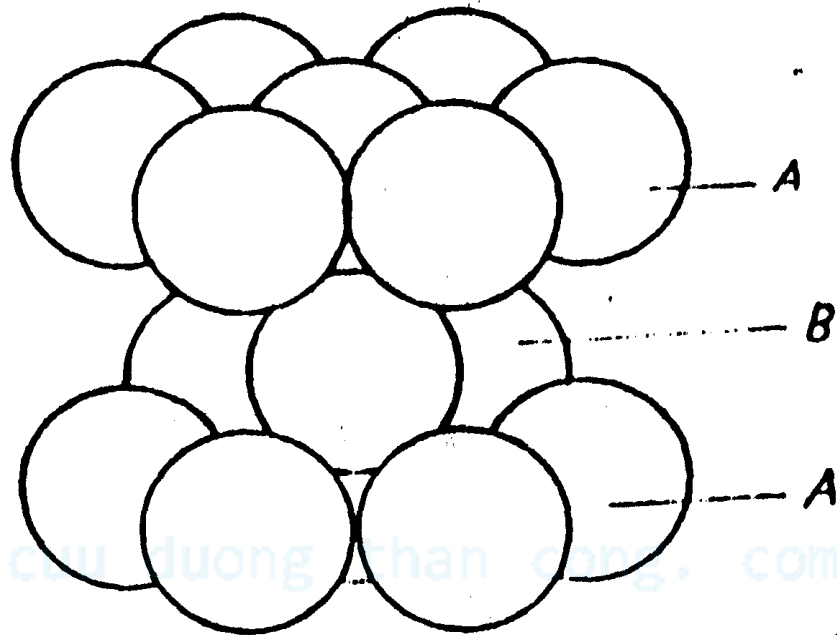
- *Cấu trúc khung*: khoảng cách tương đối bằng nhau trong toàn bộ cấu trúc
- *Cấu trúc lớp*: khoảng cách bằng nhau trong từng lớp
- *Cấu trúc mạch*: khoảng cách bằng nhau trong từng mạch
- *Cấu trúc đảo*: khoảng cách bằng nhau trong từng nhóm nguyên tử

CẤU TRÚC KHUNG

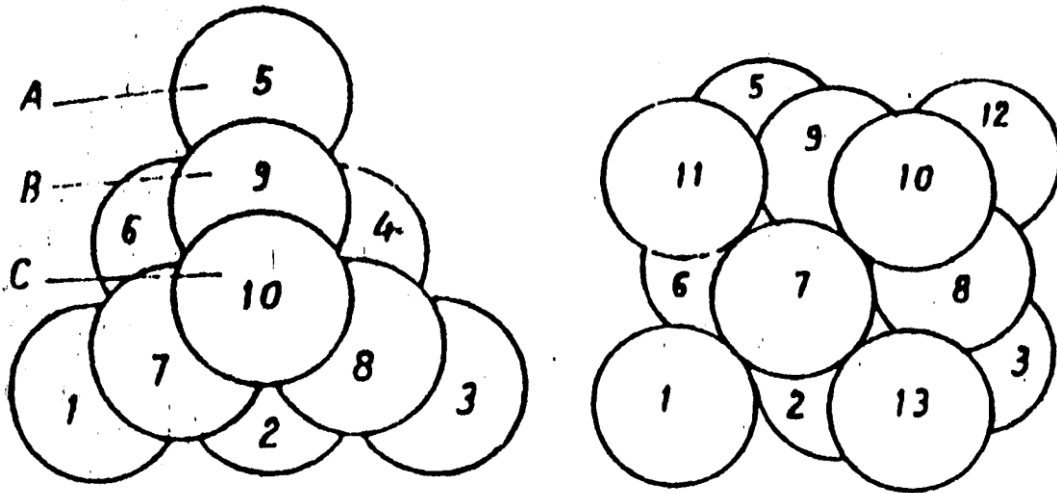
- *Đặc điểm chung*: hình thành trên cơ sở quy luật xếp cầu, các phần tử cấu trúc các nhau những khoảng tương đối đồng đều nên các hình phối trí khá đều đặn
- Các kiểu cấu trúc lập phương A_1 – fcc (Cu, Au, Ag, Pb, Al.. và một số hợp kim khác) hay A_3 – hcp (Mg, Be, Zn, Cd, Y... một số hợp kim khác) hay A_1 – bcc (-Fe, K, Rb, Cs, Ba... một số hợp kim khác) u_3

cuu duong than cong. com

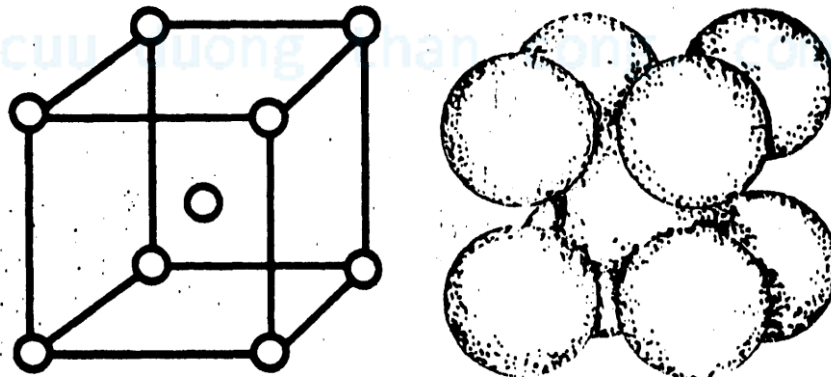
cấu trúc dạng hcp – A_3



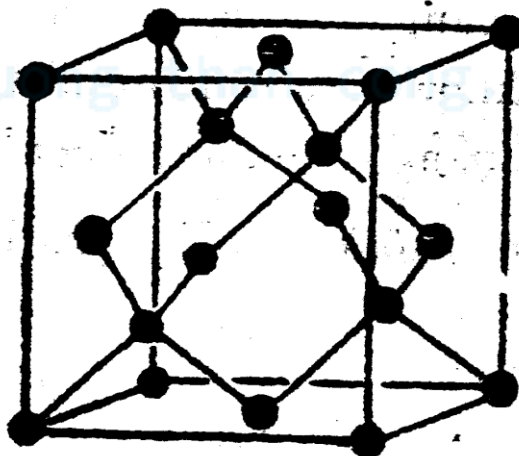
cấu trúc dạng A_1 - fcc



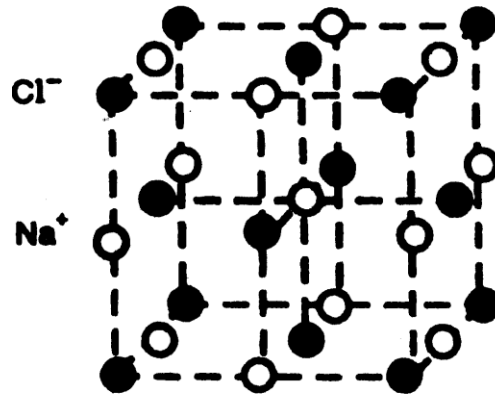
Cấu trúc dạng A_2



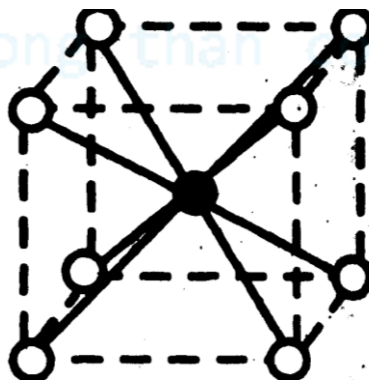
- Cấu trúc kim cương: A_4 - các nguyên tố có trúc kiểu kim cương , Si, Ge,



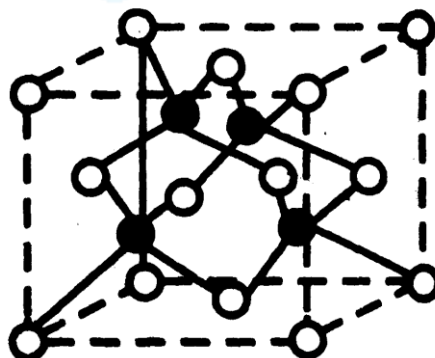
- Cấu trúc NaCl: B₁- các oxit như TiO, VO, MgO, NbO có cấu trúc B₁



- Cấu trúc của CsCl: kiểu B₂- các chất có cấu trúc B₂: CsBr, CsI, NH₄Cl, CuZn, AnZn



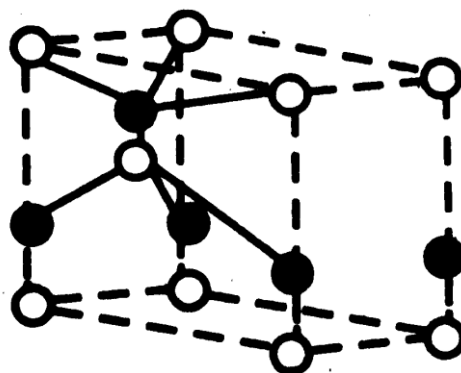
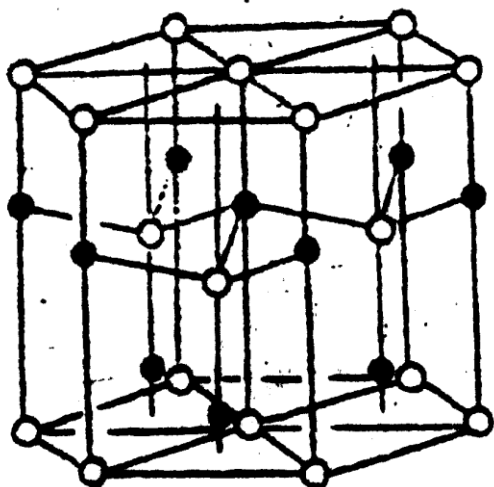
- Cấu trúc Sphalerit : kiểu B₃- các chất có cấu trúc kiểu B₃ các halogenid Cu, AgI...



- Cấu trúc Vuazit (Wurzit)

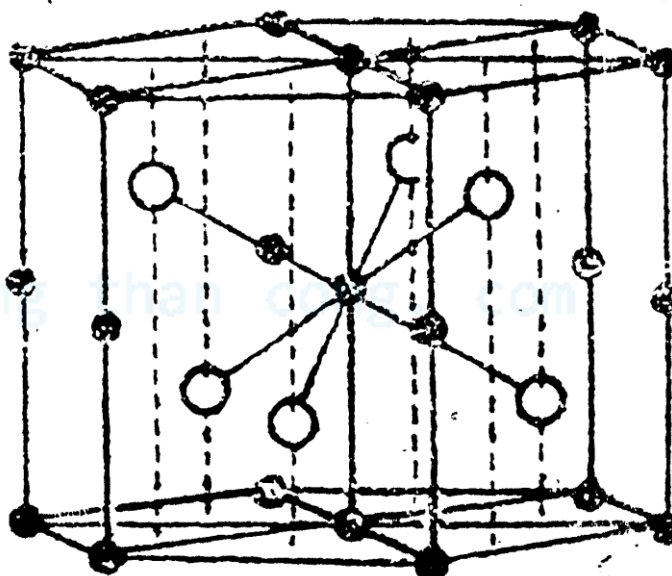
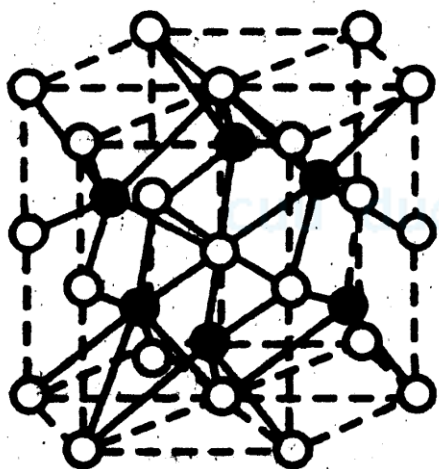
: các chất có dạng cấu

trúc này: BeO, NH₄F, CdS, ZnO, MgTe, CdSe



gồm hai mạng sáu phương xếp chặt lồng vào nhau và cách nhau một đoạn bằng $\frac{3}{8}c$

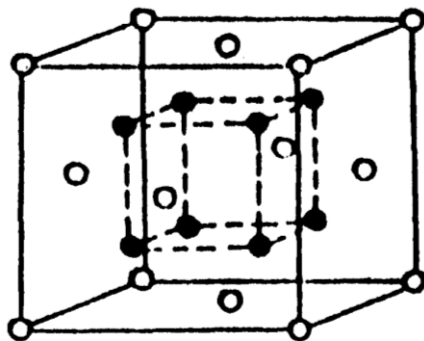
- Cấu trúc Nikelin-NiAs: thuộc kiểu cấu trúc này có MnAs, TiSb, CrSb, MnSb, FeSb, NiSb, NiBi, MnBi...



có thể hình dung cấu trúc như hai khối lăng trụ sáu phương chồng lên nhau. Các nguyên tử kim loại nằm ở đỉnh lăng trụ và tâm của các mặt đáy. Nếu chia ô

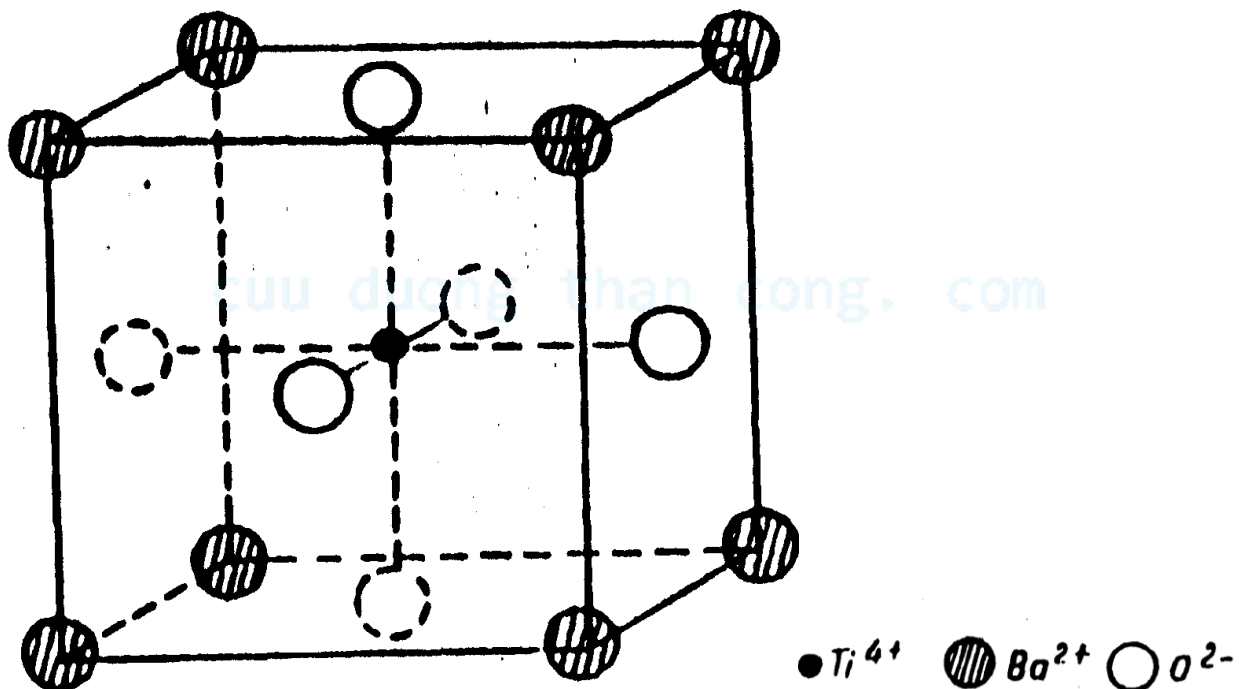
mạng làm 6 lăng trụ 3 phương thì các nguyên tử á kim nằm ở tâm của các lăng trụ 3 phương đó, 3 nguyên tử nằm ở trên và 3 nguyên tử nằm ở dưới.

- Cấu trúc của CaF_2 – kiểu C_1 : các florua của Sn, Ba, Ra, Pb, Cd, Hg... đều thuộc dạng C_1



gồm 3 ô mạng lập phương lồng vào nhau. Mạng thứ nhất của Ca có nút đầu là $[[000]]$, mạng thứ hai với tọa độ nút đầu và mạng thứ 3 có tọa độ nút đầu là là vị trí của các nguyên tử Cl

- Cấu trúc kiểu perôpskit- CaTiO_3 :



Đặc trưng cho một số hợp chất có công thức ABX_3

X= oxy

Loại 1

A là cation hoá trị hai như: Ca, Sr, Ba, Cd, Pb

B là các cation hoá trị bốn như: Ti, Th, Zr, Hf, Sn, Ge

Loại 2

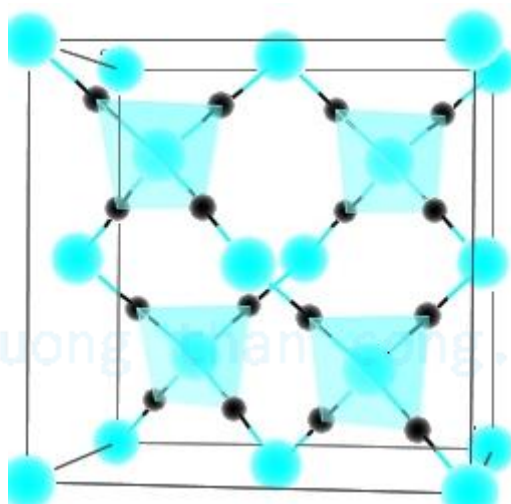
Các cation đều có hoá trị 3 như: $LaAlO_3$, $La(Cr, Fe, Ga, Mn)O_3$

Loại 3

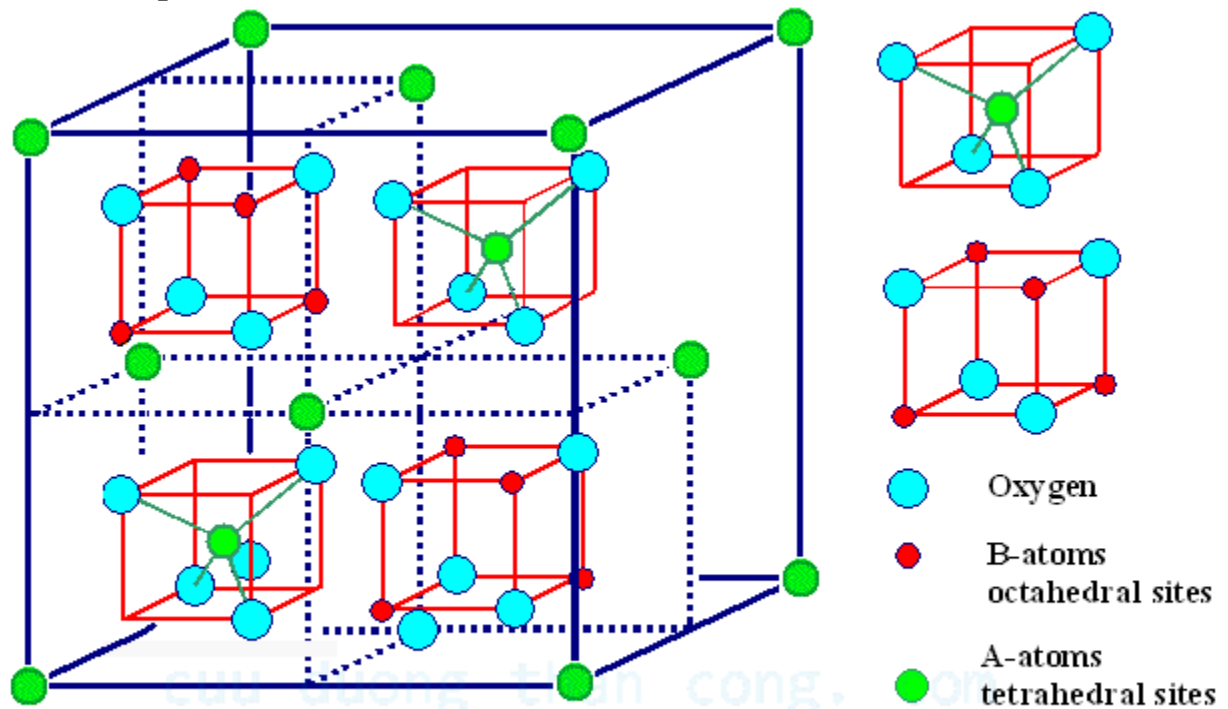
A hoá trị một và B hoá trị năm: $NaCrO_3$, $NaWO_3$, $NaTaO_3$, $(Li, Na, K)NbO_3$

Cấu trúc của cristobalit:

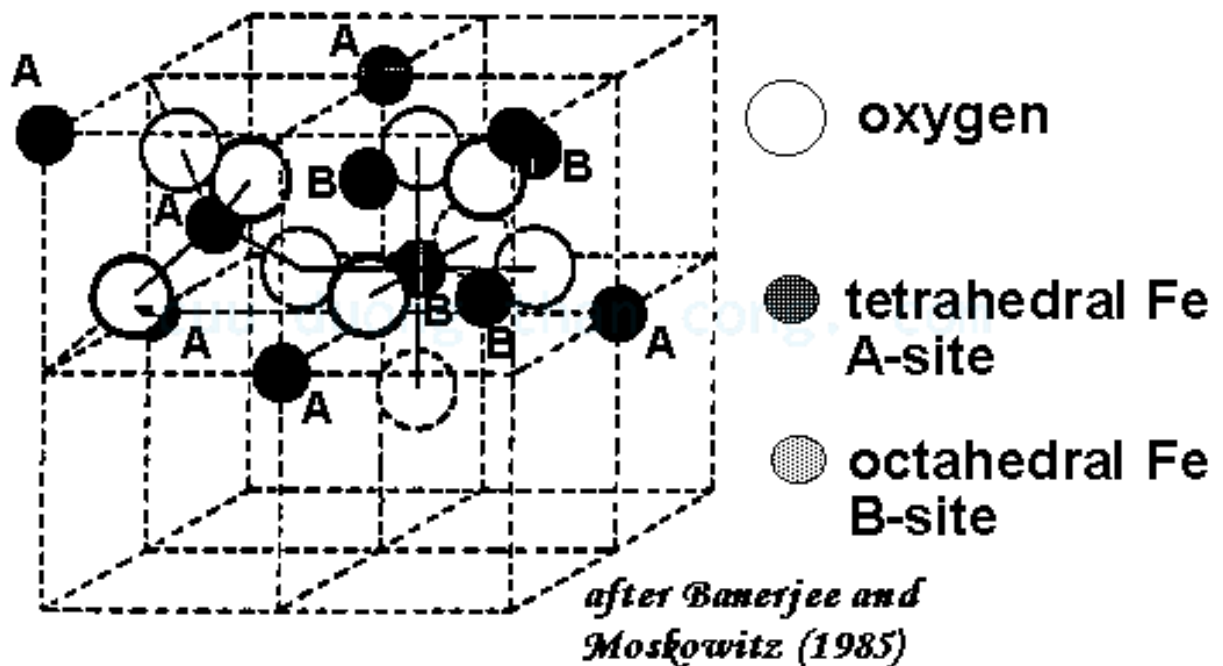
các iôn Si tạo thành mạng kiểu kieu kim cương và được vây quanh bởi 4 iôn oxy



- Cấu trúc spinel

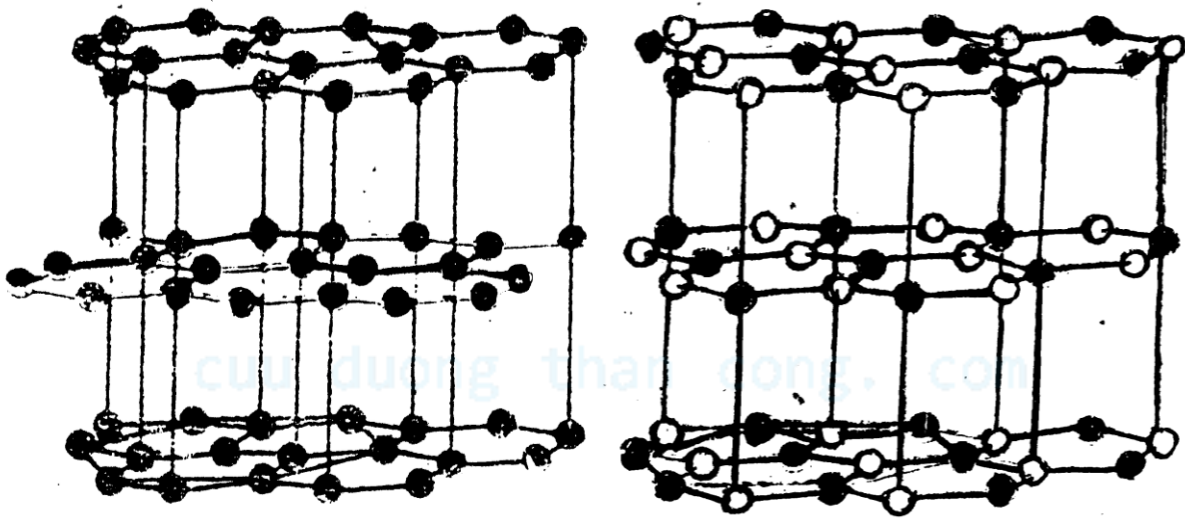


AB₂O₄ spinel The red cubes are also contained in the back half of the unit cell

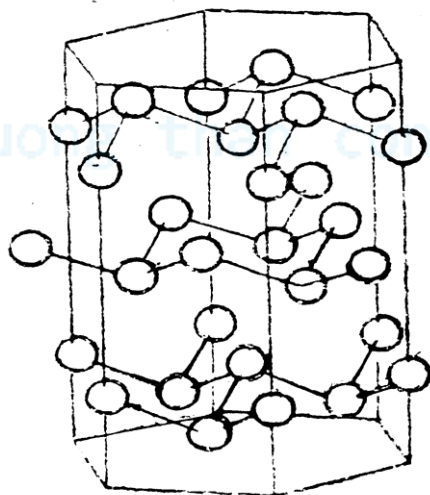


CẤU TRÚC LỚP

- Đối với dạng cấu trúc này quy luật xếp cầu chỉ thể hiện trong từng lớp. Khoảng cách giữa những phần tử cấu trúc trong từng lớp nhỏ hơn hẳn so với khoảng cách giữa hai phần tử khác lớp
- Một số chất có dạng cấu trúc lớp điển hình: graphit, cấu trúc As, CaI_2 , CdCl_2 , molipdenit MoS_2 , một số khoáng silicat như mica, pyrophyllit
- *Cấu trúc của graphit*: cấu trúc dạng này: BN



- Cấu trúc của As: các nguyên tử As trong mỗi lớp phân bố trên hai mặt phẳng song song nhau, làm thành một lớp kép, chứa hai tầng, mỗi nguyên tử có 3 nguyên tử nằm kề ở tầng trên

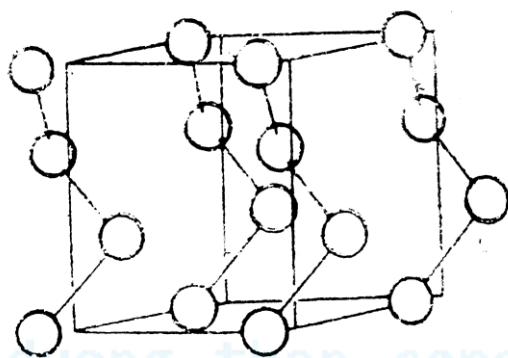


CẤU TRÚC MẠCH

Trong cấu trúc này lực liên kết các phần tử cấu trúc trong một mạch mạnh hơn hẳn so với lực gắn kết các mạch với nhau

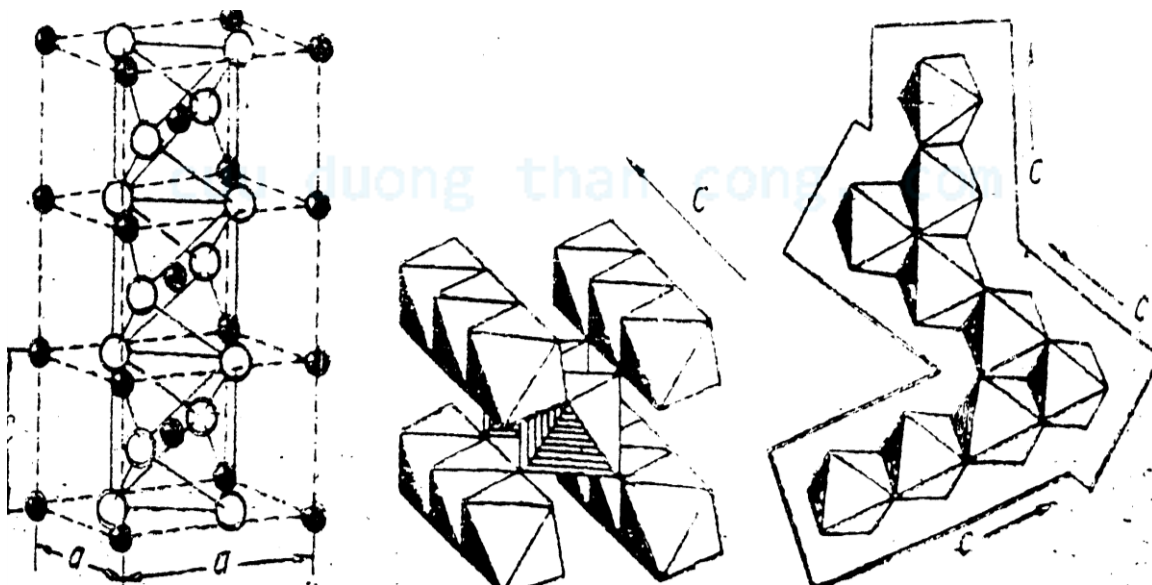
- *Cấu trúc của Se và Te:*

Các đơn chất như selen và telua cấu tạo từ những mạch xoắn kéo dài theo một hướng



- *Cấu trúc của rutin TiO_2 :*

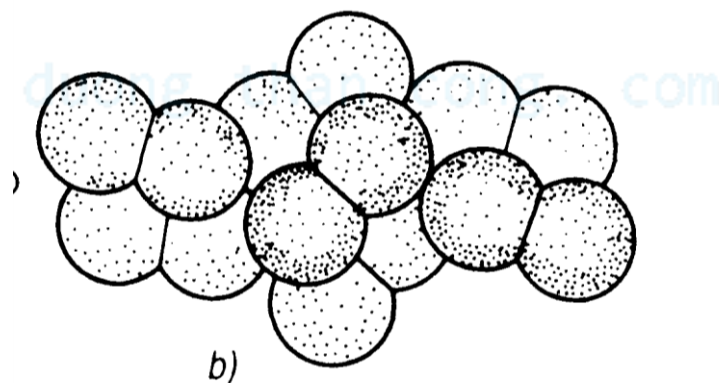
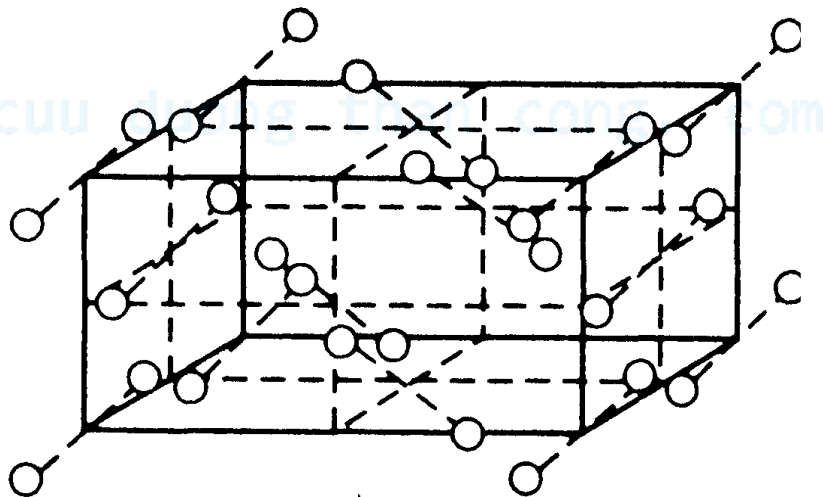
Các ion Ti tạo thành ô mạng bốn phương, các ion Ti nằm ở đỉnh và tâm của ô mạng. Mỗi ion Ti nằm giữa 6 ion oxy tạo hình phối trí 8 mặt. Qua cạnh chung các hình 8 mặt này kéo dài theo trục đối xứng bậc 4. vì thế tinh thể rutin có dạng hình lăng trụ hoặc hình kim



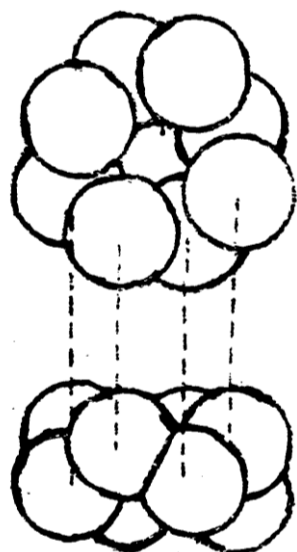
- Cấu trúc Wallatonite : một khoáng silicat cũng có dạng mạch, sẽ được xem xét ở phần sau.

CẤU TRÚC ĐẢO

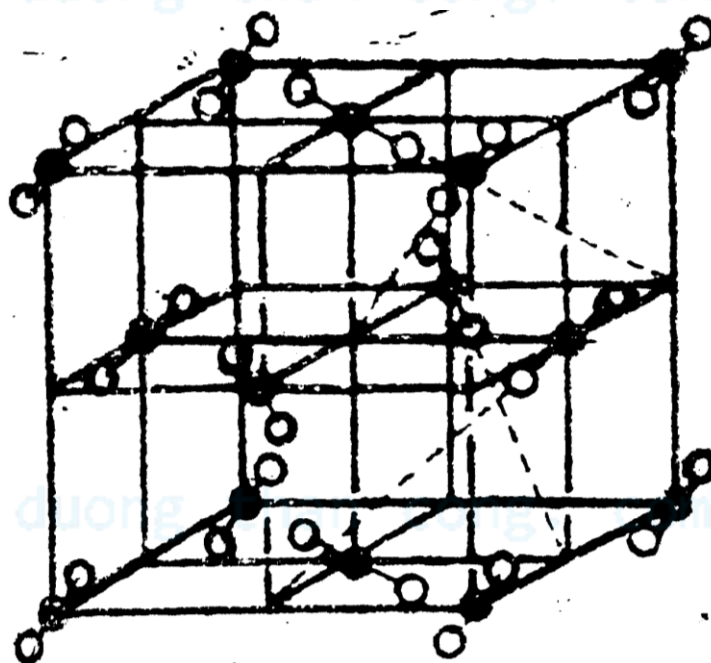
- Trong kiểu cấu trúc này , các nguyên tử thường tập hợp thành từng nhóm biệt lập gọi là phân tử. Lực liên kết các nguyên tử ấy thành phân tử (thường là liên kết đồng hoá trị) thường mạnh hơn rất nhiều lực liên kết các phân tử thành tinh thể (thường là lực van der Waals). Các nguyên tử trong phân tử cách nhau một khoảng ngắn hơn nhiều so với những phân tử
- Các phân tử có thể gồm 2 nguyên tử, 3 nguyên tử: CO_2 , H_2O , F_2O , H_2S , 4 nguyên tử như NH_3 , PH_3 , BF_3 , BCl_3 , 5 nguyên tử như CH_4 , CCl_4 , SiCl_4 ..., hoặc nhiều hơn như S tạo thành phân tử gồm 8 nguyên tử...
- Các phân tử có xu hướng tập hợp theo quy luật xếp cầu lý tưởng



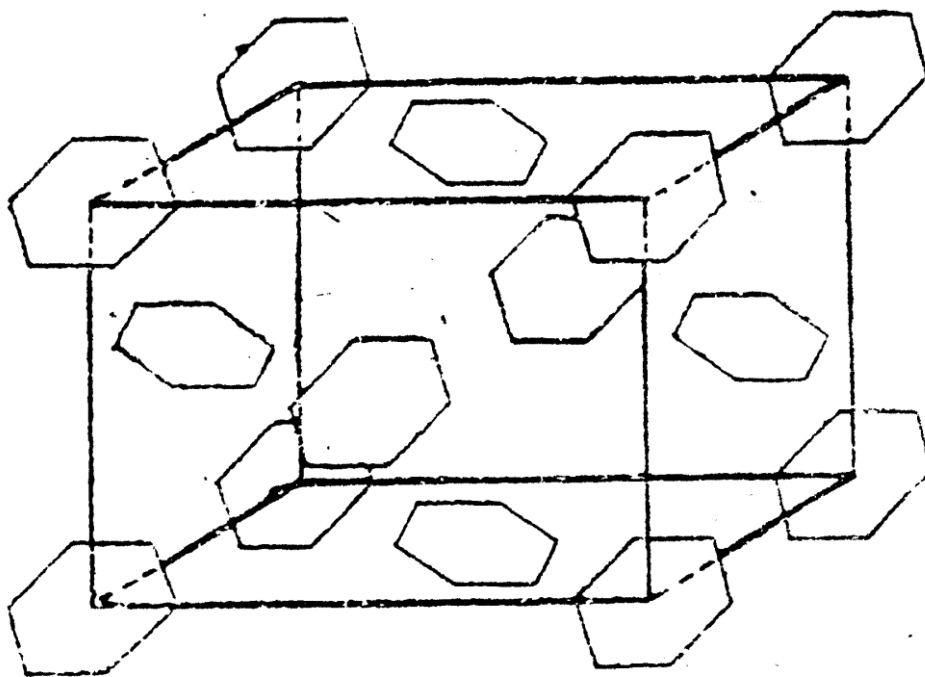
tinh thể I_2 mạng trực thoi tâm diện



Tám nguyên tử lưu hình sắp xếp trên hai mặt phẳng song song tạo thành phân tử S₈ dạng vòng hai tầng. Những phân tử này chồng thành dãy dọc đường chéo, mặt đáy, các dãy lại sắp xếp song song với nhau tạo thành tầng.



tinh thể CO₂



tinh thể bezen mạng trực thoi tâm diện