Dao động tử điều hòa
Harmonic oscillator

"Công việc" trong Cơ lượng tử

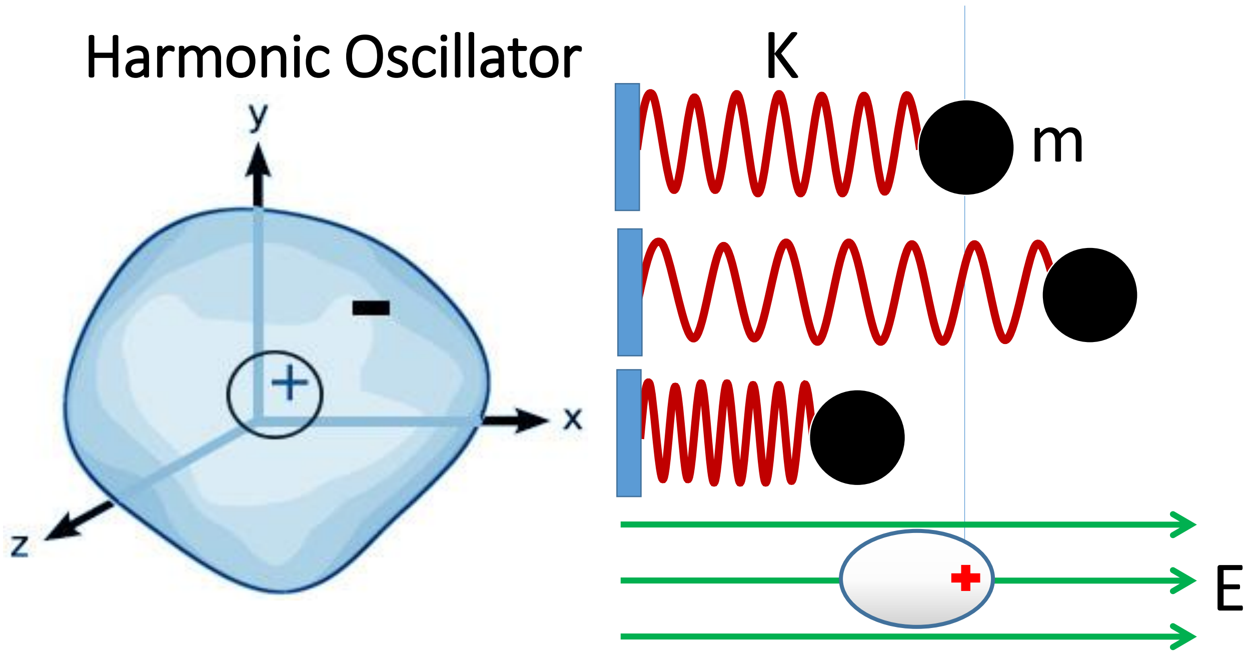
- Xác định bài toán vật lý
- Hamiltonian H → Phương trình Schrödinger
- Xác định hàm sóng ψ và năng lượng E

$$\boxed{\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}}$$

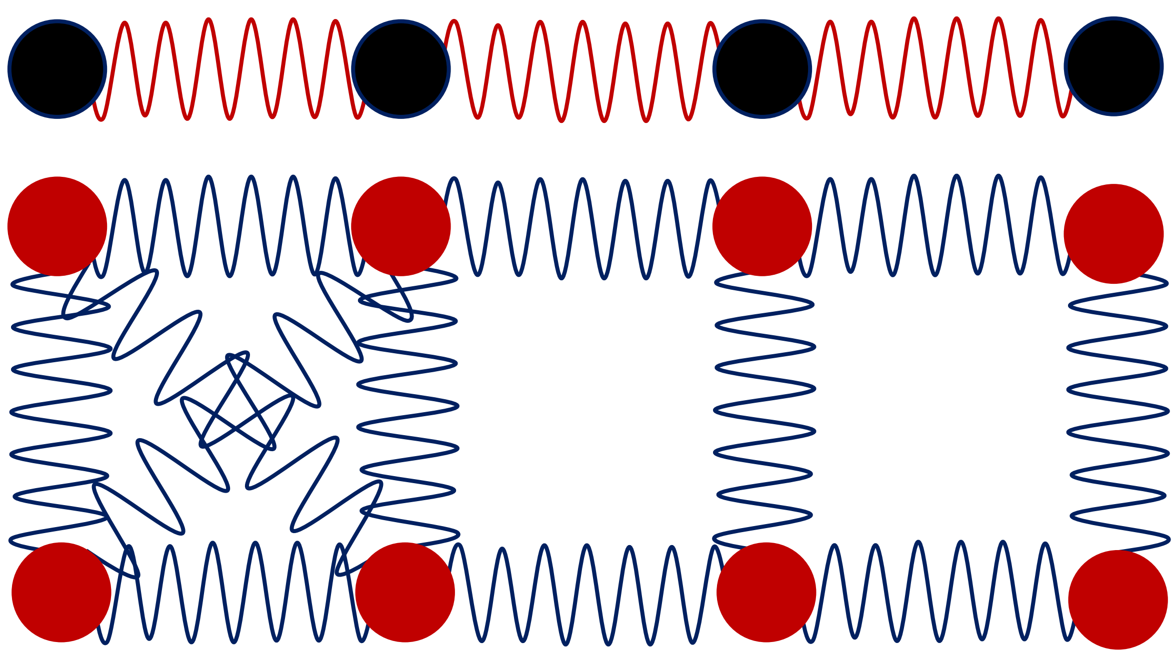
$$\Psi(x,t) = \sum_n \psi_n(x)e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$$

$$\boxed{\langle Q(x,p)\rangle = \int \Psi(x,t)^* Q(x,p)\Psi(x,t)}$$

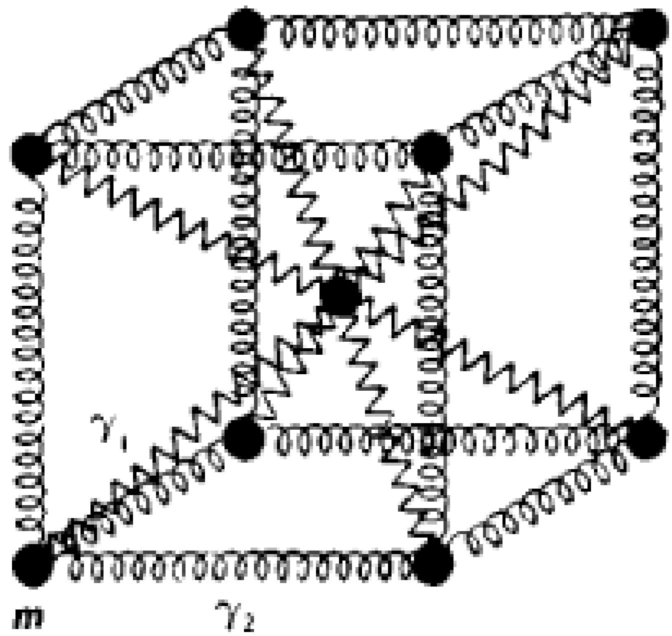
Harmonic Oscillator



3



4



Cơ cổ điển

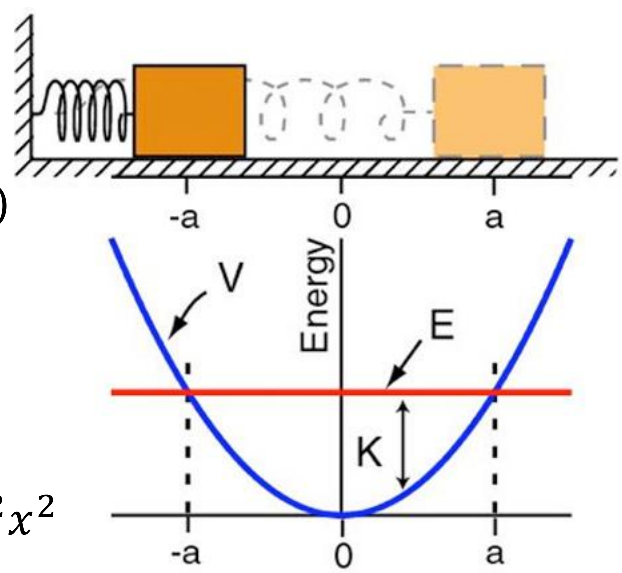
$$F = -kx = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

$$x(t) = A\sin(\omega t) + B\cos(\omega t)$$

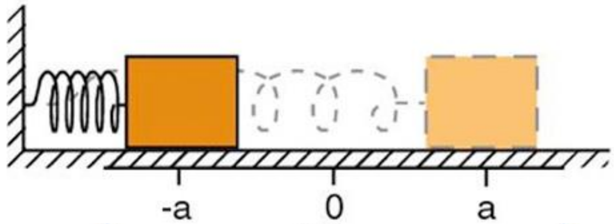
$$\omega \equiv \sqrt{k/m}$$

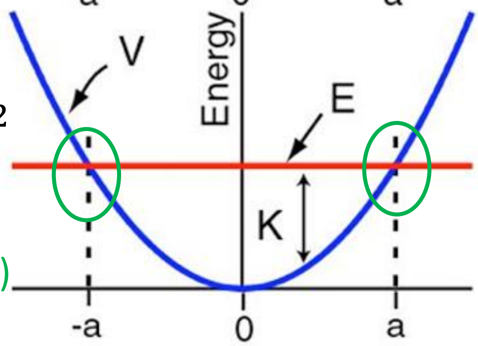
$$V = \frac{1}{2}kx^2$$

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$



Cơ cổ điển



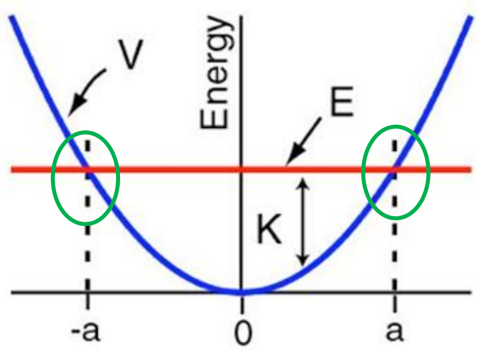


$$V = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Điểm quay đầu cổ điển/
classical turning point (CTP)

Xác định ?

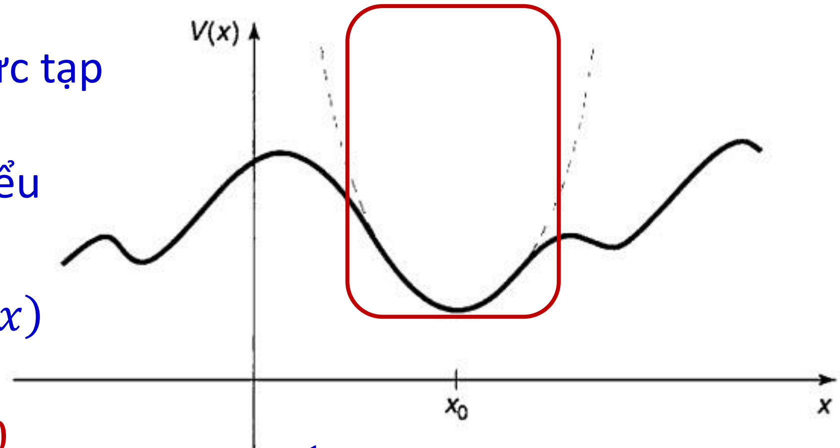
Cơ cổ điển



Classical mechanics: Xác suất tìm được hạt trong miền giữa 2 CTP $[-a \rightarrow\ a]$ là 1 (chắc chắn tìm được hạt trong miền này) → Miền này gọi là miền được phép (cổ điển). Miền ngoài miền được phép, tức là miền $[-\infty \rightarrow -a]$ và $[a \rightarrow +\infty]$, được gọi là miền cấm (cổ điển) vì xác suất tìm được hạt ở đó bằng 0.

Quantum mechanics: Vẫn có thể tìm được hạt ở miền cấm!!

- Hàm thế có thể phức tạp
- $V(x) \sim$ thế parabol trong lân cận cực tiểu



- Khai triển Taylor $V(x)$ quanh cực tiểu:

$$V(x) = \overbrace{V(x_0)}^{\text{Const.}} + \overbrace{V'(x_0)}^{0}(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \ldots$$

$$V(x) \cong \frac{1}{2}\underbrace{\boxed{V''(x_0)}}_{k}(x - x_0)^2 = \frac{1}{2}kx^2 \quad \boxed{= \frac{1}{2}m\omega^2 x^2}$$

Năng lượng toàn phần (cơ cổ điển)

$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Cơ lượng tử

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Cơ lượng tử

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

PT Schrödinger không phụ thuộc thời gian: $\hat{H}\psi = E\psi$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi = E\psi$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi = E\psi} \qquad [2.44]$$

Giải phương trình Schrödinger cho DĐTĐH

- Cách giải đại số / Algebraic Method
- Cách giải tích / Analytic Method [Read Griffiths book!]

1) Đổi biến: $(x, p) \to (a_+, a_-)$ (toán tử bậc thang)
2) Viết Hamiltonian $H(x, p)$ theo $H(a_+, a_-)$
3) PT Schroedinger $H\psi = E\psi$
4) Xác định hàm sóng ψ và năng lượng E

Biến đổi tọa độ suy rộng → toán tử bậc thang

PT Schrödinger KPTTG

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

$$\hat{H}\psi = E\psi \leftrightarrow \frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2]\psi = E\psi \qquad [2.45]$$

$$H = \frac{1}{2m}[\underbrace{p^2}_{u^2} + \underbrace{(m\omega x)^2}_{v^2}] \qquad [2.46]$$

SỐ: $u^2 + v^2 = (iu + v)(-iu + v) = u^2 + v^2 + i(\cancel{u}v - v\cancel{u})$

TTỬ: $u^2 + v^2 \neq (iu + v)(-iu + v) = u^2 + v^2 + i(uv - vu)$

Toán tử thường không giao hoán $\rightarrow uv - vu \neq 0$

Ví dụ: xp khác px !

Giải PT Sch. – cách đại số [toán tử bậc thang]

$$H = \frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2]$$

$$\underbrace{(iu + v)}_{A_-}\underbrace{(-iu + v)}_{A_+} = u^2 + v^2 + i(uv - vu)$$

$$\boxed{a_\pm = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp ip + m\omega x)} \qquad [2.47]$$

$$a_+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-ip + m\omega x) \qquad a_- = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(+ip + m\omega x)$$

Giải PTS – cách đại số [toán tử bậc thang]

$$\boxed{a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp ip + m\omega x)}$$

$$a_{-}a_{+} = \frac{1}{2\hbar m\omega}(+ip + m\omega x)(-ip + m\omega x)$$

$$a_{-}a_{+} = \frac{1}{2\hbar m\omega}[p^2 + (m\omega x)^2 - im\omega(xp - px)]$$

Giao hoán tử

Giao hoán tử của hai toán tử A và B là

$$[A, B] \equiv AB - BA \qquad [2.48]$$

Giao hoán tử bằng 0 → hai toán tử này được gọi là giao hoán với nhau (có thể đổi chỗ cho nhau):

$$[A, B] = AB - BA = 0 \; \rightarrow AB = BA$$

$$a_{-}a_{+} = \frac{1}{2\hbar m\omega}[p^2 + (m\omega x)^2 - im\omega\underbrace{(xp - px)}_{[x,p]}]$$

$$a_{-}a_{+} = \frac{1}{2\hbar m\omega}[p^2 + (m\omega x)^2] - \frac{i}{2\hbar}[x, p] \qquad [2.49]$$

Xác định giao hoán tử

$$[A, B] = ?$$

Tác động giao hoán tử lên 1 hàm thử: $[A, B]f(x)$

$$[A, B]f(x) = (AB - BA)f(x) = ABf(x) - BAf(x)$$

$$= A\big(Bf(x)\big) - B\big(Af(x)\big) = Xf(x) \qquad \rightarrow [A, B] = X$$

Xác định giao hoán tử $[x, p]$

$$[x, p]f(x) = \left[x\frac{\hbar}{i}\left(\frac{d}{dx}f(x)\right) - \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(xf(x))\right] \qquad p = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$$

$$= \left[\cancel{x\frac{\hbar}{i}\left(\frac{d}{dx}f(x)\right)} - \frac{\hbar}{i}\left(\frac{d}{dx}x\right)f(x) - \cancel{\frac{\hbar}{i}x\left(\frac{d}{dx}f(x)\right)}\right] \qquad [2.50]$$

$$= -\frac{\hbar}{i}f(x) = i\hbar f(x)$$

$$\boxed{[x, p] = i\hbar} \qquad [2.51]$$

Hamiltonian theo a_- và a_+

$$a_-a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega}[p^2 + (m\omega x)^2] - \frac{i}{2\hbar}[x, p]$$

$$a_-a_+ = \frac{1}{\hbar\omega}\underbrace{\frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2]}_{H} - \frac{i}{2\hbar}i\hbar$$

$$a_-a_+ = \frac{1}{\hbar\omega}H + \frac{1}{2} \qquad [2.52]$$

$$H = \hbar\omega\left(a_-a_+ - \frac{1}{2}\right) \qquad [2.53]$$

Tính Hamiltonian theo a_- và a_+

$a_+a_- = ?$ $\qquad a_\pm = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp ip + m\omega x)$

$$a_+a_- = \frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2} \qquad [2.54]$$

$$[a_-, a_+] = 1 \qquad [2.55]$$

$$H = \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right) \qquad [2.56]$$

PT Schroedinger theo a_- và a_+

$$H\psi = \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi$$

$$H\psi = \hbar\omega\left(a_-a_+ - \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi$$

$$\boxed{\hbar\omega\left(a_\pm a_\mp \pm \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi} \qquad [2.57]$$

Xác định hàm sóng – bước 1

Nếu hàm sóng ψ thỏa PT Schroedinger $H\psi = E\psi$
thì $a_+\psi$ thỏa PT $H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$
và $a_-\psi$ thỏa PT $H(a_-\psi) = (E - \hbar\omega)(a_-\psi)$

Chứng minh $H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$

$H = \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)$ [2.56]

$$VT = Ha_+\psi = \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)a_+\psi = \hbar\omega\left(a_+a_-a_+ + \frac{1}{2}a_+\right)\psi$$

$$= \hbar\omega a_+\left(a_-a_+ + \frac{1}{2}\right)\psi = \hbar\omega a_+\left(\underbrace{a_-a_+}_{a_+a_-+1} + \frac{1}{2}\right)\psi$$

$$= a_+\hbar\omega\left[\left(a_+a_- + \frac{1}{2} + 1\right)\right]\psi$$

$[a_-, a_+] = a_-a_+ - a_+a_- = 1$

$$= a_+\left[\underbrace{\hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)\psi}_{H\psi=E\psi} + \hbar\omega\psi\right] = a_+(E + \hbar\omega)\psi$$

$$= (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$$

Chứng minh $H(a_-\psi) = (E - \hbar\omega)(a_-\psi)$

$$Ha_-\psi = \hbar\omega\left(a_-a_+ - \frac{1}{2}\right)a_-\psi = \hbar\omega\left(a_-a_+a_- - \frac{1}{2}a_-\right)\psi$$

$$= \hbar\omega a_-\left(\underbrace{a_+a_-}_{a_-a_+-1} - \frac{1}{2}\right)\psi = a_-\hbar\omega\left(a_-a_+ - \frac{1}{2} - 1\right)\psi$$

$$= a_-\left[\underbrace{\hbar\omega\left(a_-a_+ - \frac{1}{2}\right)\psi}_{H\psi=E\psi} - \hbar\omega\psi\right] = a_-(E - \hbar\omega)\psi$$

$$= (E - \hbar\omega)(a_-\psi)$$

Xác định hàm sóng – bước 1

Nếu hàm sóng ψ thỏa PT Schroedinger $H\psi = E\psi$
thì $a_+\psi$ thỏa PT $H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$
và $a_-\psi$ thỏa PT$H(a_-\psi) = (E - \hbar\omega)(a_-\psi)$

Xác định hàm sóng – bước 1

$H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$

$H(a_+(a_+\psi))$
$= (E + \hbar\omega + \hbar\omega)(a_+(a_+\psi))$
$H\left(a_+^2\psi\right) = (E + 2\hbar\omega)\left(a_+^2\psi\right)$

$H(a_+^n\psi) = (E + n\hbar\omega)(a_+^n\psi)$

a_+ giúp tăng thêm 1 lượng $\hbar\omega$: leo lên thêm 1 bậc năng lượng $\hbar\omega$. a_+: toán tử tăng

a_+: toán tử tăng

Xác định hàm sóng – bước 1

$$H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$$

$$H(a_+(a_+\psi)) = (E + \hbar\omega + \hbar\omega)(a_+(a_+\psi))$$
$$H(a_+^2\psi) = (E + 2\hbar\omega)(a_+^2\psi)$$
$$H(a_+^n\psi) = (E + n\hbar\omega)(a_+^n\psi)$$

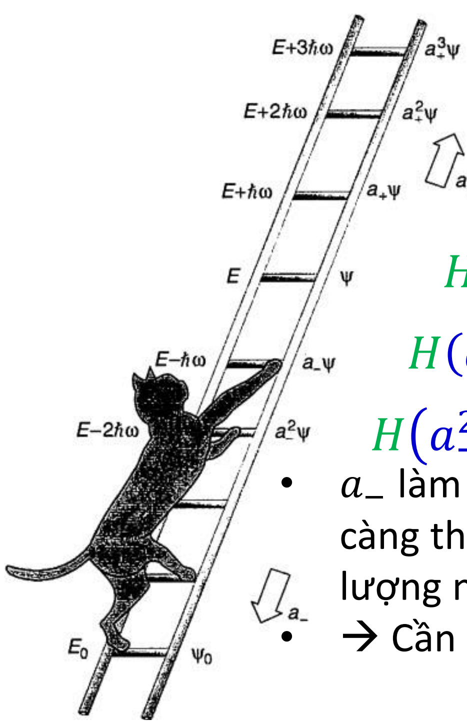
a_+ giúp tăng thêm 1 lượng $\hbar\omega$: leo lên thêm 1 bậc năng lượng $\hbar\omega$. a_+: toán tử tăng

$$H(a_-\psi) = (E - \hbar\omega)(a_-\psi)$$

$$H(a_-^2\psi) = (E - 2\hbar\omega)(a_-^2\psi)$$
...
$$H(a_-^n\psi) = (E - n\hbar\omega)(a_+^n\psi)$$

a_- giúp giảm đi 1 lượng $\hbar\omega$: leo xuống 1 bậc năng lượng $\hbar\omega$. a_-: toán tử giảm

a_+, a_- được gọi là toán tử bậc thang (hay toán tử sinh hủy)



$$H(a_+^n\psi) = (E + n\hbar\omega)(a_+^n\psi)$$
$$H(a_+^2\psi) = (E + 2\hbar\omega)(a_+^2\psi)$$
$$H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$$
$$H\psi = E\psi$$
$$H(a_-\psi) = (E - \hbar\omega)(a_-\psi)$$
$$H(a_-^2\psi) = (E - 2\hbar\omega)(a_-^2\psi) \ldots$$

- a_- làm giảm 1 lượng $\hbar\omega$: càng xuống năng lượng càng thấp dần → xuống trạng thái trạng với năng lượng nhỏ hơn 0!! (không tồn tại)
- → Cần có "nấc" (trạng thái) thấp nhất ψ_0 sao cho

$$a_-\psi_0 = 0$$

Xác định hàm sóng – bước 2

- a_- làm giảm đi 1 lượng $\hbar\omega$: càng xuống năng lượng càng thấp dần → xuống trạng thái trạng với năng lượng nhỏ hơn 0!! (không tồn tại)
- → Cần có "nấc" (trạng thái) thấp nhất ψ_0 sao cho

$$a_-\psi_0 = 0 \qquad [2.58]$$

$\psi_0 = ?$

$$a_-\psi_0 = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(ip + m\omega x)}_{a_-}\psi_0 \qquad p = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\psi_0 = 0$$

33

Xác định hàm sóng – bước 2

$$\left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\psi_0 = 0 \iff \frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0$$

$$\int\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}\int xdx \implies ln\,\psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + hằng\ số$$

$\implies \psi_0 = Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ với A là hằng số

34

Xác định hàm sóng – bước 2

Tìm A từ đk chuẩn hóa:

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}$$

$$\boxed{\Longrightarrow \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}} \qquad [2.59]$$

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 3

Năng lượng E_0 tương ứng với trạng thái $\psi_0(x)$

$$H\,\psi_0 = E_0\,\psi_0$$

$$\hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)\psi_0 = E_0\,\psi_0$$

$$a_-\,\psi_0 = 0 \Longrightarrow \frac{1}{2}\hbar\omega\,\psi_0 = E_0\,\psi_0$$

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad [2.60]$$

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 4

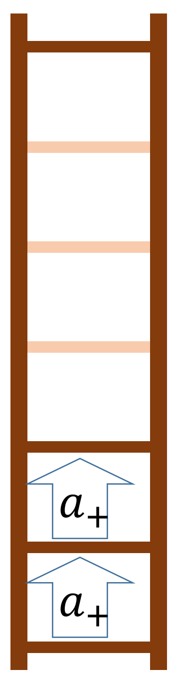
Xác định trạng thái và năng lượng thứ n: $\psi_n(x)$, E_n

$$E_n = \frac{1}{2}\hbar\omega + n\hbar\omega$$

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

$$E_0 + n\hbar\omega = E_n \qquad \psi_n = A_n a_+^n\,\psi_0$$

$$\vdots \qquad \vdots$$



$$E_0 + 2\hbar\omega = E_2 \qquad \psi_2 = A_2 a_+^2\,\psi_0$$

$$E_0 + \hbar\omega = E_1 \qquad \psi_1 = A_1 a_+\,\psi_0$$

$$\frac{1}{2}\hbar\omega = E_0 \qquad \psi_0$$

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 4

Trạng thái $\psi_n(x)$ và năng lượng E_n

$$\boxed{\psi_n(x) = A_n a_+^n \, \psi_0(x) \quad \text{với} \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega} \qquad [2.61]$$

A_n là hằng số chuẩn hóa

Tìm trạng thái kích thích thứ nhất

$\psi_1(x) = ?$

$$\psi_1(x) = A_1 a_+ \; \psi_0(x)$$

$$a_+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-ip + m\omega x)$$

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Tìm trạng thái kích thích thứ nhất

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$\psi_1(x) = A_1 a_+\ \psi_0(x) = A_1 \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-ip + m\omega x)\ \psi_0(x)$$

$$\psi_1(x) = A_1 \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

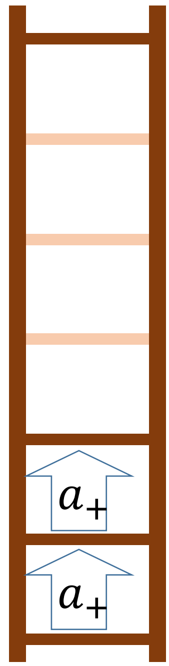
$$= A_1 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\, x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \qquad [2.62]$$

Chuẩn hóa: $\int |\ \psi_1(x)|^2 dx = 1$ cho $A_1 = 1$

Nhận xét

- Mỗi lần tính $\psi_n(x)$ cần xác định hằng số chuẩn hóa A_n bằng việc dung điều kiện chuẩn hóa [trong đó có tính tích phân] $\int |\ \psi_n(x)|^2 dx = 1$
- Sau đây sẽ chứng minh vài tính chất của hàm riêng, qua đó có thể tính được A_n

$E_0 + n\hbar\omega = E_n$ $\quad$ $\psi_n = A_n a_+^n\ \psi_0 = B_n a_+\ \psi_{n-1}$



$\psi_3 = A_3 a_+^3\ \psi_0 = B_3 a_+\ \psi_2$

$E_0 + 2\hbar\omega = E_2$ $\quad$ $\psi_2 = A_2 a_+^2\ \psi_0 = B_2 a_+\ \psi_1$

$E_0 + \hbar\omega = E_1$ $\quad$ $\psi_1 = A_1 a_+\ \psi_0$

$\frac{1}{2}\hbar\omega = E_0$ $\quad$ ψ_0

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 5

Xác định hằng số chuẩn hóa A_n

Toán tử a_+ giúp lên một "nấc", tức là a_+tác động lên trạng thái thứ n thì sẽ cho ra trạng thái thứ $n+1$: $a_+\psi_n = c_n\psi_{n+1}$

Toán tử a_- giúp xuống một "nấc", tức là a_-tác động lên trạng thái thứ n thì sẽ cho ra trạng thái thứ $n-1$: $a_-\psi_n = d_n\psi_{n-1}$

Với c_n, d_n là những giá trị cần được xác định.

$$\boxed{a_+\psi_n = c_n\psi_{n+1}, \qquad a_-\psi_n = d_n\psi_{n-1}} \qquad [2.63]$$

CM được: $|c_n|^2 = (n+1)$ và $|d_n|^2 = n$ (xem dẫn ra ở trang sau)

$$\boxed{\rightarrow a_+\psi_n = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1},\ \ a_-\psi_n = \sqrt{n}\,\psi_{n-1}} \qquad [2.66]$$

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 5

Tìm c_n, d_n trong công thức [2.63]

$$a_+\psi_n = c_n\psi_{n+1}, \qquad a_-\psi_n = d_n\psi_{n-1} \qquad [2.63]$$

Sử dụng những công thức sau trong việc tìm c_n, d_n:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_\pm g)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_\mp f)^* g\,dx \qquad [2.64]$$

và $a_+a_-\psi_n = n\psi_n\,,\ a_-a_+\psi_n = (n+1)\psi_n$ [2.65]

"Bài tập nhỏ": CM [2.64] và [2.65]!

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*[a_+g]\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} f^*\left[\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)g\right]dx \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}B$$

$$B = \int_{-\infty}^{\infty} f^*\left(-\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)g dx = \int_{-\infty}^{\infty}\left(\hbar\left(\frac{df}{dx}\right)^* + m\omega x f^*\right)g\,dx$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*\frac{dg}{dx}dx = [f^*g]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}\frac{df^*}{dx}g\,dx = -\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{df}{dx}\right)^* g\,dx$$

$[f^*g]_{-\infty}^{+\infty} = 0$ do $x \to \pm\infty$ thì $f\ \ , g \to 0$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\left[\left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)f\right]^* g\,dx$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}B = \int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)f\right]^* g\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}[a_-f]^*g\,dx$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*[a_+g]\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}[a_-f]^*g\,dx$$

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 5

Đã có: $\int_{-\infty}^{\infty} f^*\left(a_\pm g\right) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_\mp f)^* g\, dx$ [2.64]

Xét trường hợp: $f = a_\pm \psi_n,\ g = \psi_n$

→ $\int_{-\infty}^{\infty} \left(a_\pm \psi_n\right)^* \left(a_\pm \psi_n\right) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_\mp a_\pm \psi_n)^* \psi_n\, dx$

Viết tách ra thành:

$$\int_{-\infty}^{\infty} (a_+\psi_n)^*(a_+\psi_n)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_- a_+ \psi_n)^* \psi_n\, dx$$

[2.64a]

$$\int_{-\infty}^{\infty} (a_-\psi_n)^*(a_-\psi_n)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_+ a_- \psi_n)^* \psi_n\, dx$$

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 5

$$\int_{-\infty}^{\infty} (a_+\psi_n)^*(a_+\psi_n)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_- a_+ \psi_n)^* \psi_n\, dx$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} (a_-\psi_n)^*(a_-\psi_n)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_+ a_- \psi_n)^* \psi_n\, dx$$
[2.64a]

Dùng

$a_+ a_- \psi_n = n\psi_n$ và $a_- a_+ \psi_n = (n+1)\psi_n$ (2.65) cho VP của 2.64a,
và $a_+\psi_n = c_n \psi_{n+1},\ a_-\psi_n = d_n \psi_{n-1}$(2.63) cho VT của 2.64a, ta được:

$$\boxed{\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{\infty} (a_+\psi_n)^*(a_+\psi_n)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_- a_+ \psi_n)^* \psi_n\, dx\\ &\Leftrightarrow |c_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n+1}|^2\, dx = (n+1) \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2\, dx\end{aligned}}$$

[2.64b]

$$\boxed{\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{\infty} (a_-\psi_n)^*(a_-\psi_n)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_+ a_- \psi_n)^* \psi_n\, dx\\ &\Leftrightarrow |d_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n-1}|^2\, dx = n \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2\, dx\end{aligned}}$$

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 5

Với ĐK chuẩn hoá:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n+1}|^2\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n-1}|^2\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2\, dx = 1$$

$2.64b$ → $|c_n|^2 = (n+1)$ và $|d_n|^2 = n$

$$\Longrightarrow a_+\psi_n = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}, \quad a_-\psi_n = \sqrt{n}\,\psi_{n-1} \qquad [2.66]$$

CM 2.65

$$\hbar\omega\left(a_\pm a_\mp \pm \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi \Longrightarrow \hbar\omega\left(a_\pm a_\mp \pm \frac{1}{2}\right)\psi_n = E_n\,\psi_n$$

$\psi_n(x) = A_n a_+^n\, \psi_0(x)$ với $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$

$$\Longrightarrow \hbar\omega\left(a_\pm a_\mp \pm \frac{1}{2}\right)\psi_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\psi_n$$

$$\Longrightarrow \left(a_\pm a_\mp \pm \frac{1}{2}\right)\psi_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\psi_n$$

$\Longrightarrow a_+a_-\psi_n = n\psi_n$ và $a_-a_+\psi_n = (n+1)\psi_n$ [2.65]

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 5

$a_+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}$ (2.66) $\rightarrow$ $\psi_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} a_+\psi_n$

$$\Longrightarrow \psi_1 = a_+\psi_0 \Longrightarrow \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} a_+\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} a_+a_+\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2!}}(a_+)^2\psi_0$$

$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} a_+\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3.2}}(a_+)^3\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{3!}}(a_+)^3\psi_0,$$

$$\psi_4 = \frac{1}{\sqrt{4}} a_+\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{4.3.2}}(a_+)^4\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{4!}}(a_+)^4\psi_0$$

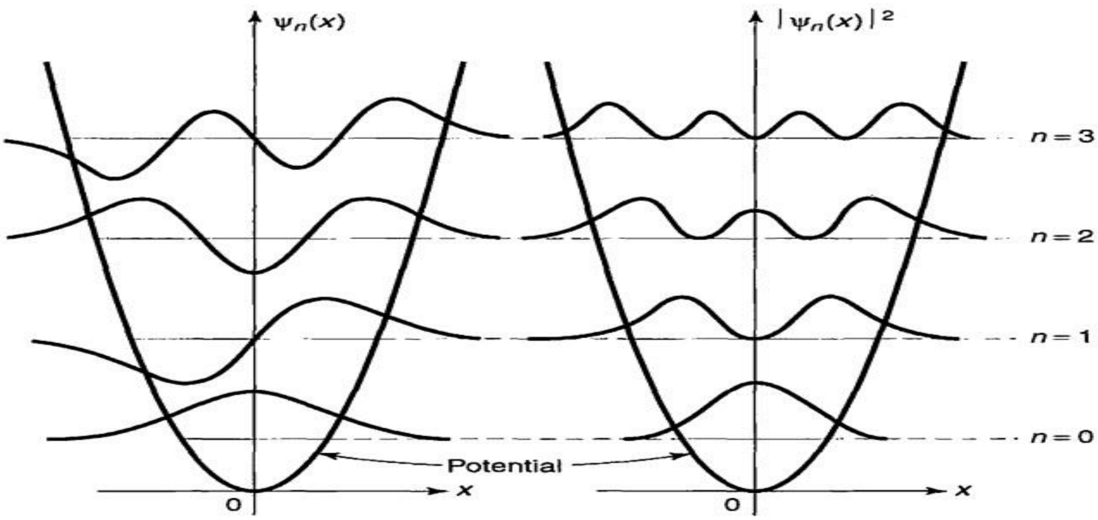
$$\boxed{\Longrightarrow \psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a_+)^n\psi_0} \qquad [2.67]$$

Trực chuẩn của hàm sóng

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn} \quad [2.68]$$

"Bài tập nhỏ": CM [2.68]

Hàm sóng và mật độ xác suất (sách Griffiths)



(a)

Bài tâp/Ví dụ

- Tìm hàm sóng ở trạng thái kích thích thứ 2.
- Tìm giá trị trung bình của động năng ở trạng thái thứ n của dao động tử điều hòa.
- Tìm giá trị trung bình của thế năng ở trạng thái thứ n của dao động tử điều hòa.

- Động năng (cổ điển): $T = \frac{p^2}{2m}$ → Động năng (lượng tử): $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$
- Trung bình của động năng ở trạng thái thứ n:

$$\langle \hat{T} \rangle_n = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \frac{p^2}{2m} \psi_n \, dx = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \, p^2 \psi_n \, dx$$

(đã tạm bỏ mũ nơi toán tử $\hat{p}$)

- Xác định toán tử p (và x) qua toán tử bậc thang:

$a_+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-ip + m\omega x)$ và $a_- = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(ip + m\omega x)$

→ $p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a_+ - a_-),\ x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_+ + a_-)$ [2.69]

Tính p^2 → $\langle \hat{T} \rangle_n$ [khi tính toán, dùng đk trực chuẩn 2.68]

- $p^2 = pp = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a_+ - a_-)i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a_+ - a_-)$
- Sử dụng: $a_+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}$, $a_-\ \psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}$
- Dùng điều kiện trực chuẩn: $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn}$
- Hai số hạng đầu của p^2 → 0, số hạng thứ 3 → n, và số hạng cuối cho $n + 1$

$$\rightarrow \langle \hat{T} \rangle_n = \frac{1}{2m}\frac{\hbar m\omega}{2}(n + n + 1) = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Xin làm lại thật chi tiết lại bài tập này!

Bài tâp/Ví dụ

- Tìm giá trị trung bình của thế năng ở trạng thái thứ n của dao động tử điều hòa.

- Thế năng: $\hat{V} = V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ (x là toán tử!)
- Trung bình của động năng ở trạng thái thứ n:
- $\langle \hat{V} \rangle_n = \left\langle \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right\rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi_n \, dx = \frac{1}{2}m\omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \, x^2 \psi_n \, dx$ (*)

Dùng công thức $x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_+ + a_-)$ [2.69]

Tính x^2 và thế vào tích phân (*). Tính tương tự bài toán động năng trung bình…