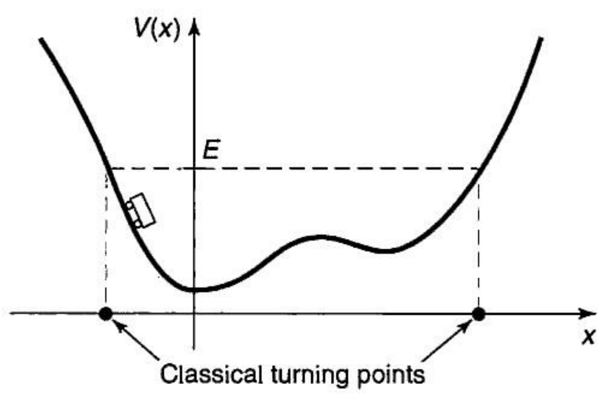
Thế dạng hàm Delta

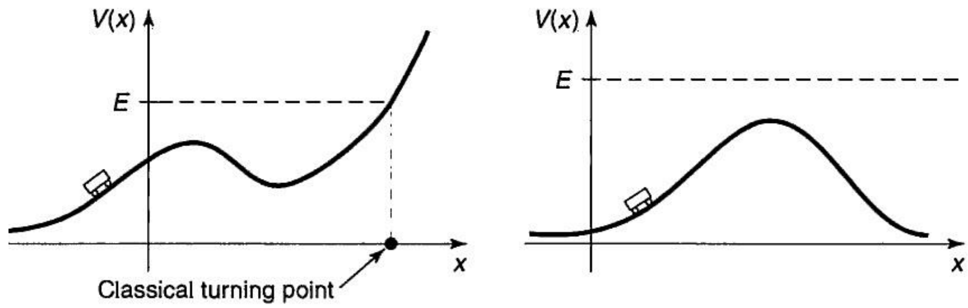
1



(a)

$E < V(-\infty)$ and $V(+\infty) \Rightarrow$
trạng thái liên kết [trạng thái rời rạc]

2

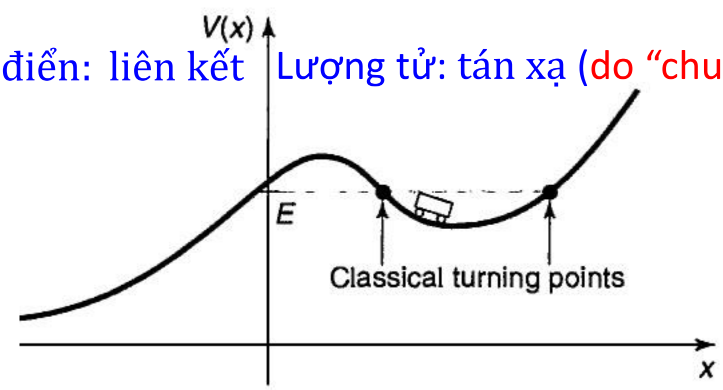


(b)

$E > V(-\infty)$ or $V(+\infty)$ $\Rightarrow$ trạng thái tán xạ
còn gọi là trạng thái liên tục

3

Cổ điển: liên kết | Lượng tử: tán xạ (do "chui hầm")



(c)

$$\begin{cases} E < V(-\infty) \text{ and } V(+\infty) & \Rightarrow \text{trạng thái liên kết} \\ E > V(-\infty) \text{ or } V(+\infty) & \Rightarrow \text{trạng thái tán xạ} \end{cases}$$

$$V(\pm\infty) \to 0 \Rightarrow \begin{cases} E < 0 & \Rightarrow \text{trạng thái liên kết} \\ E > 0 & \Rightarrow \text{trạng thái tán xạ} \end{cases}$$

4

Nhắc lại: 2 loại phương trình vi phân phổ biến

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -\boldsymbol{k^2}\psi \qquad \text{với } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (k > 0)$$

Nghiệm:

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

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \boldsymbol{\kappa^2}\psi \qquad \text{với } \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \; (>0)$$

Nghiệm: $\psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}$

5

Giếng dạng hàm Delta

Hàm Delta

$$\delta(x) \equiv \begin{cases} \infty, & x = 0 \\ 0, & x \neq 0 \end{cases} \quad \text{với} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)dx = 1$$

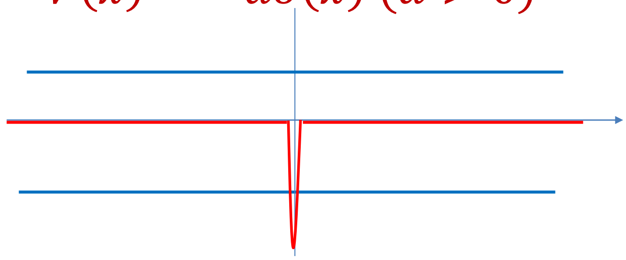
$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a)\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a)dx = f(a)$$

6

Thế dạng Delta

$$V(x) = -\alpha\delta(x)\ (\alpha > 0) \qquad [2.114]$$



PT Schroedinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha\delta(x)\psi = E\psi \qquad [2.115]$$

Cần xét trạng thái liên kết [rời rạc] ($E < 0$) và trạng thái tán xạ [liên tục] ($E > 0$)

7

Xét trạng thái liên kết: $E < 0$.

Xét 3 miền $x < 0, x > 0$ và (lân cận) $x = 0$

1. Trong miền $x < 0$: $V(x) = 0$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \kappa^2\psi \qquad [2.116]$$

$$\text{với } \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} > 0 \quad [2.117]$$

Nghiệm: $\psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}$ [2.118]

Chọn $A = 0$ để loại phân kỳ $x \to -\infty, e^{-\kappa x} \to \infty$

$$\Rightarrow \psi(x) = Be^{\kappa x}, \ (x < 0) \qquad [2.119]$$

8

2. Trong miền $x > 0$: $V(x) = 0$

Nghiệm: $\psi(x) = Fe^{-\kappa x} + Ge^{\kappa x}$ [2.118]

$\Rightarrow \psi(x) = Fe^{-\kappa x},\ (x > 0)$ [2.120]

$\psi(x) = Be^{\kappa x},\ (x < 0)$ [2.119]

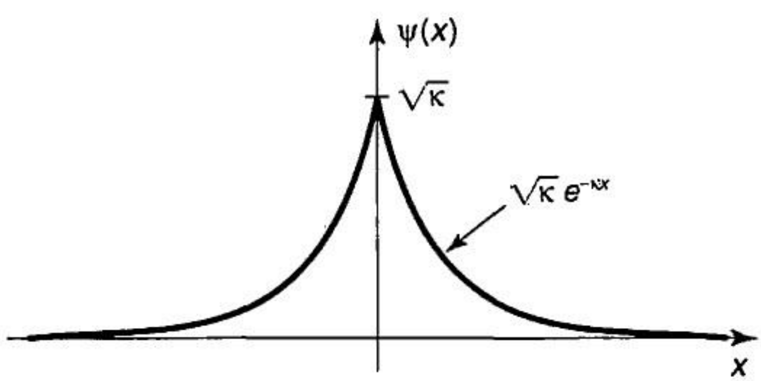
Sử dụng các ĐK biên:

1. ψ liên tục (cách riêng tại $x = 0$) [2.121]
2. $\frac{d\psi}{dx}$ liên tục (\ những điểm thế ∞)

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{\kappa x} & x \leq 0 \\ Be^{-\kappa x}, & x \geq 0 \end{cases}$$ [2.122]

9

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{\kappa x} & x \leq 0 \\ Be^{-\kappa x}, & x \geq 0 \end{cases}$$



$B = ?\ E = ?\ (\kappa = ?)$

10

3. Xét miền (lân cận) $x = 0$

Lấy tích phân từ $-\epsilon$ đến $+\epsilon$ (với $\epsilon \to 0$) hai vế phương trình Schrödinger không phụ thuộc t

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi + V(x)\psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\frac{d^2\psi}{dx^2}dx + \int_{-\epsilon}^{+\epsilon}V(x)\psi(x)dx = E\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi(x)dx$$

[2.123]

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi(x)dx \xrightarrow{\epsilon\to 0} \mathbf{0}$$

$$V(x) = -\alpha\delta(x) \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a)$$

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}V(x)\psi(x)dx = -\alpha\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\delta(x)\psi(x)dx = -\boldsymbol{\alpha\psi(0)}$$

11

$$\Rightarrow \int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\frac{d^2\psi}{dx^2}dx = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0)$$

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\frac{d^2\psi}{dx^2}dx = \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{-\epsilon}^{+\epsilon} = \lim_{\epsilon\to 0}\left(\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{+\epsilon} - \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{-\epsilon}\right)$$

$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) \equiv \lim_{\epsilon\to 0}\left(\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{+\epsilon} - \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{-\epsilon}\right)$$

[2.124]

$$\lim_{\epsilon\to 0}\left(\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{+\epsilon} - \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{-\epsilon}\right) = \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x\to 0^+} - \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x\to 0^-}$$

$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0) \qquad [2.125]$$

12

$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0) \qquad [2.125]$$

Đã có: $\psi(x) = \begin{cases} Be^{\kappa x} & x \le 0 \\ Be^{-\kappa x}, & x \ge 0 \end{cases}$

$$\Rightarrow \begin{cases} \dfrac{d\psi}{dx} = -B\kappa e^{-\kappa x}, (x > 0) & \rightarrow \left.\dfrac{d\psi}{dx}\right|_{x\to 0^+} = -B\kappa \\ \dfrac{d\psi}{dx} = +B\kappa e^{+\kappa x}, (x < 0) & \rightarrow \left.\dfrac{d\psi}{dx}\right|_{x\to 0^-} = +B\kappa \end{cases}$$

$$\Rightarrow \Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x\to 0^+} - \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x\to 0^-} = -2B\kappa$$

Có: $\psi(0) = B$

$$\Rightarrow -2B\kappa = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}B \qquad \Rightarrow \kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \qquad [2.126]$$

13

$$\Rightarrow E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \qquad [2.127]$$

Chuẩn hóa:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 2|B|^2 \int_0^{+\infty} e^{-2\kappa x} dx = \frac{|B|^2}{\kappa}$$

$$\Rightarrow B = \sqrt{\kappa} = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} \qquad [2.128]$$

$$\boxed{\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2}; \quad E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}} \qquad [2.129]$$

14

Xét trạng thái tán xạ: $E > 0$.

Trong miền $x < 0$: $V(x) = 0$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi$$

$$\text{với } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad [2.130]$$

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad [2.131]$$

15

Xét trạng thái tán xạ: $E > 0$.

Trong miền $x > 0$: $V(x) = 0$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi$$

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \ (x > 0) \qquad [2.132]$$

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \ (x < 0)$$

ĐK liên tục của $\psi(x)$ tại $x = 0$ cho

$$F + G = A + B \qquad [2.133]$$

16

Đạo hàm

$$\Rightarrow \begin{cases} d\psi/dx = ik(Fe^{ikx} - Ge^{-ikx})\,, (x > 0) \\ d\psi/dx = ik(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}), (x < 0) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \rightarrow d\psi/dx\Big|_{+} = ik(F - G) \\ \rightarrow d\psi/dx\Big|_{-} = ik(A - B) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = \frac{d\psi}{dx}\Big|_{+} - \frac{d\psi}{dx}\Big|_{-} = ik(F - G - A + B)$$

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

$$\Rightarrow ik(F - G - A + B) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A + B) \quad [2.134]$$

17

$$F - G = A(1 + 2i\beta) - B(1 - 2i\beta),$$

với $\beta \equiv \dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k}$ [2.135]

$$F + G = A + B \qquad [2.133]$$

4 tham số A, B, F và G và k chưa biết !

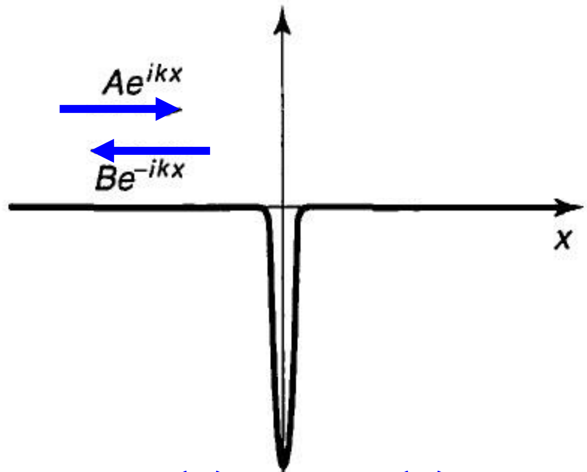
Chuẩn hóa: hàm sóng không thể chuẩn hóa!

Cần “bó sóng” để có thể chuẩn hóa.

18

$$\psi(x) = \overrightarrow{Ae^{ikx}} + \overleftarrow{Be^{-ikx}} \; (x < 0)$$

$$\psi(x) = \underrightarrow{Fe^{ikx}} + \underleftarrow{Ge^{-ikx}} \; (x > 0)$$

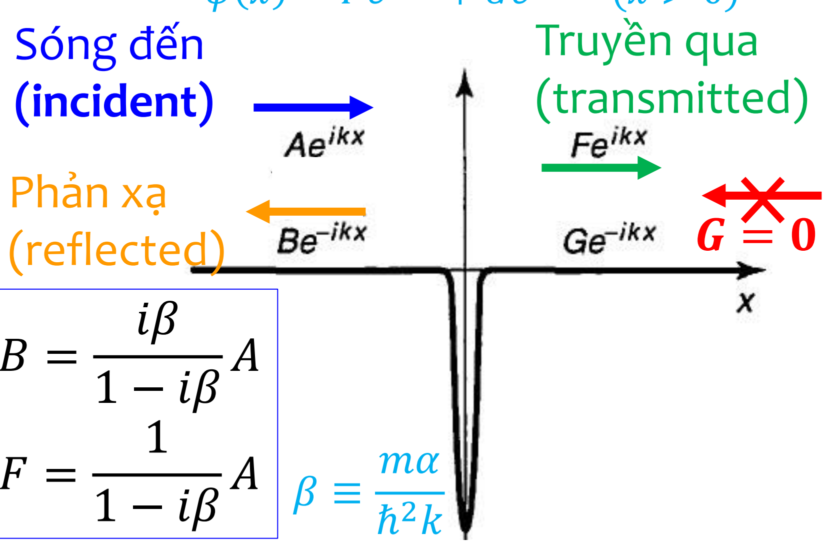


$$V(x) = -\alpha\delta(x)$$

Xét thí nghiệm: hạt được bắn từ 1 hướng, ví dụ từ trái

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \; (x < 0)$$

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \; (x > 0)$$



$$\boxed{\begin{aligned} B &= \frac{i\beta}{1 - i\beta} A \\ F &= \frac{1}{1 - i\beta} A \end{aligned}}$$

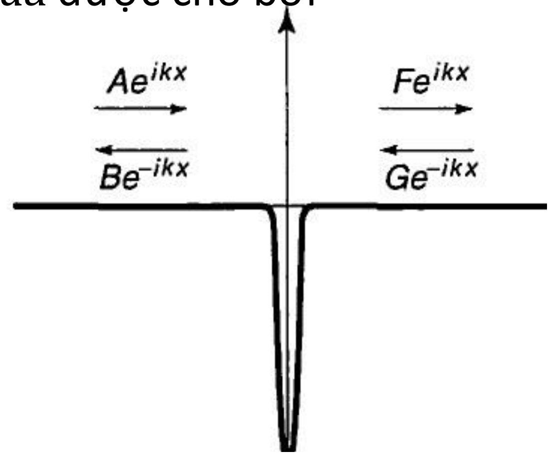
$$\beta \equiv \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}$$

$*$ Xác suất tìm thấy hạt ở vị trí xác định: $|\Psi|^2$

$*$ Xác suất tương đối để hạt tới phản xạ lại:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\beta^2}{1+\beta^2}$$ hệ số phản xạ

$*$ Xác suất truyền qua được cho bởi hệ số truyền qua T



$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1+\beta^2}$$

$$R + T = 1$$

21

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad [2.130] \qquad \beta \equiv \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \quad [2.135]$$

$$R = \frac{1}{1 + (2\hbar^2 E/m\alpha^2)}$$

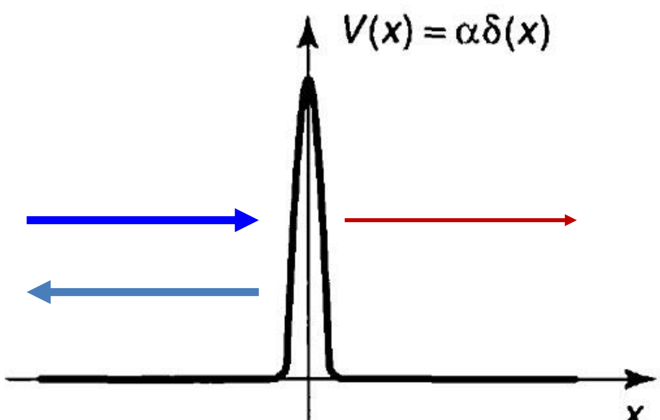
$$T = \frac{1}{1 + (m\alpha^2/2\hbar^2 E)}$$ [2.141]

Tương tự trường hợp hạt tự do: cần xây dựng "bó sóng" để có thể chuẩn hóa.
→ các công thức trên gần đúng!

22

Xét thí nghiệm: Hạt được bắn từ 1 hướng,
ví dụ từ phải

Hãy xác định hệ số phản xạ và hệ số truyền qua



Trạng thái tán xạ

$-\alpha \rightarrow \alpha$: Hệ số R và T không đổi vì phụ thuộc vào α^2 : Hạt "chui" qua được rào thế!

Hiệu ứng chui hầm (*tunneling*)