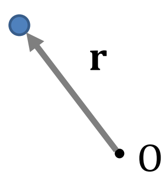
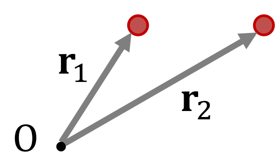
Hệ nhiều hạt

1

Phương trình Schrödinger tổng quát

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi$$





Một hạt: $\Psi(\mathbf{r}, t)$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}, t)$$

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\boldsymbol{r}$$

$$\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\boldsymbol{r} = 1$$

Hệ 2 hạt: $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$$

$$|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|^2 d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \quad [5.4]$$

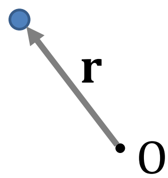
$$\int |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|^2 d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 = 1$$

2

Phương trình Schrödinger không phụ thuộc t
Thế năng V không phụ thuộc thời gian

$$H\psi = E\psi$$

$V = V(\mathbf{r})$

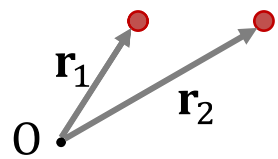


$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$$

$H\psi = E\psi$

$V = V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$



$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)e^{-iEt/\hbar}$

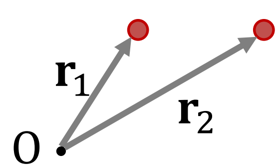
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V$$

$H\psi = E\psi$

3

Hệ hai hạt

$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ [5.1]



$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi \quad [5.2]$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \quad [5.3]$$

4

Hệ hai hạt

Xác suất tìm được hạt 1 và hạt 2 trong miền thể tích vi phân $d^3\mathbf{r}_1$ và $d^3\mathbf{r}_2$ (ở thời điểm t):

$$|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|^2 d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \qquad [5.4]$$

Điều kiện chuẩn hóa:

$$\int |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|^2 d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 = 1 \qquad [5.5]$$

Xác suất tìm được 2 hạt trong toàn miền không gian (2 hạt tồn tại trong đó) bằng 1 (100%)

5

Hệ hai hạt

Thế năng chỉ phụ thuộc tọa độ: $V = V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\right]\psi$$

→ Tách biến $\Psi = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\varphi(t)$

→ $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)e^{-iEt/\hbar}$ [5.6]

$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ thỏa PT Schrödinger không phụ thuộc thời gian:

$$H\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\right]\psi = E\psi \qquad [5.7]$$

6

Hệ hai hạt phân biệt, không tương tác

Mỗi hạt m_j bị ảnh hưởng bởi 1 thế năng riêng biệt $V_j(\mathbf{r}_j)$, $(j = 1, 2)$.
Khi đó $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V_1(\mathbf{r}_1) + V_2(\mathbf{r}_2)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V_1(\mathbf{r}_1) + V_2(\mathbf{r}_2)\right]\psi = E\psi$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 + V_1(\mathbf{r}_1) - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V_2(\mathbf{r}_2)\right]\psi = E\psi$$

→ Tách biến $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)$

Hệ hai hạt phân biệt, không tương tác

Tách biến $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)$

$\psi_1(\mathbf{r}_1)$, $\psi_2(\mathbf{r}_2)$ thỏa các PT Schrödinger không phụ thuộc thời gian:

$$H_1\psi_1(\mathbf{r}_1) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 + V_1(\mathbf{r}_1)\right]\psi_1(\mathbf{r}_1) = E_1\psi_1(\mathbf{r}_1)$$

$$H_2\psi_2(\mathbf{r}_2) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V_2(\mathbf{r}_2)\right]\psi_2(\mathbf{r}_2) = E_2\psi_2(\mathbf{r}_2)$$

$$E_1 + E_2 = E$$

Hệ N hạt phân biệt, không tương tác

Mỗi hạt m_j bị ảnh hưởng bởi 1 thế năng riêng biệt $V_j(\mathbf{r}_\mathrm{j})$, $(j = 1 \dots N)$. Khi đó $V(\mathbf{r}_1, \dots \mathbf{r}_\mathrm{N}) = \sum_{j=1}^{N} V_j(\mathbf{r}_\mathrm{j})$

$$\left[\sum_{j=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m_j}\nabla_j^2 + V_j(\mathbf{r}_\mathrm{j})\right)\right]\psi = E\psi$$

$$\psi = \psi_{12\dots N}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_\mathrm{N}) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)\dots\psi_N(\mathbf{r}_\mathrm{N})$$

Mỗi hàm sóng $\psi_j(\mathbf{r}_\mathrm{j})$ thỏa các PT Schrödinger không phụ thuộc thời gian:

$$H_j\psi_j(\mathbf{r}_\mathrm{j}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_j}\nabla_j^2 + V_j(\mathbf{r}_\mathrm{j})\right]\psi_j(\mathbf{r}_\mathrm{j}) = E_j\psi_j(\mathbf{r}_\mathrm{j})$$

$(j = 1 \dots N)$

9

Ví dụ: Hệ nhiều hạt phân biệt, không tương tác

Hãy tìm các mức năng lượng và hàm sóng của 3 hạt có thể phân biệt, không tương tác với nhau, được đặt trong giếng thế vuông vô hạn (1 chiều) kích thước a. Dùng kết quả thu được để tính năng lượng và hàm sóng ở trạng thái cơ bản và kích thích thứ nhất.

10

Ví dụ: Hệ nhiều hạt phân biệt, không tương tác

Hệ hạt [có thể] phân biệt và không tương tác nên hàm sóng chung của hệ là tích các hàm sóng từng hạt đơn lẻ:

$$\psi(x_1, x_2, x_3) = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_3(x_3)$$

Hàm sóng từng hạt thỏa PT Schrödinger không phụ thuộc thời gian :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_j}\nabla_j^2 + V_j(x_\mathrm{j})\right]\psi_j(x_\mathrm{j}) = E_j\psi_j(x_\mathrm{j})$$

Nghiệm: tập hợp các hàm/trị riêng $\left\{\psi_{n_j}(x_j)\right\}$, $\left\{E_{n_j}\right\}$

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x_1, x_2, x_3) = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)\psi_{n_3}(x_3)$$

11

$$\psi_{n_1}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n_1\pi}{a}x_1\right), E_{n_1} = \frac{n_1^2}{m_1}K, \qquad K \equiv \frac{\pi^2\hbar^2}{2a^2}$$

…

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x_1, x_2, x_3) = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)\psi_{n_3}(x_3)$$

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \left(\frac{n_1^2}{m_1} + \frac{n_2^2}{m_2} + \frac{n_3^2}{m_3}\right)K$$

$$\psi_{111} = \frac{2}{a}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\pi x_1/a)\sin(\pi x_2/a)\sin(\pi x_3/a)$$

$$E_{111} = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3}\right)K$$

Xác định năng lượng và hàm sóng trạng thái kích thích thứ nhất. [Giả sử hạt thứ 3 có khối lượng lớn nhất]

12

Hệ 2 hạt đồng nhất

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\right]\psi = E\psi$$

Giả sử hạt 1 ở trạng thái ψ_a, hạt 2 ở ψ_b :
$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2)$

Vì hai hạt đồng nhất, nên hạt 1 cũng có thể ở trạng thái ψ_b, hạt 2 ở ψ_a: $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_b(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2)$

Xây dựng hàm sóng từ 2 tổ hợp trên:

$$\psi_\pm(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) \pm \psi_b(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2)] \quad [5.10]$$

Bosons và Fermions

$$\psi_\pm(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) \pm \psi_b(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2)]$$

→ Có 2 loại hạt đồng nhất:

Dấu + : Hạt **bosons** [photon, mesons…]

Dấu − : Hạt **fermions** [electron, proton, quarks…]

Boson: Hạt có spin nguyên
Fermions: Hạt có spin bán nguyên [5.11]

Tiên đề!!!

→ 2 fermion đồng nhất không thể ở cùng trạng thái.
[Nguyên lý loại trừ Pauli/Pauli exclusion principle]

Thật vậy, nếu $\psi_a = \psi_b \rightarrow \psi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0$

Boson: Hạt có spin nguyên, các trạng thái đối xứng
Fermions: Hạt có spin bán nguyên, các trạng thái phản xứng
[Xem slide sau]

Toán tử hoán vị P

$$Pf(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = f(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad [5.12]$$

→ $P^2 = 1$ → Trị riêng của P là ± 1

Xét hệ hạt đồng nhất → $[P, H] = 0$
→ Có nghiệm riêng chung cho P và H

→ Có thể tìm thấy nghiệm của PT Schroedinger đối xứng (trị riêng $+$) hoặc phản xứng (trị riêng $-$) dưới phép hoán vị.

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \pm\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)} \qquad [5.14]$$

16

Xây dựng hàm sóng đối xứng và phản xứng

$$\psi_\pm(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) \pm \psi_b(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2)]$$

Hai bosons đồng nhất:

$$\psi_+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) + \psi_b(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2)]$$

Hai fermions đồng nhất:

$$\psi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) - \psi_b(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2)]$$

$$\psi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}}\begin{vmatrix} \psi_a(\mathbf{r}_1) & \psi_a(\mathbf{r}_2) \\ \psi_b(\mathbf{r}_1) & \psi_b(\mathbf{r}_2) \end{vmatrix}$$

Định thức bậc 2

Chú ý: Nếu 2 hạt phân biệt thì:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2)$$

17

Xây dựng hàm sóng đối xứng và phản xứng

***N* bosons đồng nhất:**

$\psi_+(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_\mathrm{N}) = \frac{1}{\sqrt{\mathrm{N}!}} \sum_P \hat{P}\, \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) \dots \psi_{n_N}(\mathbf{r}_\mathrm{N})$

[Tổng theo tất cả các hoán vị khả dĩ]

***N* fermions đồng nhất:**

$\psi_-(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_\mathrm{N}) = \frac{1}{\sqrt{\mathrm{N}!}} \sum_P (-1)^P\, \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) \dots \psi_{n_N}(\mathbf{r}_\mathrm{N})$

hoặc

$$\psi_-(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_\mathrm{N}) = \frac{1}{\sqrt{\mathrm{N}!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) & \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2) & \dots \psi_{n_1}(\mathbf{r}_\mathrm{N}) \\ \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1) & \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) & \psi_{n_2}(\mathbf{r}_\mathrm{N}) \\ & & \\ \psi_{n_N}(\mathbf{r}_1) & \psi_{n_N}(\mathbf{r}_2) & \dots \psi_{n_N}(\mathbf{r}_\mathrm{N}) \end{vmatrix}$$

Định thức bậc N

18

Xây dựng hàm sóng đối xứng và phản xứng

Trong các công thức ở slide trước, n_1, n_2,… n_N là những số khác nhau. Nếu $n_1 = n_2 = \cdots = n_N$ thì

$$\psi_+(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_\mathrm{N}) = \psi_n(\mathbf{r}_1)\psi_n(\mathbf{r}_2) \dots \psi_n(\mathbf{r}_\mathrm{N})$$

Nếu một vài n_i xảy ra hơn một lần thì cần chú ý kẻo tính lặp lại. Ví dụ n_1xảy ra N_1 lần trong chuỗi n_1, n_2,… n_N; n_2xảy ra N_2 lần … thì

$$\psi_+(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_\mathrm{N}) = \frac{\sqrt{N_1!N_2!\dots}}{\sqrt{\mathrm{N}!}} \sum_P \hat{P}\, \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) \dots \psi_{n_N}(\mathbf{r}_\mathrm{N})$$

Đối với phản xứng [fermion], chỉ cần có 1 cặp số giống nhau, $n_i = n_j$, thì hàm sóng bằng 0.

19

Xây dựng hàm sóng đối xứng và phản xứng

Ví dụ: Xét hệ 3 hạt boson độc lập (không tương tác), đồng nhất. Nếu $n_1 = n_2 = n$, $n_3 \neq n$, n_1 xảy ra $N_1 = 2$. Khi đó hàm sóng [đối xứng] được cho bởi

$$\psi_+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \frac{\sqrt{2!}}{\sqrt{3!}} \sum_P \hat{P}\, \psi_n \ (\mathbf{r}_1)\psi_n \ (\mathbf{r}_2)\psi_{n_3}(\mathbf{r}_3)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3}} [\psi_n \ (\mathbf{r}_1)\psi_n \ (\mathbf{r}_2)\psi_{n_3}(\mathbf{r}_3)$$

$$+ \psi_n \ (\mathbf{r}_1)\psi_{n_3}(\mathbf{r}_2)\psi_n \ (\mathbf{r}_3)$$

$$+ \psi_{n_3}(\mathbf{r}_1)\psi_n \ (\mathbf{r}_2)\psi_n \ (\mathbf{r}_3)]$$

Bài tập nhỏ 1: Hệ nhiều hạt không tương tác

Hãy tìm các mức năng lượng và hàm sóng của 3 hạt cùng khối lượng, không tương tác với nhau, được đặt trong giếng thế vuông vô hạn (1 chiều) kích thước a. Dùng kết quả thu được để tính năng lượng và hàm sóng ở trạng thái cơ bản và kích thích thứ nhất. [Cần xét các trường hợp: có thể phân biệt và không thể phân biệt (hệ hạt đồng nhất); hệ bosons và hệ fermions. Tham khảo ví dụ 5.1 sách Griffiths]

Bài tập nhỏ 2: Hệ nhiều hạt

Viết phương trình Schrödinger tổng quát và phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian cho một hệ gồm 2 hạt.
Giả sử 2 hạt trên đều là electron. Trong những trường hợp nào thì 2 electrons này có thể có cùng 1 trạng thái, không cùng trạng thái? Tại sao?