ĐẠI HỌC QUỐC GIA HCM
TRƯỜNG ĐH KHOA HỌC TỰ NHIÊN

Bài giảng
VẬT LÝ HIỆN ĐẠI
(PHY00004)

cuu duong than cong. com

HUỲNH TRÚC PHƯƠNG
Email: htphuong.oarai@gmail.com

cuu duong than cong. com

CHƯƠNG III

PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

III.1. Phương trình Schrodinger

Erwin Schrödinger
(1887-1961)

III.2. Hạt trong hố thế một chiều

cuu duong than cong. com

III.3. Hiệu ứng đường ngầm

cuu duong than cong. com

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

III.1. PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

HÀM SÓNG

Tính chất, khái niệm

Đã biết

Tìm như thế nào, dựa vào phương trình nào?

Chưa biết

?

Phương trình Schrodinger

Phụ thuộc thời gian

Không phụ thuộc thời gian

cuu duong than cong. com

cuu duong than cong. com

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

III.1. PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

1. Phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian

Hàm sóng của một hạt có năng lượng E chuyển động trong một trường thế U:

$$\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} \qquad (1)$$

cuu duong than cong. com

Mô tả sóng truyền theo phương x và sóng truyền theo phương ngược lại

SÓNG DỪNG

Đối với hạt tự do (U = 0): $p = \hbar k$ và $E = \hbar\omega$

cuu duong than cong. com

Từ (1) $\Rightarrow$ $\dfrac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -k^2\Psi$ Ta dùng: $E = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

III.1. PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

1. Phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian

Thu được: $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2m}\Psi \qquad (2)$$

cuu duong than cong. com

Tương tự: $$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi$$

Ta dùng: $E = \hbar\omega$

Thu được: $$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hbar\omega\Psi = E\Psi$$

cuu duong than cong. com

Khi hạt chuyển động trong trường thế U(x) ⇒ $E = p^2/2m + U(x)$

⇒ $$E\Psi = \frac{p^2}{2m}\Psi + U(x)\Psi \qquad (3)$$

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

III.1. PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

1. Phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian

Thay (3) vào (2):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+U(x)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad (4)$$

cuu duong than cong. com

Phương trình Schrodinger cho hạt chuyển động một chiều

Cơ học cổ điển

Phương trình Newton

F = ma

Giải phương trình cho ta biết vị trí của hạt theo thời gian

Cơ học lượng tử

Phương trình Schrodinger

cuu duong than cong. com

(4)

Giải phương trình cho ta biết xác suất của hạt trong không gian theo thời gian

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

III.1. PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

2. Phương trình Schrodinger không phụ thuộc thời gian

$$\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

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

Phụ thuộc thời gian

Phụ thuộc không gian

cuu duong than cong. com

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}e^{-iEt/\hbar} + U(x)\psi(x)e^{-iEt/\hbar} = i\hbar(-iE/\hbar)e^{-iEt/\hbar}\psi(x) = E\psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

Rút gọn, ta thu được:

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

III.1. PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

2. Phương trình Schrodinger không phụ thuộc thời gian

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

cuu duong than cong. com

Sắp xếp lại: $$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(x)]\psi(x)=0$$

Phương trình Schrodinger cho hạt chuyển động một chiều

cuu duong than cong. com

CHÚNG TA SẼ LÀM VIỆC TRÊN PHƯƠNG TRÌNH NÀY

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

III.1. PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

3. Điều kiện của hàm sóng

○ Hữu hạn, nếu không thì điều kiện chuẩn hóa không được thỏa mãn,

○ Đơn trị, vì ứng với mỗi trạng thái, tại một vị trí và tại một thời điểm chỉ có một xác suất tìm thấy hạt,

○ Ψ và đạo hàm bậc nhất của nó theo các tọa độ không gian phải liên tục. Điều kiện này là do phương trình Schrödinger có chứa các đạo hàm bậc hai của Ψ theo các tọa độ không gian. Để phương trình có nghĩa, đạo hàm bậc hai của Ψ phải hữu hạn, muốn vậy thì Ψ và đạo hàm bậc nhất của nó theo tọa độ phải liên tục.

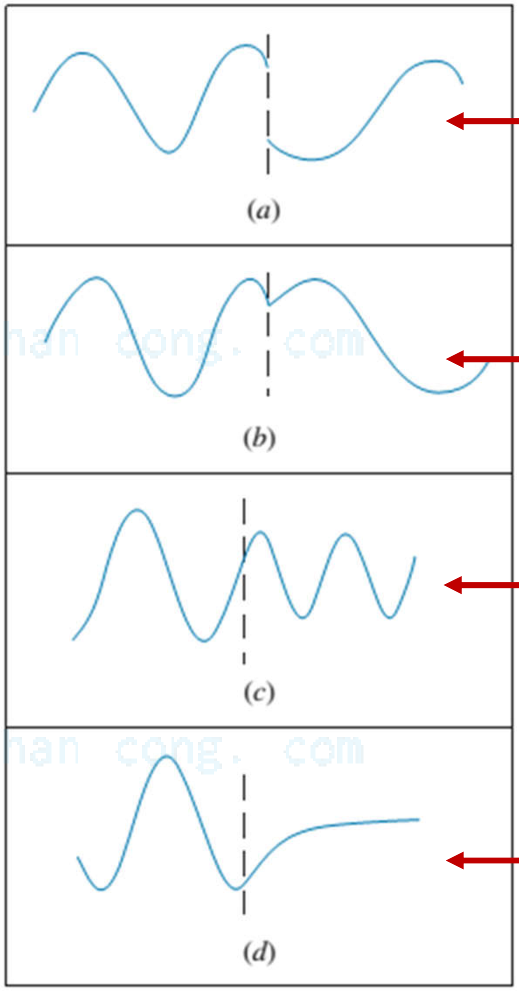
cuu duong than cong. com

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

III.1. PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

3. Điều kiện của hàm sóng

HÀM SÓNG NÀO THỎA ĐIỀU KIỆN?



KHÔNG

KHÔNG

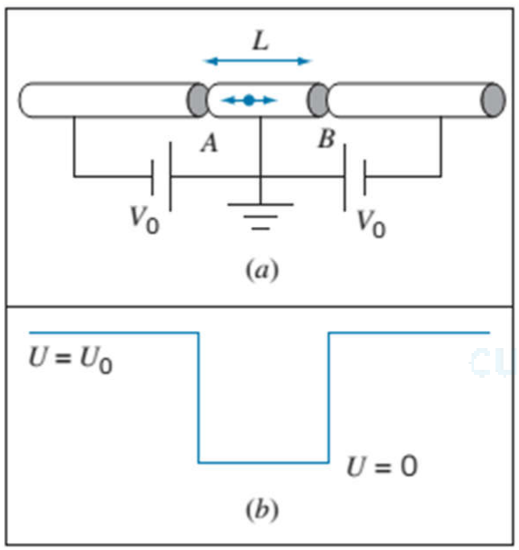
THỎA

THỎA

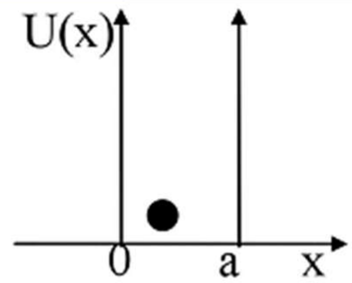
cuu duong than cong. com

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

III.2. HẠT TRONG HỐ THẾ MỘT CHIỀU



$$U(x)=\begin{cases}\infty & \text{khi} \quad x \le 0 \\ 0 & \text{khi} \quad 0 < x < a \\ \infty & \text{khi} \quad x \ge a\end{cases}$$



Hình 3.1: Hình ảnh một hố thế một chiều

cuu duong than cong. com

Xét hạt chuyển động tự do trong 0 < x < a

Phương trình Schrodinger trong trường hợp này:

$$\boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x)=0}$$

cuu duong than cong. com

hay $$\boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=0} \quad (1)$$ với $\boxed{k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}}$

CuuDuongThanCong.com

https://fb.com/tailieudientucntt

III.2. HẠT TRONG HỐ THẾ MỘT CHIỀU

Phương trình (1) có nghiệm:

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

A = ?
B = ?

Dựa vào điều kiện biên $\psi(0) = \psi(a) = 0$ $\Rightarrow$

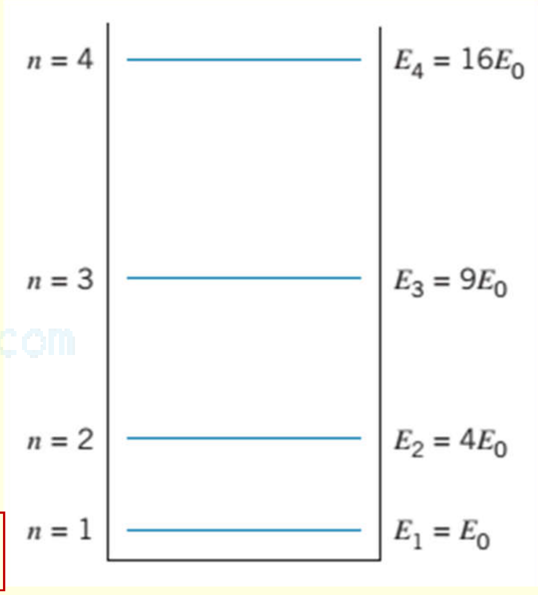
$$\psi(0) = B = 0$$
$$\psi(a) = A\sin(ka) = 0$$

$$\sin(ka) = 0$$
$$\Rightarrow \quad k = n\pi/a \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

hay

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2, \ (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

Năng lượng bị lượng tử hóa



Ở trạng thái lượng tử, hạt luôn chuyển động!

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

III.2. HẠT TRONG HỐ THẾ MỘT CHIỀU

Bây giờ ta tìm hằng số A?

Dựa vào điều kiện chuẩn hóa của hàm sóng

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1$$

$$\int_0^a A^2 \sin^2(n.\pi.x/a)dx = 1$$

$$\Rightarrow \quad A = \sqrt{2/a}$$

Vậy hàm sóng của hạt trong hố thế thu được là:

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/a}\sin(n.\pi.x/a)$$

Tuy nhiên, bản thân hàm sóng không có ý nghĩa vật lý, mà chỉ có mật độ xác suất mới có ý nghĩa vật lý.

cuu duong than cong. com

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

III.2. HẠT TRONG HỐ THẾ MỘT CHIỀU

Mật độ xác suất phát hiện hạt:

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

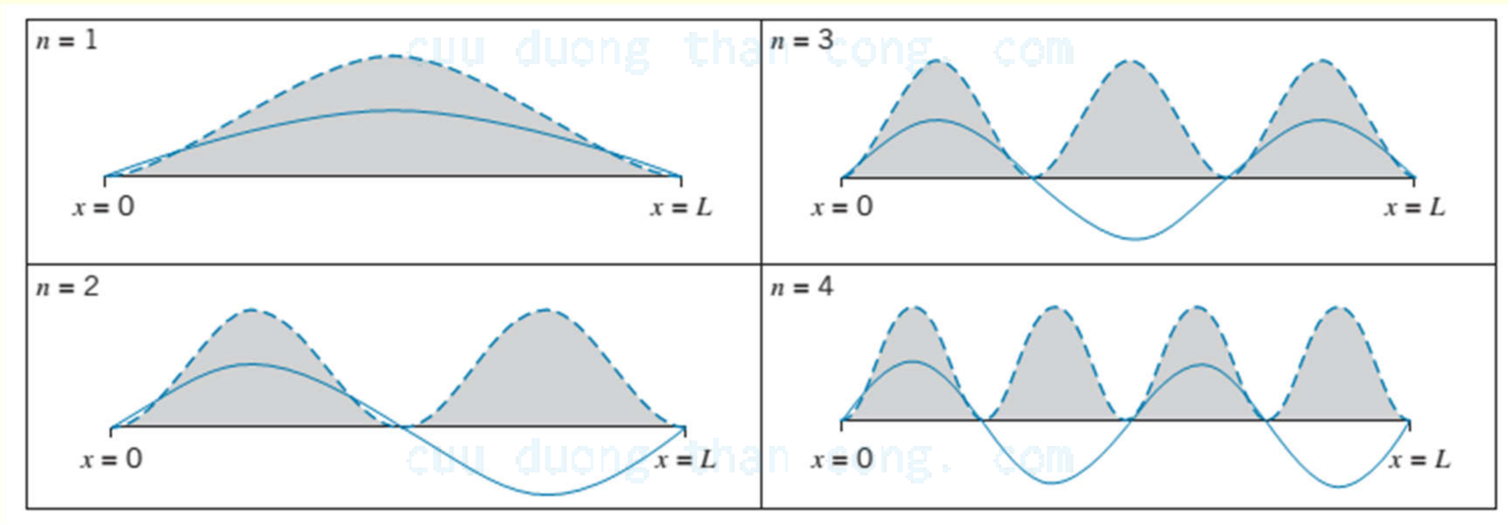


FIGURE 5.11 The wave functions (solid lines) and probability densities (shaded regions) of the first four states in the one-dimensional infinite potential energy well.

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

III.2. HẠT TRONG HỐ THẾ MỘT CHIỀU

7.1. Một hạt chuyển động tự do trong hố thế vuông góc sâu vô hạn, bề rộng a. Tính năng lượng của hạt ở trạng thái cơ bản trong các trường hợp sau:

(a) Hạt là proton và a = 0,1 nm.

(b) Hạt là proton và a = 1 fm.

7.3. Một hạt đang ở trạng thái kích thích thứ nhất của hố thế sâu vô hạn rộng a thỏa:

cuu duong than cong. com

$$U(x) = \begin{cases} 0 & 0 \le x \le a \\ \infty & x < 0,\ x > a \end{cases}$$

Tìm xác suất phát hiện hạt trong các khoảng sau:

(a) Từ x = 0 đến x = a/2

(b) Từ x = 3a/4 đến x = a.

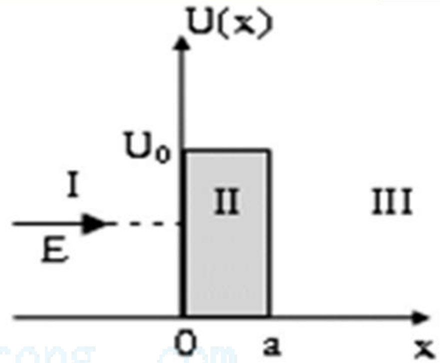
cuu duong than cong. com

7.4. Bước sóng của một photon phát ra từ laser ruby là 694,3 nm. Giả sử việc phát photon có bước sóng này là kết quả của quá trình dịch chuyển electron từ mức n = 2 về mức n = 1 trong hố thế vô hạn. Tính bề rộng hố thế.

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

III.3. RÀO THẾ - HIỆU ỨNG ĐƯỜNG NGẦM

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



Hình 3.4: Hàng rào thế hình chữ nhật.

cuu duong than cong. com

- Miền (I) và (III): $\dfrac{d^2\psi}{dx^2} + k_1^2\psi = 0, \qquad k_1^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2}E$
- Miền (II): $\dfrac{d^2\psi}{dx^2} - k_2^2\psi = 0, \qquad k_2^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2}[U_0 - E]$

$$\psi_I = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x}$$

$$\psi_{II} = A_2 e^{-k_2x} + B_2 e^{k_2x}$$

$$\psi_{III} = A_3 e^{ik_1(x-a)} + B_3 e^{-ik_1(x-a)}$$

Sóng tới trong miền I

Sóng pxạ trong miền I

Sóng PXẠ trong miền III

Sóng truyền qua trong miền III

cuu duong than cong. com

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

III.3. RÀO THẾ - HIỆU ỨNG ĐƯỜNG NGẦM

Để tìm A_i và B_i, ta cần các điều kiện:

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

$$\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=0}$$

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

$$\left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=a} = \left.\frac{d\psi_{III}}{dx}\right|_{x=a}$$

- $A_1 + B_1 = A_2 + B_2$
- $ik_1(A_1 - B_1) = -k_2(A_2 - B_2)$
- $A_2 e^{-k_2 a} + B_2 e^{k_2 a} = A_3$
- $-k_2\left(A_2 e^{-k_2 a} - B_2 e^{k_2 a}\right) = ik_1 A_3$

Hệ số truyền qua:

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

$$D = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{16n^2}{(1+n^2)^2} e^{-2k_2 a}$$

$$n = \frac{k_1}{k_2} = \sqrt{\frac{E}{U_0 - E}}$$

Nếu $U_0 = 10E$ thì

$$D \approx \exp\left[-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}\right]$$

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

III.3. RÀO THẾ - HIỆU ỨNG ĐƯỜNG NGẦM

7.20. Đối với hạt có năng lượng $E < U_0$ tới rào thế có dạng:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ U_0 & x \geq 0 \end{cases}$$

Với, $x < 0$ hàm sóng có dạng: $\psi_0(x) = A\sin k_0 x + B\cos k_0 x$, $k_0 = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$

cuu duong than cong. com

Với, $x \geq 0$ hàm sóng có dạng: $\psi_1(x) = Ce^{k_1 x} + De^{-k_1 x}$, $k_1 = \sqrt{\dfrac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$

Hãy áp dụng điều kiện biên tại $x = 0$ để tính hàm số B và D theo A

7.29. Hai dây dẫn bằng Cu cách nhau bằng một lớp oxit CuO. Lớp oxit này được xem như là rào thế vuông góc cao 10 eV, hãy tính hệ số truyền qua đối với electron năng lượng 7 eV.

(a) Nếu bề dày của lớp là 5 nm.

cuu duong than cong. com

(b) Nếu bề dày của lớp là 1 nm.

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

BÀI TẬP CHƯƠNG 3

Đọc các bài có lời giải chương 7 sách bài tập

cuu duong than cong. com

Làm các bài không có lời giải chương 7 sách bài tập

cuu duong than cong. com

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

THẢO LUẬN

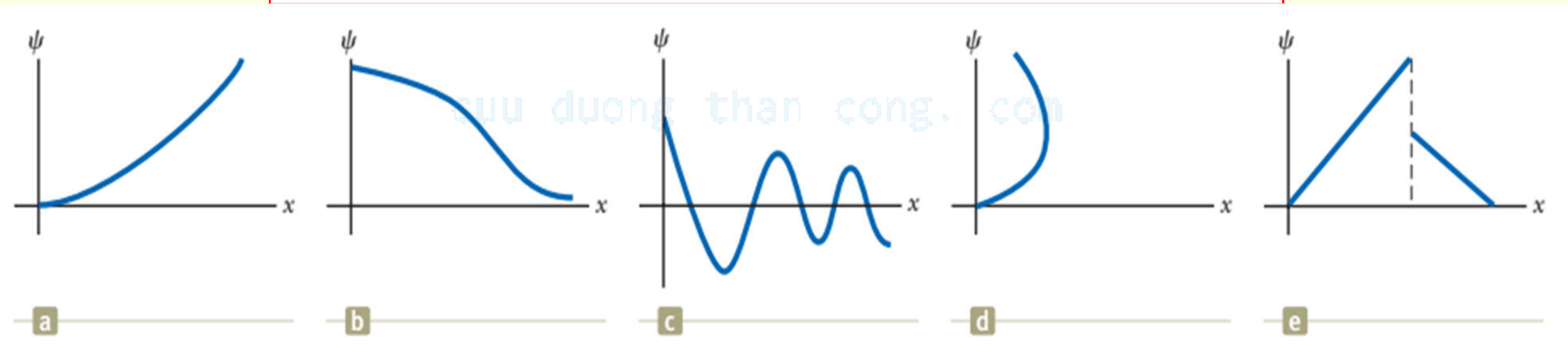
4. Why are the following wave functions not physically possible for all values of x? (a) $\psi(x) = Ae^x$ (b) $\psi(x) = A \tan x$

5. What is the significance of the wave function ψ?

6. In quantum mechanics, it is possible for the energy E of a particle to be less than the potential energy, but classically this condition is not possible. Explain.

7. Consider the wave functions in Figure CQ41.7. Which of them are not physically significant in the interval shown? For those that are not, state why they fail to qualify.

8. How is the Schrödinger equation useful in describing quantum phenomena?



THẢO LUẬN

CQ41.4 (a) $\psi(x)$ becomes infinite as $x \to \infty$.

(b) $\psi(x)$ is discontinuous and becomes infinite at $x = \pi/2, 3\pi/2, \ldots$

CQ41.5 A particle's wave function represents its state, containing all the information there is about its location and motion. The squared absolute value of its wave function tells where we would classically think of the particle as spending most its time. $|\Psi|^2$ is the probability distribution function for the position of the particle.

cuu duong than cong . com

CQ41.6 In quantum mechanics, particles are treated as wave functions, not classical particles. In classical mechanics, the kinetic energy is never negative. That implies that $E \geq U$. Treating the particle as a wave, the Schrödinger equation predicts that there is a nonzero probability that a particle can tunnel through a barrier—a region in which $E < U$.

CQ41.7 Both (d) and (e) are not physically significant. Wave function (d) is not acceptable because ψ is not single-valued. Wave function (e) is not acceptable because ψ is discontinuous (as is its slope).

CQ41.8 Newton's 1st and 2nd laws are used to determine the motion of a particle of large mass. The Schrödinger equation is not used to determine the motion of a particle of small mass; rather, it is used to determine the state of the wave function of a particle of small mass. In particular, the states of atomic electrons are confined-wave states whose wave functions are solutions to the Schrödinger equation. Anything that we can know about a particle comes from its wave function.

cuu duong than cong . com

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt