Hạt tự do

Hạt tự do: $V = 0$

→ Hamiltionian chỉ còn thành phần động năng

Pt. Schroedinger: $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad [2.90]$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \text{ với } k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad [2.91]$$

PT có nghiệm:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad [2.92]$$

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/h}$$
$$= Ae^{ik\left(x-\frac{\hbar k}{2m}t\right)} + Be^{-ik\left(x+\frac{\hbar k}{2m}t\right)} \quad [2.93]$$

$$\Psi(x,t) = Ae^{ik\left(x-\frac{\hbar k}{2m}t\right)} + Be^{-ik\left(x+\frac{\hbar k}{2m}t\right)}$$

$$\Psi(x,t) = Ae^{ik(x-vt)} + Be^{ik(-x-vt)}$$

Sóng lan truyền theo hướng $\pm x$ với vận tốc v

Sóng lan truyền sang phải và trái

$$\Psi_k(x,t) = A \exp i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right) \quad [2.94]$$

$$k = \pm\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{với} \begin{cases} k > 0 \text{ sang phải} \\ k < 0 \text{ sang trái} \end{cases} \quad [2.95]$$

Nhận xét

$$\Psi_k(x,t) = A\exp i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)$$

Trạng thái dừng của hạt tự do là những sóng lan truyền với bước sóng $\lambda = 2\pi/|k|$

→ Chúng mang động lượng $p = \hbar k$ [2.96]

→ vận tốc của sóng (lượng tử)

$$v_{quantum} = \frac{\hbar|k|}{2m} \quad [2.97]$$

Cổ điển: v của hạt được cho bởi $E = mv^2/2$

$$\rightarrow v_{classical} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_{quantum} \quad [2.98]$$

(k được gọi là vector sóng)

$$v_{classical} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_{quantum}$$

→Hàm sóng lượng tử lan truyền ở vận tốc bằng nửa vận tốc của hạt (được biểu diễn bởi sóng đó)!!

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k^* \Psi_k dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx = |A|^2(\infty) \quad [2.99]$$

$$\Psi_k(x,t) = A\exp i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)$$

→Hàm sóng của hạt tự do không thể chuẩn hóa!!

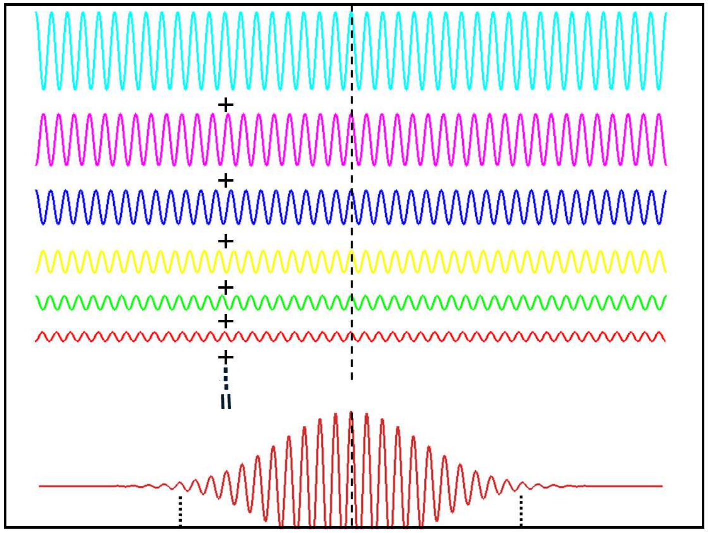
Giếng thế vô hạn Dao động tử điều hòa	Hạt tự do
NL rời rạc: $E = E_n$	NL liên tục $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$
$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \Psi_n(x,t)$	$\Psi(x,t) = \int \phi(k)\Psi_k(x,t)\,dk$

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk \quad [2.100]$$

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx-\omega t)} dk$$

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk$$

- Hàm sóng chồng chập của nhiều sóng theo vector sóng $\boldsymbol{k}$.
- Có thể chuẩn hóa!
- Có thể định xứ (local)
- Hàm sóng gồm một dải của $\boldsymbol{k}$ (→ năng lượng & vận tốc) liên tục
- → Bó sóng (wave packet)



Bài toán thường gặp trong QM

$$\Psi(x,0) \;\Rightarrow \Psi(x,t)$$

$$\Psi(x,t=0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx}\; dk \quad [2.101]$$

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx-\omega t)}\; dk$$

$\phi(k)$=?

Phép biến đổi Fourier

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} dk$$

$F(k)$ phép biến đổi Fourier của $f(x)$

[2.102]

$$\Leftrightarrow F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ik}\; dx$$

$f(x)$ phép biến đổi Fourier đảo của $F(k)$

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx}\; dk \quad [2.101]$$

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,0) e^{-ikx} dx \quad [2.103]$$

Ý nghĩa vật lý của $\boldsymbol{\phi(k)}$

$$\boxed{1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,0)|^2\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(k)|^2\ dk}$$

$|\Psi(x,0)|^2$: mật độ xác suất tìm thấy hạt ở x.

$|\Psi(x,0)|^2 dx$: xác suất tìm thấy hạt ở giữa x và $x + dx$

$|\phi(k)|^2$mật độ xác suất đo được vector sóng k đối với hạt ở trạng thái $\phi(k)$

$|\phi(k)|^2 dk$: xác suất tìm được vector sóng của hạt giữa k và $k + dk$

Ví dụ: Bó song Gauss

Tìm $\Psi(x,0)$ biết bó sóng $\phi(k)$ có dạng Gauss: $\phi(k) = A\exp[-a^2(k-k_0)^2/4]$. A là hằng số chuẩn hóa cần tìm.

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(k)|^2\ dk = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2(k-k_0)^2/2}\ dk$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2y^2/2}\ dy = \frac{\sqrt{2\pi}}{a} \to A = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4}$$

$$\phi(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \exp\left[\frac{-a^2(k-k_0)^2}{4}\right]$$

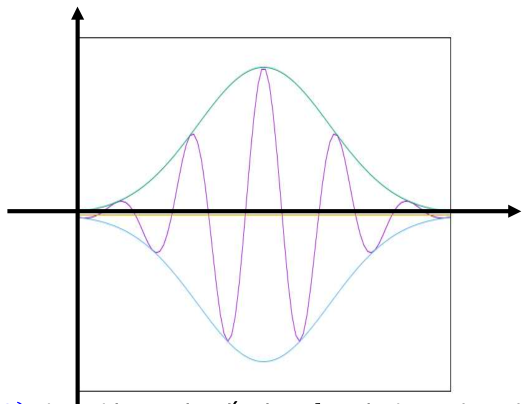
$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2(k-k_0)^2/4}\, e^{ikx}\, dk$$

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2(k-k_0)^2/4}\, e^{ikx}\, dk$$

$$\Psi(x,0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/a^2} e^{ik_0x}$$

$\Psi(x,0)$ dao động với số sóng k_0 và được bao bởi hàm Gauss e^{-x^2/a^2}

$$\phi(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \exp\left[\frac{-a^2(k-k_0)^2}{4}\right]$$



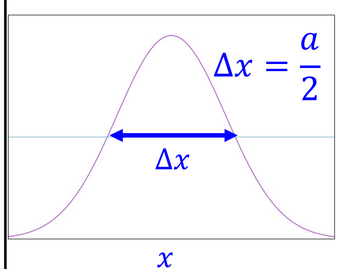
$\Psi(x,0)$ dao động với số sóng k_0 và được bao bởi hàm Gauss e^{-x^2/a^2}

Bó sóng Gauss

$$\Psi(x,0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/a^2} e^{ik_0 x}$$

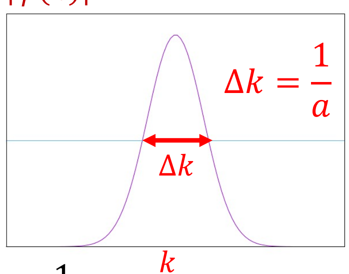
$$\phi(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \exp\left[\frac{-a^2(k-k_0)^2}{4}\right]$$

$|\Psi(x,0)|^2$



$\Delta x = \dfrac{a}{2}$

$|\phi(k)|^2$



$\Delta k = \dfrac{1}{a}$

$k = p/\hbar$

$$\Delta x \Delta k = \frac{1}{2}$$

$$\boxed{\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}}$$

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Bó sóng Gauss là bó sóng có độ bất định nhỏ nhất

Ví dụ: Bó sóng chữ nhật [ví dụ 2.6]

Hạt tự do. Tại thời điểm t=0 hàm sóng có dạng:

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} A, & -a < x < a \\ 0, & \text{khác} \end{cases}$$

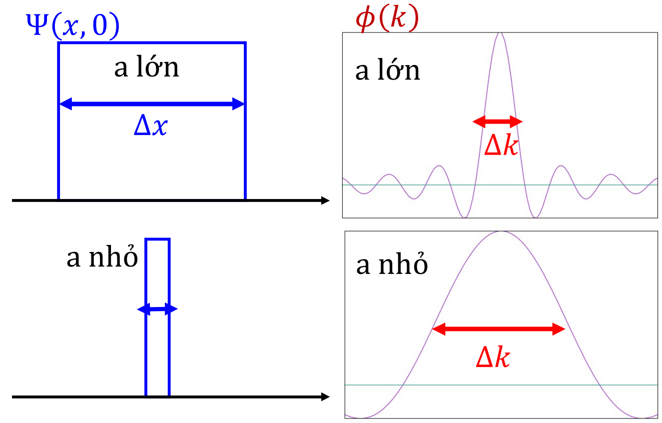
A, a là các số thực.
Tìm $\phi(k)$ và $\Psi(x,t)$

Ví dụ: Bó sóng chữ nhật [ví dụ 2.6]

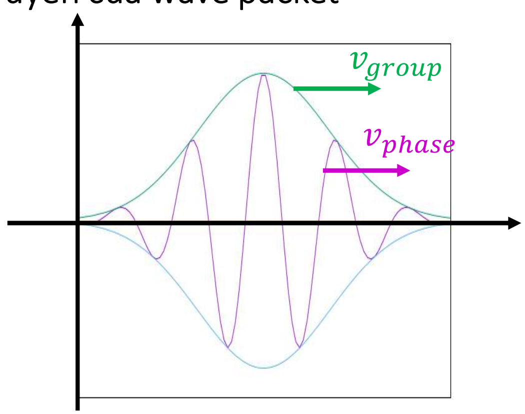
$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \frac{\sin(ka)}{k}$$

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\pi\sqrt{2a}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(ka)}{k}\, e^{i(kx-\omega t)} dk$$

Ví dụ: Bó sóng chữ nhật [ví dụ 2.6]



Lan truyền của wave packet



Lan truyền của wave packet

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{i(kx-\omega t)} dk$$

Hệ thức tán sắc: $\omega = \omega(k)$ $\quad\left(\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}\right)$

Giả sử $\phi(k)$ tập trung quanh và có đỉnh tại k_0.

Khai triển $\omega(k)$ quanh k_0 và bỏ qua số hạng bậc cao

$$\omega(k) \cong \omega(k_0) + (k-k_0)\left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k=k_0}$$

$$\omega(k) \cong \omega_0 + \omega_0' \underbrace{(k-k_0)}_{s}$$

Lan truyền của wave packet

$$\Psi(x,t) \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(k_0+s)e^{i[(k_0+s)x-(\omega_0+\omega_0's)t]}ds$$

$$\Psi(x,t=0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(k_0+s)e^{i[(k_0+s)x]}dk$$

$$\Psi(x,t) \cong e^{i[-\omega_0 t+k_0\omega_0' t]}\boxed{\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(k_0+s)e^{i[(k_0+s)(x-\omega_0' t)]}dk}_{\Psi(x-\omega_0' t,0)}}$$

$$\Psi(x,t) \cong e^{i[-\omega_0 t+k_0\omega_0' t]}\Psi(x-\omega_0' t,0)$$

→ Bó sóng (tập thể sóng)lan truyền với

$$v_{group} = \omega_0' = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k=k_0}$$

Vận tốc của "từng sóng" (phase):

$$v_{phase} = \frac{\omega}{k}$$

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \Rightarrow \begin{cases} v_{group} = \hbar k/m \\ v_{phase} = \hbar k/2m \end{cases}$$

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \Rightarrow \begin{cases} v_{group} = \hbar k/m \\ v_{phase} = \hbar k/2m \end{cases}$$

Cổ điển: v của hạt được cho bởi $E = mv^2/2$

$$v_{classical} = \sqrt{2E/m} = \frac{\hbar k}{m}$$

$$\boxed{v_{classical} = v_{group} = 2v_{phase}}$$