Phương trình Schrödinger 3 chiều (3D)

Giới thiệu

Phương trình Schrödinger tổng quát

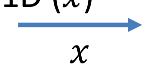
$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi \qquad [4.1]$$

Toán tử Hamitonian H (cổ điển)

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

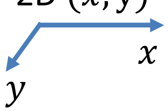
1D → 3D

1D (x)



$$p^2 = p_x^2 \qquad H = \frac{1}{2m}p_x^2 + V$$

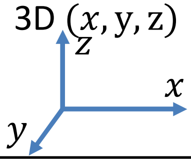
2D (x, y)



$$p^2 = p_x^2 + p_y^2$$

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2\right) + V$$

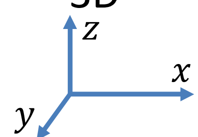
3D (x, y, z)



$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + V$$

3D



$$p_x \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, p_y \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, p_z \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \qquad [4.2]$$

$$\vec{p} \equiv \boldsymbol{p} \to \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x}\vec{\boldsymbol{\imath}} + \frac{\partial}{\partial x}\vec{\boldsymbol{\jmath}} + \frac{\partial}{\partial x}\vec{\boldsymbol{k}}\right) \equiv \frac{\hbar}{i}\nabla \qquad [4.3]$$

$$\Rightarrow p^2 = -\hbar^2\nabla^2$$

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

Phương trình Schrödinger 3D

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\mathbf{r},t)\Psi} \qquad [4.4]$$

với toán tử Laplace trong tọa độ Descartes

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad [4.5]$$

$$\nabla \equiv \frac{\partial}{\partial x}\vec{\boldsymbol{i}} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{\boldsymbol{j}} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{\boldsymbol{k}}$$

Phương trình Schrödinger 3D

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi}$$

Xác suất để tìm thấy hạt trong miền thể tích vi phân $d^3\boldsymbol{r} = dxdydz$ là $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2 d^3\boldsymbol{r}$

$$\int |\Psi|^2 d^3\boldsymbol{r} = 1 \qquad [4.6]$$

Phương trình Schrödinger 3D

$$V = V(\mathbf{r}) \rightarrow \Psi = \varphi(t)\,\psi(\boldsymbol{r})$$

→ tập hợp đầy đủ các trạng thái dừng

$$\Psi_n(\boldsymbol{r},t) = \psi_n(\boldsymbol{r})e^{-iE_nt/\hbar} \qquad [4.7]$$

$\psi_n(\boldsymbol{r})$ thỏa phương trình Schrödinger không phụ thuộc t

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi} \qquad [4.8]$$

Phương trình Schrödinger 3D

$V = V(\mathbf{r})$: Nghiệm tổng quát

$$\Psi = \sum_n \Psi_n(\boldsymbol{r},t) = \sum_n c_n\,\psi_n(\boldsymbol{r})e^{-iE_nt/\hbar} \qquad [4.9]$$

Bài tập "nhỏ"

Hãy xác định các giao hoán tử giữa toán tử $\mathbf{r}$ và $\mathbf{p}$:

$[x, y], [x, z],...$ $\quad [x, p_x], [x, p_y], [x, p_z], ...$

$[p_x, p_y], [p_x, p_z], [p_y, p_z], ...$

Bài tập "nhỏ"

$$[r_i, p_j] = -[p_j, r_i] = i\hbar\delta_{ij},$$
$$[r_i, r_j] = [p_i, p_j] = 0 \qquad [4.10]$$

$i, j = x, y, z.\ r_x = x, r_y = y, r_z = z$

Bài tập "nhỏ"

CM: $\frac{d}{dt}\langle \boldsymbol{r} \rangle = \frac{1}{m}\langle \boldsymbol{p} \rangle$ $\qquad [4.11]$

$$\frac{d}{dt}\langle \boldsymbol{p} \rangle = \langle -\nabla V \rangle$$

$$\sigma_x \sigma_{p_x} \geq \frac{\hbar}{2},$$
$$\sigma_y \sigma_{p_y} \geq \frac{\hbar}{2}, \qquad [4.12]$$
$$\sigma_z \sigma_{p_z} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Phương trình Schrödinger 3 chiều (3D)

Giải phương trình
bằng phương pháp tách biến

Tọa độ Descartes

Phương trình Schrödinger tổng quát

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

Xét thế năng có dạng $V(\mathbf{r}) = V(x,y,z)$.

PT Schrödinger không phụ thuộc thời gian

$$\boxed{H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(x,y,z)\,\psi}$$

Nghiệm: $\psi(x,y,z)$

Tọa độ Descartes

- Phương trình Schrödinger này khó giải.
- Nếu $V(x,y,z)$ có thể được tách thành tổng ba số hạng độc lập
  $V(x,y,z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$
  thì có thể giải bằng pp tách biến.
- Hamiltonian được tách như sau

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x,y,z)$$
$$\equiv H_x(x) + H_y(y) + H_z(z)$$

Tọa độ Descartes

- Hamiltonian thành phần:

$$H_x(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_x(x)$$

$$H_y(y) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_y(y)$$

$$H_z(z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z)$$

Tọa độ Descartes

Hàm sóng toàn phần có thể được biểu diễn dưới dạng tách biến:

$$\psi(x,y,z) = \mathrm{X}(x)Y(y)Z(z)$$

Phương trình Schroedinger $H\psi = E\psi$ thành

$$[H_x(x)+H_y(y)+H_z(z)]\mathrm{X}(x)Y(y)Z(z)$$
$$= E\,\mathrm{X}(x)Y(y)Z(z)$$

$$H_x(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_x(x)$$

$$H_y(y) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_y(y) \qquad H_z(z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z)$$

Tọa độ Descartes

$$[H_x(x)+H_y(y)+H_z(z)]X(x)Y(y)Z(z) = E\,X(x)Y(y)Z(z)$$

$$\Rightarrow [H_x(x)+H_y(y)+H_z(z)] = E$$

$$H_x(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_x(x)$$

$$\Rightarrow H_x(x)X(x)Y(y)Z(z) = Y(y)Z(z)H_x(x)X(x)$$

Tọa độ Descartes

$$[H_x(x)+H_y(y)+H_z(z)]X(x)Y(y)Z(z) = E\,X(x)Y(y)Z(z)$$

$$Y(y)Z(z)H_x(x)X(x) + X(x)Z(z)H_y(y)Y(y) + X(x)Y(y)H_z(z)\,Z(z) = E\,X(x)Y(y)Z(z)$$

$$\frac{1}{XYZ}[YZH_xX + XZH_yY + XYH_zZ] = E$$

$$\frac{1}{X}H_xX + \frac{1}{Y}H_yY + \frac{1}{Z}H_zZ = E$$

Tọa độ Descartes

$$\frac{1}{X(x)}H_xX(x) + \frac{1}{Y(y)}H_yY(y) + \frac{1}{Z(z)}H_zZ(z) = E$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{1}{X(x)}H_xX(x) = E_x \\ \frac{1}{Y(y)}H_yY(y) = E_y \\ \frac{1}{Z(z)}H_zZ(z) = E_z \end{cases}$$

Với: $E_x + E_y + E_z = E$

Tọa độ Descartes

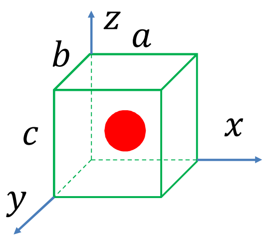
Phương pháp tách biến chuyển phương trình 3D thành 3 phương trình 1D tách biệt nhau.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + [V_x(x) + V_y(y)+V_z(z)]\psi = E\psi$$

$$\Rightarrow \begin{cases} H_xX(x) = E_xX(x) \\ H_yY(y) = E_yY(y) \\ H_zZ(z) = E_zZ(z) \end{cases}$$

Với: $E_x + E_y + E_z = E$

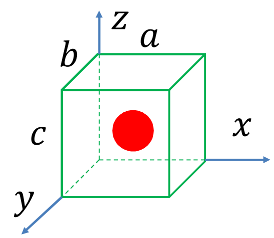
Quantum dot

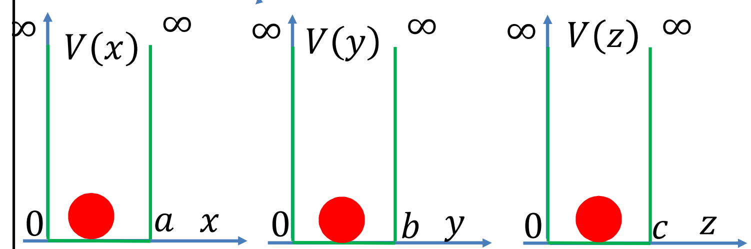


$$V(\mathbf{r}) = V(x,y,z) = \begin{cases} 0 \text{ nếu } x,y,z \in (0,a) \\ \infty \text{ nếu khác} \end{cases}$$

Hạt bị "nhốt tù" (confined)→ "nhốt tù lượng tử" (quantum confinement)

Quantum dot





Quantum dot

Phương trình Schrödinger tổng quát

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\mathbf{r})\psi = \mathrm{E}\psi}$$

Thế năng có dạng

$$V(\mathbf{r}) = V(x,y,z) = \begin{cases} 0 \text{ nếu } x,y,z \in (0,a) \\ \infty \text{ nếu khác} \end{cases}$$

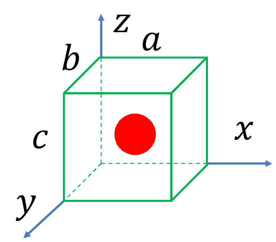
$$V(x,y,z) = V(x) + V(y) + V(z)$$

Quantum dot

$$V(x) = \begin{cases} 0 \text{ nếu } x \in (0,a) \\ \infty \text{ nếu khác} \end{cases}$$

$$V(y) = \begin{cases} 0 \text{ nếu } y \in (0,b) \\ \infty \text{ nếu khác} \end{cases}$$

$$V(z) = \begin{cases} 0 \text{ nếu } z \in (0,c) \\ \infty \text{ nếu khác} \end{cases}$$



BT: Quantum dot

Sử dụng kết quả đã có, hãy xác định
các trạng thái dừng (hàm sóng $\psi(x, y, z)$)
và năng lượng tương ứng E.

Hãy xét trường hợp $a = b = c = L$.
Xác định trạng thái nền và năng lượng tương ứng.

Quantum dot

Sử dụng kết quả đã có, hãy xác định
các trạng thái dừng (hàm sóng $\psi(x, y, z)$)
và năng lượng tương ứng E.

Hãy xét trường hợp $a = b = c = L$.
Xác định: i) trạng thái nền và năng lượng tương ứng, ii) trạng thái kích thích thứ nhất và năng lượng tương ứng – hãy nhận xét trường hợp này.