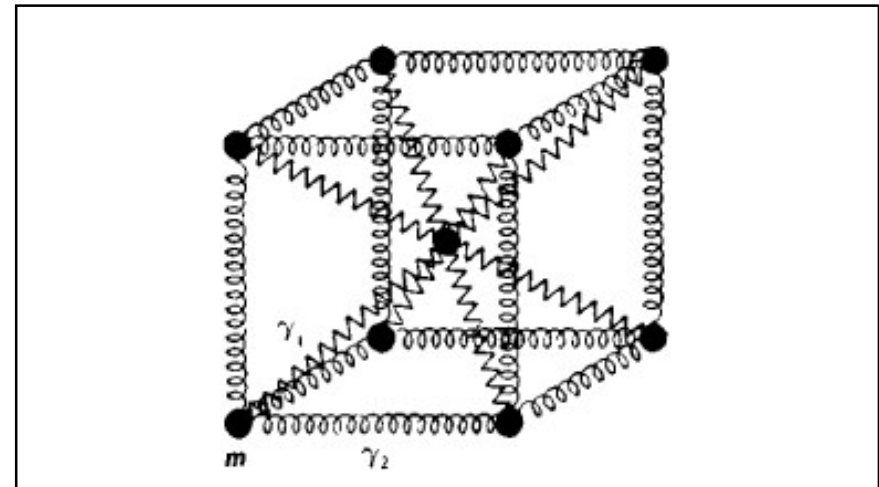
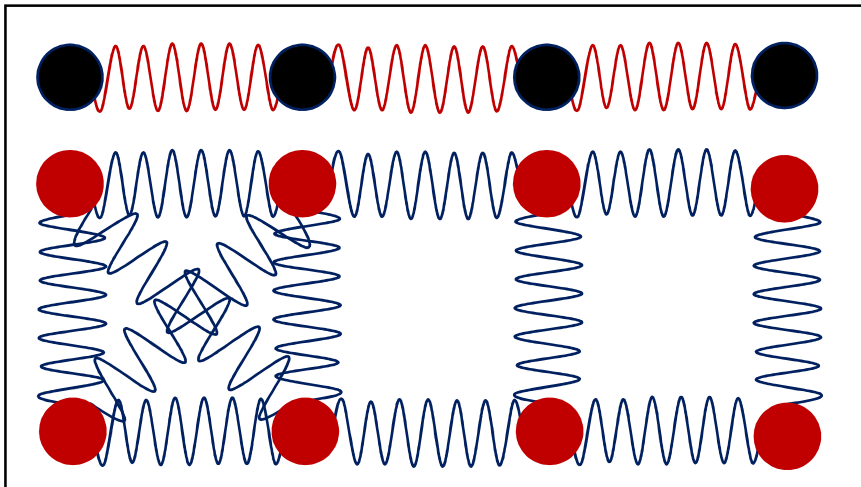
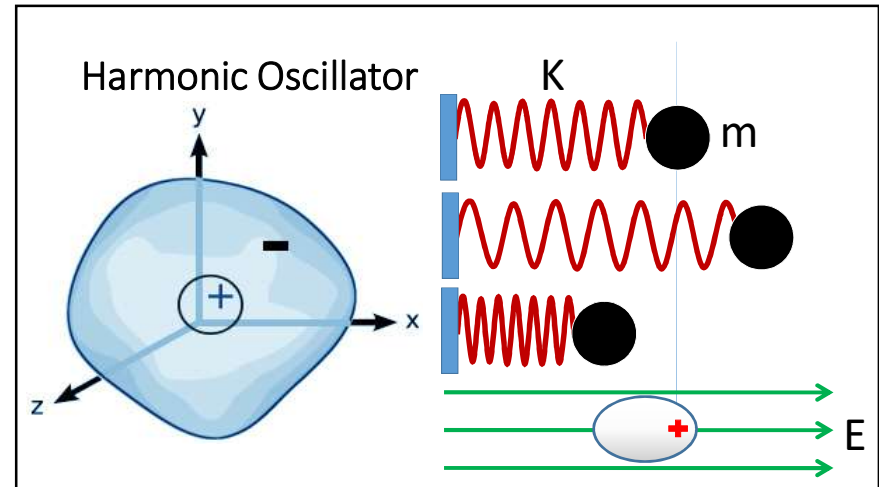


Dao động tử điều hòa
Harmonic oscillator



Cơ cổ điển

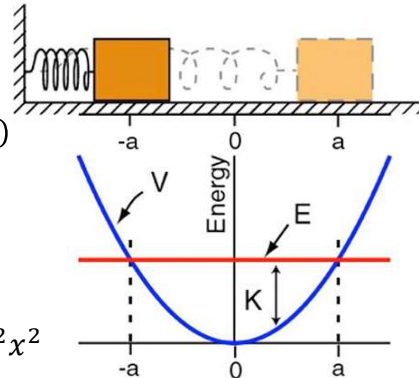
$$F = -kx = m \frac{d^2x}{dt^2}$$

$$x(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t)$$

$$\omega \equiv \sqrt{k/m}$$

$$V = \frac{1}{2} kx^2$$

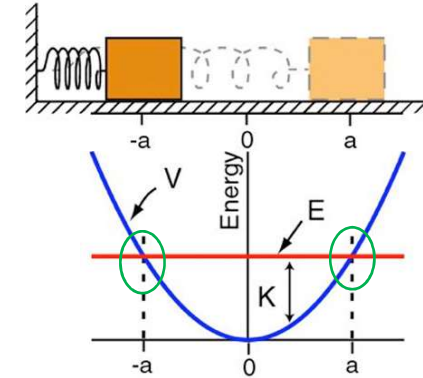
$$V = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$



Cơ cổ điển

$$V = \frac{1}{2} kx^2$$

$$V = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$



Điểm quay đầu
cổ điển.
Xác định ?

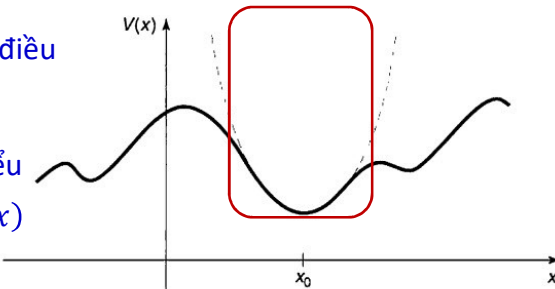
- Không có dao động điều hòa hoàn hảo

- $V(x) \sim$ thể parabol trong lân cận cực tiểu

- Khai triển Taylor $V(x)$ quanh cực tiểu:

$$V(x) = \overset{\text{Const.}}{V(x_0)} + \overset{0}{V'(x_0)}(x - x_0) + \frac{1}{2} V''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots$$

$$V(x) \cong \frac{1}{2} \boxed{V''(x_0)} (x - x_0)^2 = \frac{1}{2} \boxed{k} x^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$



Năng lượng toàn phần (cơ cổ điển)

$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

Cơ lượng tử

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

Cơ lượng tử

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

PT Schrödinger không phụ thuộc thời gian: $\hat{H}\psi = E\psi$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi \quad [2.44]$$

Phương trình Schrödinger cho DĐTĐH

- Cách giải đại số
- Cách giải tích

Cách giải đại số

- Đổi biến: $(x, p) \rightarrow (a_+, a_-)$ (toán tử bậc thang)
- Viết Hamiltonian $H(x, p)$ theo $H(a_+, a_-)$
- PT Schroedinger $H\psi = E\psi$
- Xác định hàm sóng ψ và năng lượng E

Biến đổi tọa độ suy rộng $\rightarrow$ toán tử bậc thang

PT Schrödinger KPTTG $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$

$$\frac{1}{2m} [p^2 + (m\omega x)^2] \psi = E\psi \quad [2.45]$$

$$H = \frac{1}{2m} [p^2 + (m\omega x)^2] \quad [2.46]$$

SỐ: $u^2 + v^2 = (iu + v)(-iu + v) = u^2 + v^2 + i(\cancel{uv} - \cancel{vu})$

TTỬ: $u^2 + v^2 \neq (iu + v)(-iu + v) = u^2 + v^2 + i(\cancel{uv} - \cancel{vu})$

Toán tử thường không giao hoán $\rightarrow uv - vu \neq 0$

Ví dụ: xp khác px !

Giải PT Sch. – cách đại số [toán tử bậc thang]

$$H = \frac{1}{2m} (p^2 + (m\omega x)^2)$$

$$\underbrace{(iu + v)}_{A_-} \underbrace{(-iu + v)}_{A_+} = \underbrace{u^2 + v^2}_{[2.47]} + i(uv - vu)$$

$$a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (\mp ip + m\omega x)$$

$$a_+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (-ip + m\omega x) \quad a_- = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (+ip + m\omega x)$$

Giải PTS – cách đại số [toán tử bậc thang]

$$a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (\mp ip + m\omega x)$$

$$a_- a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega} (+ip + m\omega x)(-ip + m\omega x)$$

$$a_- a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega} [p^2 + (m\omega x)^2 - im\omega (xp - px)]$$

Giao hoán tử

Giao hoán tử của hai toán tử A và B là

$$[A, B] \equiv AB - BA \quad [2.48]$$

Giao hoán tử bằng 0 $\rightarrow$ hai toán tử này được gọi là giao hoán với nhau (có thể đổi chỗ cho nhau):

$$[A, B] = AB - BA = 0 \rightarrow AB = BA$$

$$a_- a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega} [p^2 + (m\omega x)^2 - im\omega \underbrace{(xp - px)}_{[x,p]}]$$

$$a_- a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega} [p^2 + (m\omega x)^2] - \frac{i}{2\hbar} [x, p] \quad [2.49]$$

Xác định giao hoán tử

$$[A, B] = ?$$

Tác động giao hoán tử lên 1 hàm thử: $[A, B]f(x)$

$$[A, B]f(x) = (AB - BA)f(x) = ABf(x) - BAf(x)$$

$$= A(Bf(x)) - B(Af(x)) = Xf(x) \rightarrow [A, B] = X$$

Xác định giao hoán tử $[x, p]$

Xác định giao hoán tử $[x, p]$

$$\begin{aligned}
 [x, p]f(x) &= \left[x \frac{\hbar}{i} \left(\frac{d}{dx} f(x) \right) - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (x f(x)) \right] \quad p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \\
 &= \left[x \cancel{\frac{\hbar}{i} \left(\frac{d}{dx} f(x) \right)} - \frac{\hbar}{i} \left(\frac{d}{dx} x \right) f(x) - \cancel{\frac{\hbar}{i} x \left(\frac{d}{dx} f(x) \right)} \right] \quad [2.50] \\
 &= -\frac{\hbar}{i} f(x) = i\hbar f(x)
 \end{aligned}$$

$$[x, p] = i\hbar$$

[2.51]

Hamiltonian theo a_- và a_+

$$a_- a_+ = \frac{1}{2\hbar m \omega} [p^2 + (m\omega x)^2] - \frac{i}{2\hbar} [x, p]$$

$$a_- a_+ = \frac{1}{\hbar \omega} \underbrace{\frac{1}{2m} [p^2 + (m\omega x)^2]}_H - \frac{i}{2\hbar} i\hbar$$

$$a_- a_+ = \frac{1}{\hbar \omega} H + \frac{1}{2} \quad [2.52]$$

$$H = \hbar \omega \left(a_- a_+ - \frac{1}{2} \right) \quad [2.53]$$

Tính Hamiltonian theo a_- và a_+

$$a_+ a_- = ?$$

Tính Hamiltonian theo a_- và a_+

$$a_+a_- = \frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2} \quad [2.54]$$

$$[a_-, a_+] = 1 \quad [2.55]$$

$$H = \hbar\omega \left(a_+a_- + \frac{1}{2} \right) \quad [2.56]$$

PT Schroedinger theo a_- và a_+

$$H\psi = \hbar\omega \left(a_+a_- + \frac{1}{2} \right) \psi = E\psi$$

$$H\psi = \hbar\omega \left(a_-a_+ - \frac{1}{2} \right) \psi = E\psi$$

$$\hbar\omega \left(a_{\pm}a_{\mp} \pm \frac{1}{2} \right) \psi = E\psi \quad [2.57]$$

Xác định hàm sóng – bước 1

Nếu hàm sóng ψ thỏa PT Schroedinger $H\psi = E\psi$
thì $a_+\psi$ thỏa PT $H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$
và $a_-\psi$ thỏa PT $H(a_-\psi) = (E - \hbar\omega)(a_-\psi)$

Xác định hàm sóng – bước 1

Chứng minh $H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$

$$\begin{aligned} Ha_+\psi &= \hbar\omega \left(a_+a_- + \frac{1}{2} \right) a_+\psi = \hbar\omega \left(a_+a_-a_+ + \frac{1}{2}a_+ \right) \psi \\ &= \hbar\omega a_+ \left(\underbrace{a_-a_+}_{[a_-, a_+] = 1} + \frac{1}{2} \right) \psi = a_+ \hbar\omega \left(a_+a_- + \frac{1}{2} + 1 \right) \psi \\ &= a_+ \left[\underbrace{\hbar\omega \left(a_+a_- + \frac{1}{2} \right) \psi}_{H\psi = E\psi} + \hbar\omega \psi \right] = a_+ (E + \hbar\omega) \psi \end{aligned}$$

Xác định hàm sóng – bước 1

$$\text{Chứng minh } H(a_-\psi) = (E - \hbar\omega)(a_-\psi)$$

Xác định hàm sóng – bước 1

$$\text{Chứng minh } H(a_-\psi) = (E - \hbar\omega)(a_-\psi)$$

$$\begin{aligned} Ha_-\psi &= \hbar\omega \left(a_-a_+ - \frac{1}{2} \right) a_-\psi = \hbar\omega \left(a_-a_+a_- - \frac{1}{2}a_- \right) \psi \\ &= \hbar\omega a_- \left(\underbrace{a_+a_-}_{a_-a_+-1} - \frac{1}{2} \right) \psi = a_- \hbar\omega \left(a_-a_+ - \frac{1}{2} - 1 \right) \psi \\ &= a_- \left[\underbrace{\hbar\omega \left(a_-a_+ - \frac{1}{2} \right) \psi}_{H\psi=E\psi} - \hbar\omega \psi \right] = a_- (E - \hbar\omega) \psi \end{aligned}$$

Xác định hàm sóng – bước 1

$$H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$$

a_+ giúp tăng thêm 1 lượng
 $\hbar\omega$: leo lên thêm 1 bậc năng
 lượng $\hbar\omega$. a_+ : toán tử tăng

$$\begin{aligned} H(a_+(a_+\psi)) \\ &= (E + \hbar\omega + \hbar\omega)(a_+(a_+\psi)) \end{aligned}$$

$$H(a_+^2\psi) = (E + 2\hbar\omega)(a_+^2\psi)$$

$$H(a_+^n\psi) = (E + n\hbar\omega)(a_+^n\psi)$$

a_+ : toán tử tăng

Xác định hàm sóng – bước 1

$$H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$$

$$H(a_-\psi) = (E - \hbar\omega)(a_-\psi)$$

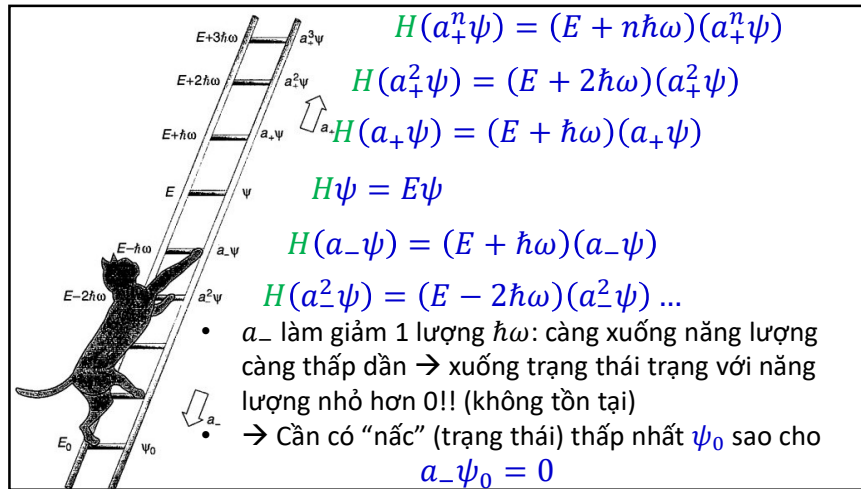
$$\begin{aligned} H(a_+(a_+\psi)) \\ &= (E + \hbar\omega + \hbar\omega)(a_+(a_+\psi)) \\ H(a_+^2\psi) &= (E + 2\hbar\omega)(a_+^2\psi) \\ H(a_+^n\psi) &= (E + n\hbar\omega)(a_+^n\psi) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H(a_-^2\psi) &= (E - 2\hbar\omega)(a_-^2\psi) \\ &\dots \end{aligned}$$

a_+ giúp tăng thêm 1 lượng
 $\hbar\omega$: leo lên thêm 1 bậc năng
 lượng $\hbar\omega$. a_+ : toán tử tăng

a_- giúp giảm đi 1 lượng $\hbar\omega$:
 leo xuống 1 bậc năng lượng
 $\hbar\omega$. a_- : toán tử giảm

a_+ , a_- được gọi là toán tử bậc thang (hay toán tử sinh hủy)



Xác định hàm sóng – bước 2

- a_- làm giảm đi 1 lượng $\hbar\omega$: càng xuống năng lượng càng thấp dần $\rightarrow$ xuống trạng thái trạng với năng lượng nhỏ hơn 0!! (không tồn tại)
- $\rightarrow$ Cần có “nấc” (trạng thái) thấp nhất ψ_0 sao cho

$$a_- \psi_0 = 0 \quad [2.58]$$

$$\psi_0 = ? \quad a_- \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (ip + m\omega x) \psi_0 \quad p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \psi_0 = 0$$

Xác định hàm sóng – bước 2

$$\left(\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \psi_0 = 0 \Leftrightarrow \frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0$$

$$\int \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} \int x dx \Rightarrow \ln \psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \text{hằng số}$$

$$\Rightarrow \psi_0 = A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad A \text{ là hằng số}$$

Xác định hàm sóng – bước 2

Tìm A từ đk chuẩn hóa:

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}$$

$$\Rightarrow \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad [2.59]$$

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 3

Năng lượng E_0 tương ứng với trạng thái $\psi_0(x)$

$$\begin{aligned} H \psi_0 &= E_0 \psi_0 \\ \hbar\omega \left(a_+ a_- + \frac{1}{2} \right) \psi_0 &= E_0 \psi_0 \\ a_- \psi_0 = 0 &\Rightarrow \frac{1}{2} \hbar\omega \psi_0 = E_0 \psi_0 \\ E_0 &= \frac{1}{2} \hbar\omega \end{aligned} \quad [2.60]$$

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 4

Trạng thái $\psi_n(x)$ và năng lượng E_n

$$\psi_n(x) = A_n a_+^n \psi_0(x) \quad \text{với} \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad [2.61]$$

A_n là hằng số chuẩn hóa

Tìm trạng thái kích thích thứ nhất

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 a_+ \psi_0(x) = A_1 \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (-ip + m\omega x) \psi_0(x) \\ \psi_1(x) &= A_1 \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \\ &= A_1 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \end{aligned} \quad [2.62]$$

Chuẩn hóa: $\int |\psi_1(x)|^2 dx = 1$ cho $A_1 = 1$

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 5

Xác định hằng số chuẩn hóa A_n

$$a_+ \psi_n = c_n \psi_{n+1}, \quad a_- \psi_n = d_n \psi_{n-1} \quad [2.63]$$

Tìm c_n, d_n

Sử dụng

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_{\pm} g) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\mp} f)^* g dx \quad [2.64]$$

“Bài tập nhỏ”: CM $a_{\pm} = (a_{\mp})^*$ và [2.64] !

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 5

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_{\pm}g) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\mp}f)^* g dx \quad [2.64]$$

Chọn: $f = a_{\pm}\psi_n$, $g = \psi_n$

$$\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\pm}\psi_n)^*(a_{\pm}\psi_n) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\mp}a_{\pm}\psi_n)^*\psi_n dx$$

Chú ý: $a_+a_-\psi_n = n\psi_n$ và $a_-a_+\psi_n = (n+1)\psi_n$ [2.65]

$$\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\pm}\psi_n)^*(a_{\pm}\psi_n) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\mp}a_{\pm}\psi_n)^*\psi_n dx$$

CM 2.65

$$\hbar\omega \left(a_{\pm}a_{\mp} \pm \frac{1}{2} \right) \psi = E\psi \Rightarrow \hbar\omega \left(a_{\pm}a_{\mp} \pm \frac{1}{2} \right) \psi_n = E_n \psi_n$$

$$\psi_n(x) = A_n a_+^n \psi_0(x) \text{ với } E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$$

$$\Rightarrow \hbar\omega \left(a_{\pm}a_{\mp} \pm \frac{1}{2} \right) \psi_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \psi_n$$

$$\Rightarrow \left(a_{\pm}a_{\mp} \pm \frac{1}{2} \right) \psi_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \psi_n$$

$$\Rightarrow a_+a_-\psi_n = n\psi_n \text{ và } a_-a_+\psi_n = (n+1)\psi_n \quad [2.65]$$

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 5

$$\int_{-\infty}^{\infty} (a_{\pm}\psi_n)^*(a_{\pm}\psi_n) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\mp}a_{\pm}\psi_n)^*\psi_n dx$$

$$a_+a_-\psi_n = n\psi_n \text{ và } a_-a_+\psi_n = (n+1)\psi_n$$

$$a_+\psi_n = c_n\psi_{n+1}, \quad a_-\psi_n = d_n\psi_{n-1}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} (a_+\psi_n)^*(a_+\psi_n) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} (a_-a_+\psi_n)^*\psi_n dx \\ &= |c_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n+1}|^2 dx = (n+1) \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} (a_-\psi_n)^*(a_-\psi_n) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} (a_+a_-\psi_n)^*\psi_n dx \\ &= |d_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n-1}|^2 dx = n \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx \end{aligned}$$

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 5

$$|c_n|^2 = (n+1) \quad |d_n|^2 = n$$

$$\Rightarrow a_+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}, \quad a_-\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1} \quad [2.66]$$

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 5

$$a_+ \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}, \quad a_- \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1} \quad [2.66]$$

$$\Rightarrow \psi_1 = a_+ \psi_0, \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} a_+ \psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} a_+ a_+ \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_+)^2 \psi_0$$

$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} a_+ \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3 \cdot 2}} (a_+)^3 \psi_0, \psi_4 = \frac{1}{\sqrt{4}} a_+ \psi_3 = \frac{1}{\sqrt{4 \cdot 3 \cdot 2}} (a_+)^3 \psi_0$$

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a_+)^n \psi_0 \quad [2.67]$$

Trực chuẩn của hàm sóng

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn} \quad [2.68]$$

“Bài tập nhỏ”: CM [2.68]

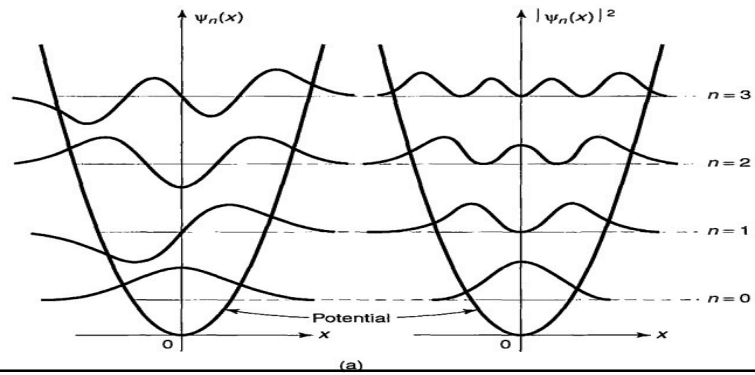
Ví dụ

- Tìm giá trị trung bình của thế năng ở trạng thái thứ n của dao động tử điều hòa.

$$a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m \omega}} (\mp i p + m \omega x)$$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_+ + a_-), \quad p = i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (a_+ - a_-) \quad [2.69]$$

Hàm sóng và mật độ xác suất (sách Griffiths)



Hàm sóng (trái) và mật độ xác suất (phải)

[Hình lấy từ en.wikipedia.org/wiki/Quantum_harmonic_oscillator]

