

Hạt tự do

Hạt tự do: $V = 0$

→ Hamiltonian chỉ còn thành phần động năng

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

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

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

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

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

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

Sóng lan truyền sang phải và trái

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

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

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)

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

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

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

(k được gọi là vector sóng)

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

→ 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

NL rời rạc: $E = E_n$

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \Psi_n(x, t)$$

Hạt tự do

NL liên tục $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

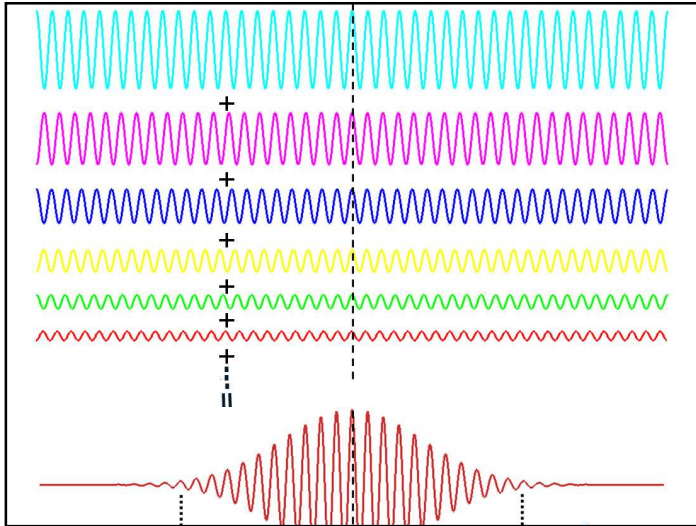
$$\Psi(x, t) = \int \phi(k) \Psi_k(x, t) dk$$

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

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

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

- Hàm sóng chồng chập của nhiều sóng theo vector sóng k .
- Có thể chuẩn hóa!
- Có thể định xứ (local)
- Hàm sóng gồm một dải của 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 $f(x)$

$$\Leftrightarrow F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad [2.102]$$

$f(x)$ 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 $\phi(k)$

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

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

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

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

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

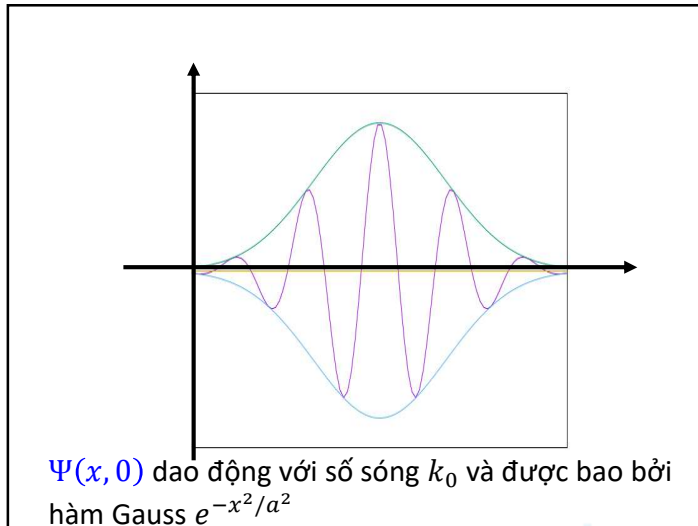
$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2(k-k_0)^2/4} e^{ikx} dk$$

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

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

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

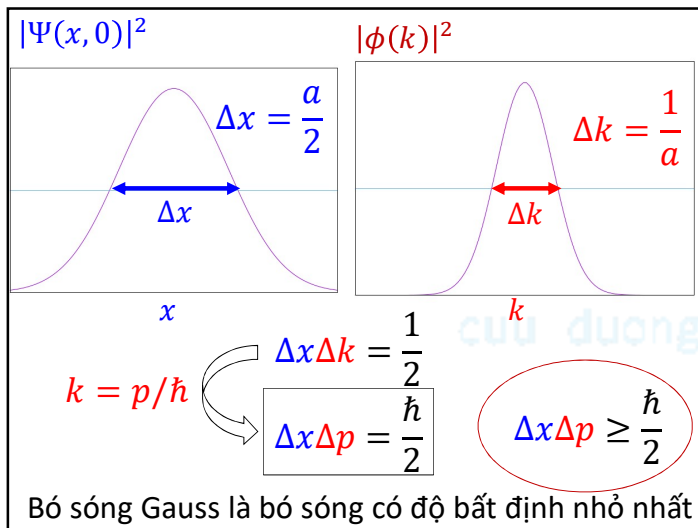
$$\phi(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \exp\left[\frac{-a^2(k - k_0)^2}{4}\right]$$



Bó sóng Gauss

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

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



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.

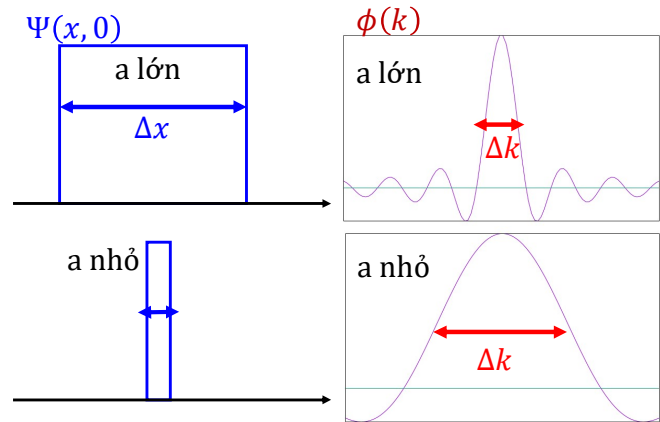
Tìm $\phi(k)$ và $\Psi(x, t)$

Ví dụ: Bó sóng chữ nhật [ví dụ 2.6]

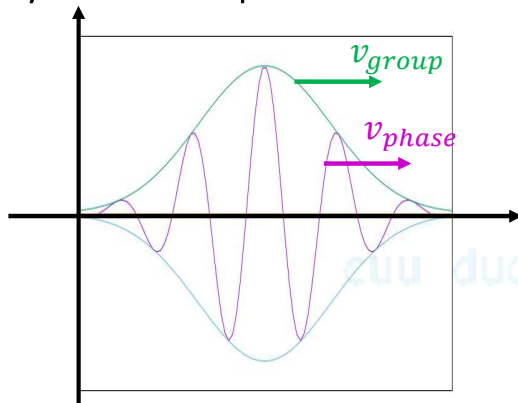
$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \frac{\sin(ka)}{k}$$

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

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: $\omega = \omega(k)$ ($\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$)

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

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

$$\omega(k) \cong \omega_0 + \underbrace{\omega'_0}_{s} (k - k_0)$$

Lan truyền của wave packet

$$\begin{aligned}\Psi(x, t) &\cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k_0 + s) e^{i[(k_0+s)x - (\omega_0 + \omega'_0 s)t]} ds \\ \Psi(x, t=0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k_0 + s) e^{i[(k_0+s)x]} dk \\ \Psi(x, t) &\cong e^{i[-\omega_0 t + k_0 \omega'_0 t]} \\ &\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k_0 + s) e^{i[(k_0+s)(x - \omega'_0 t)]} dk \\ &\Psi(x - \omega'_0 t, 0)\end{aligned}$$

$$\Psi(x, t) \cong e^{i[-\omega_0 t + k_0 \omega'_0 t]} \Psi(x - \omega'_0 t, 0)$$

→ 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 $E = mv^2/2$

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

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