

Phương trình Schrödinger 3 chiều (3D)

Giới thiệu

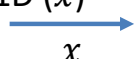
Phương trình Schrödinger tổng quát

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

Toán tử Hamiltonian H (cổ điển)

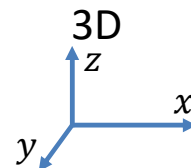
$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + V$$

1D $\rightarrow$ 3D

1D (x)  $p^2 = p_x^2 \quad H = \frac{1}{2m} p_x^2 + V$

2D (x, y)  $p^2 = p_x^2 + p_y^2$
 $H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + V$

3D (x, y, z)  $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$
 $H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V$



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

$$\vec{p} \equiv \mathbf{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \right) \equiv \frac{\hbar}{i} \nabla \quad [4.3]$$

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

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

Phương trình Schrödinger 3D

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

với toán tử Laplace trong tọa độ Descartes

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


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

Phương trình Schrödinger 3D

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

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

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

Phương trình Schrödinger 3D

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

→ tập hợp đầy đủ các trạng thái dừng

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar} \quad [4.7]$$

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

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

Phương trình Schrödinger 3D

$V = V(\mathbf{r})$: Nghiệm tổng quát

$$\Psi = \sum_n \Psi_n(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar} \quad [4.9]$$

Bài tập “nhỏ”

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

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

Bài tập “nhỏ”

$$\begin{aligned} [r_i, p_j] &= -[p_j, r_i] = i\hbar\delta_{ij}, \\ [r_i, r_j] &= [p_i, p_j] = 0 \end{aligned} \quad [4.10]$$

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

Bài tập “nhỏ”

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

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

$$\sigma_x \sigma_{p_x} \geq \frac{\hbar}{2},$$

$$\sigma_y \sigma_{p_y} \geq \frac{\hbar}{2},$$

$$\sigma_z \sigma_{p_z} \geq \frac{\hbar}{2}$$

[4.12]

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

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

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

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

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:

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

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

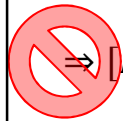
$$\begin{aligned} [H_x(x) + H_y(y) + H_z(z)]X(x)Y(y)Z(z) \\ = E X(x)Y(y)Z(z) \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

$$\frac{1}{X} H_x X + \frac{1}{Y} H_y Y + \frac{1}{Z} H_z Z = E$$

Tọa độ Descartes

$$\frac{1}{X(x)} H_x X(x) + \frac{1}{Y(y)} H_y Y(y) + \frac{1}{Z(z)} H_z Z(z) = E$$

$$\frac{1}{X(x)} H_x X(x) = E_x$$

$$\frac{1}{Y(y)} H_y Y(y) = E_y$$

$$\frac{1}{Z(z)} H_z Z(z) = E_z$$

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.

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

$$H_x X(x) = E_x X(x)$$

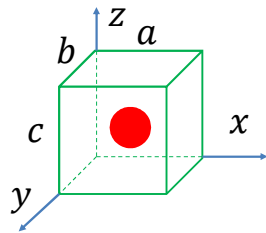
$$H_y Y(y) = E_y Y(y)$$

$$H_z Z(z) = E_z Z(z)$$

Với:

$$E_x + E_y + E_z = E$$

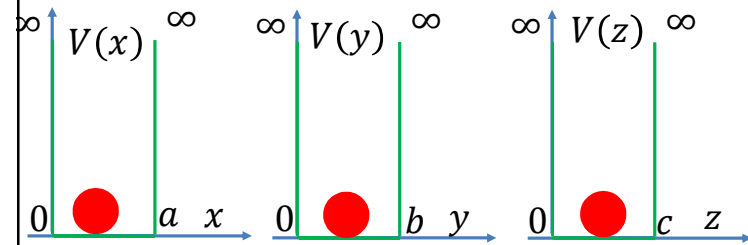
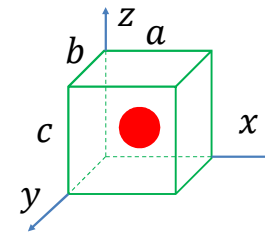
Quantum dot



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

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

Quantum dot



Quantum dot

Phương trình Schrödinger tổng quát

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

Thế năng có dạng

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

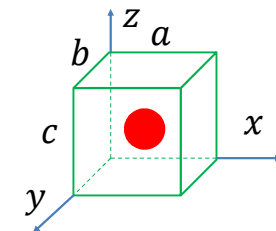
$$V(x, y, z) = V(x) + V(y) + V(z)$$

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.

cuu duong than cong. com

cuu duong than cong. com