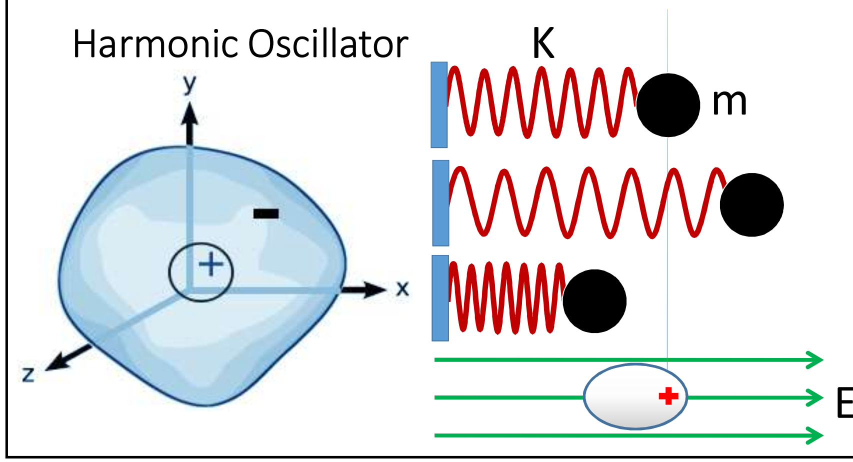
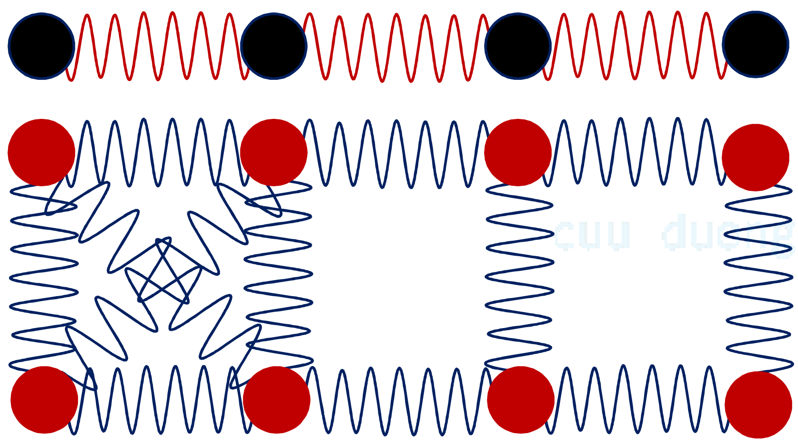
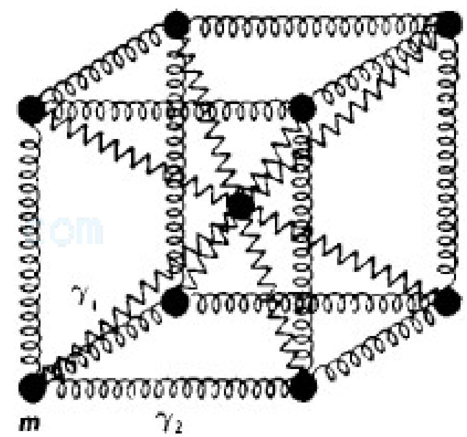
Dao động tử điều hòa
Harmonic oscillator







Cơ cổ điển

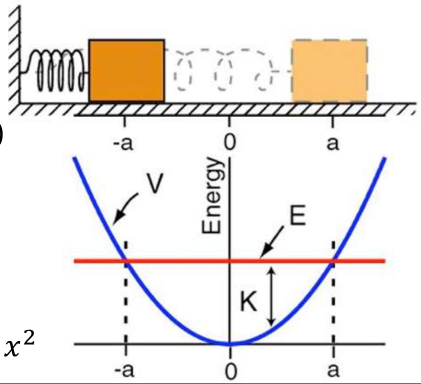
$$F = -kx = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

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

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

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

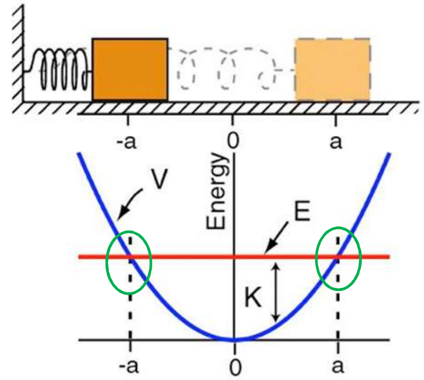
$$V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$



Cơ cổ điển

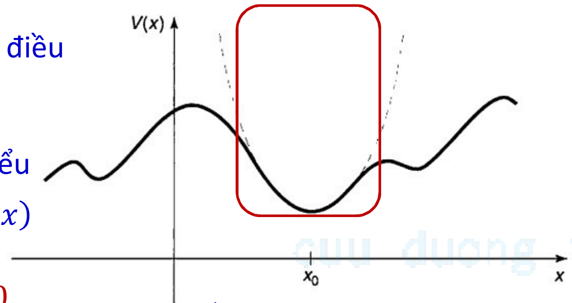
$$V = \frac{1}{2}kx^2$$

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



Điểm quay đầu cổ điển. Xác định ?

- Không có dao động điều hòa hoàn hảo
- $V(x) \sim$ thế parabol trong lân cận cực tiểu
- Khai triển Taylor $V(x)$ quanh cực tiểu:



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

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

Năng lượng toàn phần (cơ cổ điển)

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

Cơ lượng tử

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

Cơ lượng tử

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

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

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

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

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 → toán tử bậc thang

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

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

$$H = \frac{1}{2m}[\underbrace{p^2}_{u^2} + \underbrace{(m\omega x)^2}_{v^2}] \qquad [2.46]$$

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

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

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]

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

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

$$\boxed{a_\pm = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp ip + m\omega x)} \qquad [2.47]$$

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

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

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

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

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

Giao hoán tử

Giao hoán tử của hai toán tử A và B là

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

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

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

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

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

Xác định giao hoán tử

$$[A, B] = ?$$

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

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

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

Xác định giao hoán tử $[x, p]$

Xác định giao hoán tử $[x, p]$

$$[x,p]f(x) = \left[x\frac{\hbar}{i}\left(\frac{d}{dx}f(x)\right) - \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\left(xf(x)\right)\right] \qquad p = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$$

$$= \left[x\frac{\hbar}{i}\cancel{\left(\frac{d}{dx}f(x)\right)} - \frac{\hbar}{i}\left(\frac{d}{dx}x\right)f(x) - \frac{\hbar}{i}x\cancel{\left(\frac{d}{dx}f(x)\right)}\right] \qquad [2.50]$$

$$= -\frac{\hbar}{i}f(x) = i\hbar f(x)$$

$$\boxed{[x,p] = i\hbar} \qquad [2.51]$$

Hamiltonian theo a_- và a_+

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

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

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

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

Tính Hamiltonian theo a_- và a_+

$a_+a_- = ?$

Tính Hamiltonian theo a_- và a_+

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

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

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

PT Schroedinger theo a_- và a_+

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

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

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

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

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

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

$[a_-, a_+] = 1$

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

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

Xác định hàm sóng – bước 1

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

Xác định hàm sóng – bước 1

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

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

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

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

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

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

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

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

a_+: toán tử tăng

Xác định hàm sóng – bước 1

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

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

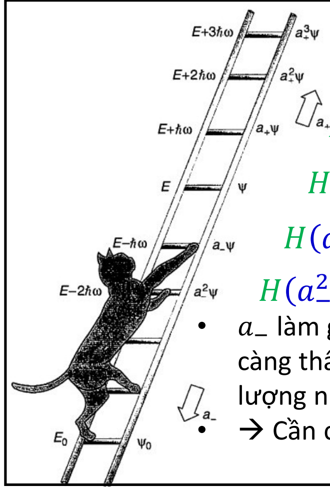
$H(a_-\psi) = (E - \hbar\omega)(a_-\psi)$

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

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



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

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

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

$$H\psi = E\psi$$

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

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

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

$$a_-\psi_0 = 0$$

Xác định hàm sóng – bước 2

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

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

$\psi_0 = ?$

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

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

Xác định hàm sóng – bước 2

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

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

$\implies \psi_0 = Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ A là hằng số

Xác định hàm sóng – bước 2

Tìm A từ đk chuẩn hóa:

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

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

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 3

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

$$H\,\psi_0 = E_0\,\psi_0$$

$$\hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)\psi_0 = E_0\,\psi_0$$

$$a_-\,\psi_0 = 0 \Longrightarrow \frac{1}{2}\hbar\omega\,\psi_0 = E_0\,\psi_0$$

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad [2.60]$$

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 4

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

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

A_n là hằng số chuẩn hóa

Tìm trạng thái kích thích thứ nhất

$$\psi_1(x) = A_1 a_+\,\psi_0(x) = A_1\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-ip + m\omega x)\,\psi_0(x)$$

$$\psi_1(x) = A_1\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$= A_1\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\,x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \qquad [2.62]$$

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

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

Tìm c_n, d_n

Sử dụng

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

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

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 5

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

Chọn: $f = a_\pm \psi_n,\ g = \psi_n$

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

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

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

CM 2.65

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

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

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

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

$\Longrightarrow a_+ a_- \psi_n = n\psi_n$ và $a_- a_+ \psi_n = (n+1)\psi_n$ [2.65]

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 5

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

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

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

→ $\int_{-\infty}^{\infty} (a_+ \psi_n)^*(a_+ \psi_n)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_- a_+ \psi_n)^* \psi_n\, dx$
$= |c_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n+1}|^2\, dx = (n+1) \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2\, dx$

→ $\int_{-\infty}^{\infty} (a_- \psi_n)^*(a_- \psi_n)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_+ a_- \psi_n)^* \psi_n\, dx$
$= |d_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n-1}|^2\, dx = n \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2\, dx$

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 5

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

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

Xác định hàm sóng & năng lượng – bước 5

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

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

$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}a_+\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3.2}}(a_+)^3\psi_0, \psi_4 = \frac{1}{\sqrt{4}}a_+\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{4.3.2}}(a_+)^3\psi_0$$

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

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

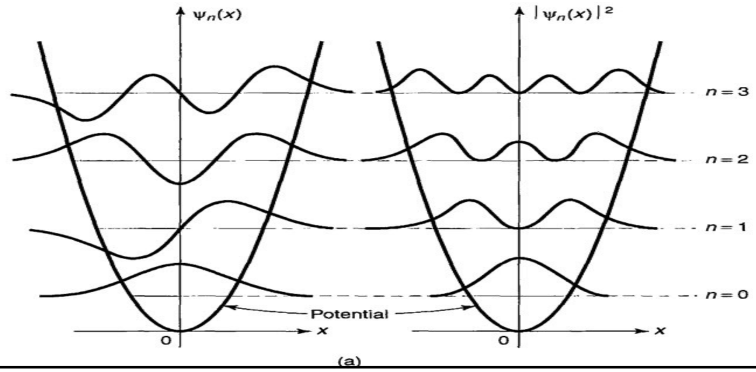
- Tìm giá trị trung bình của thế năng ở trạng thái thứ n của dao động tử điều hòa.

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

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

cuu duong than cong. com

Hàm song 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]