

Hệ nhị phân

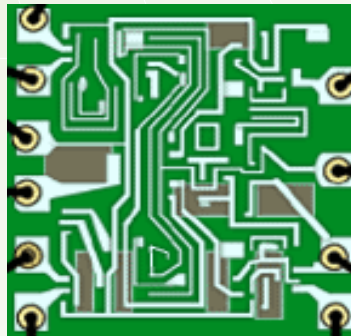
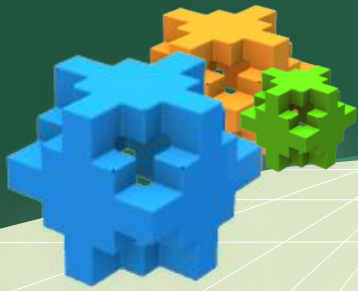
Trong ngôn ngữ nhị phân 1/0, một số 0 hay số 1 là một bit. Số thập phân từ 0 đến 9 có thể được biểu hiện 4 bit cho mỗi số như sau:

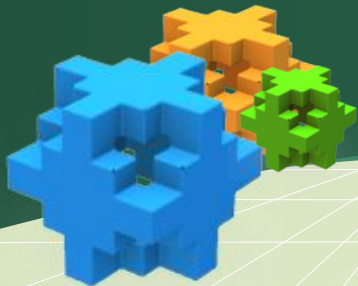
0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0000	0001	0010	0011	0100	0101	0110	0111	1000	1001

Mẫu tự La-tinh, mỗi chữ 8 bit:

a	b	c	d	e	f
01100001	01100010	01100011	01100100	01100101	01100110

transistor





Chương 6: Cơ học lượng tử

6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất

6.2 Phương trình Schrodinger

6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều

6.4 Hệ thức bất định Heisenberg

6.5 Kính hiển vi quét qua



6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất (1)

- a. Giả thuyết De Broglie
- b. Ví dụ
- c. Kiểm chứng
- d. Ứng dụng
- e. Bản chất của sóng vật chất
- f. Bài tập



6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất (1)

Giả thuyết De Broglie

- Ánh sáng có lượng tính sóng-hạt.
- Các hạt vật chất phải chăng cũng có lượng tính sóng-hạt?
- De Broglie, 1923 – các hạt vật chất cũng là sóng, bước *sóng vật chất* (hay *sóng De Broglie*) của một hạt có động lượng p là:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất (2)

Ví dụ 1

- Voi Dumbo khối lượng 1000 kg, bay với vận tốc 10 m/s sẽ có bước sóng De Broglie là bao nhiêu?



$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6,626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{10^3 \text{ kg} \times 10 \text{ m/s}} = 6,626 \times 10^{-38} \text{ m}$$

- Bước sóng này quá nhỏ để có thể quan sát được.



6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất (3)

- Bước sóng De Broglie của một hạt bụi khối lượng 10^{-9} kg rơi với vận tốc $0,020$ m/s.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6,626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{10^{-9} \text{ kg} \times 0,020 \text{ m/s}} = 3,313 \times 10^{-23} \text{ m}$$

- Bước sóng này cũng quá nhỏ để có thể quan sát được.
- Các hạt vĩ mô không thể hiện rõ tính sóng.



6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất (4)

- Một electron trong mạch điện hay trong nguyên tử có động năng trung bình vào khoảng 1 eV, có bước sóng De Broglie bằng:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mK}} = \frac{6,626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{\sqrt{2 \times (9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}) \times (1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J})}}$$
$$= 10^{-9} \text{ m} = 10 \text{ \AA}$$

- Bước sóng này vào cỡ kích thước của nguyên tử nên có thể quan sát được.
- Các hạt vi mô thể hiện rõ tính sóng.



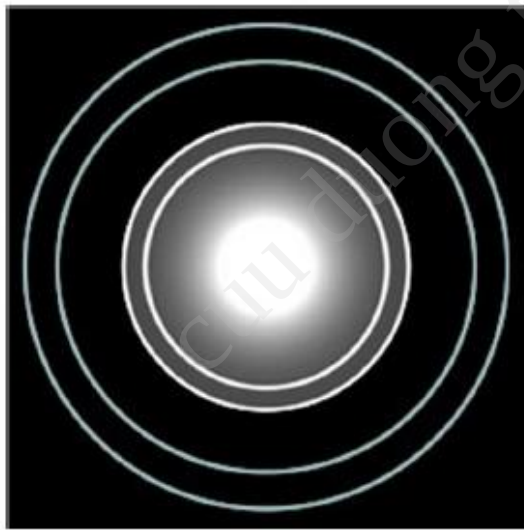
6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất (5)

Kiểm chứng thực nghiệm

- Davisson và Germer, 1927: electron có thể nhiễu xạ trên tinh thể Nickel giống như tia X vậy.
- Nhiễu xạ của electron trên tinh thể cũng tuân theo định luật Bragg.
- Bước sóng electron đo được phù hợp với giả thuyết De Broglie.

6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất (6)

- G. P. Thomson, 1927: electron có thể nhiễu xạ trên màng mỏng kim loại, tạo ra vân tròn tương tự như tia X nhiễu xạ trên bột đa tinh thể.



Electron

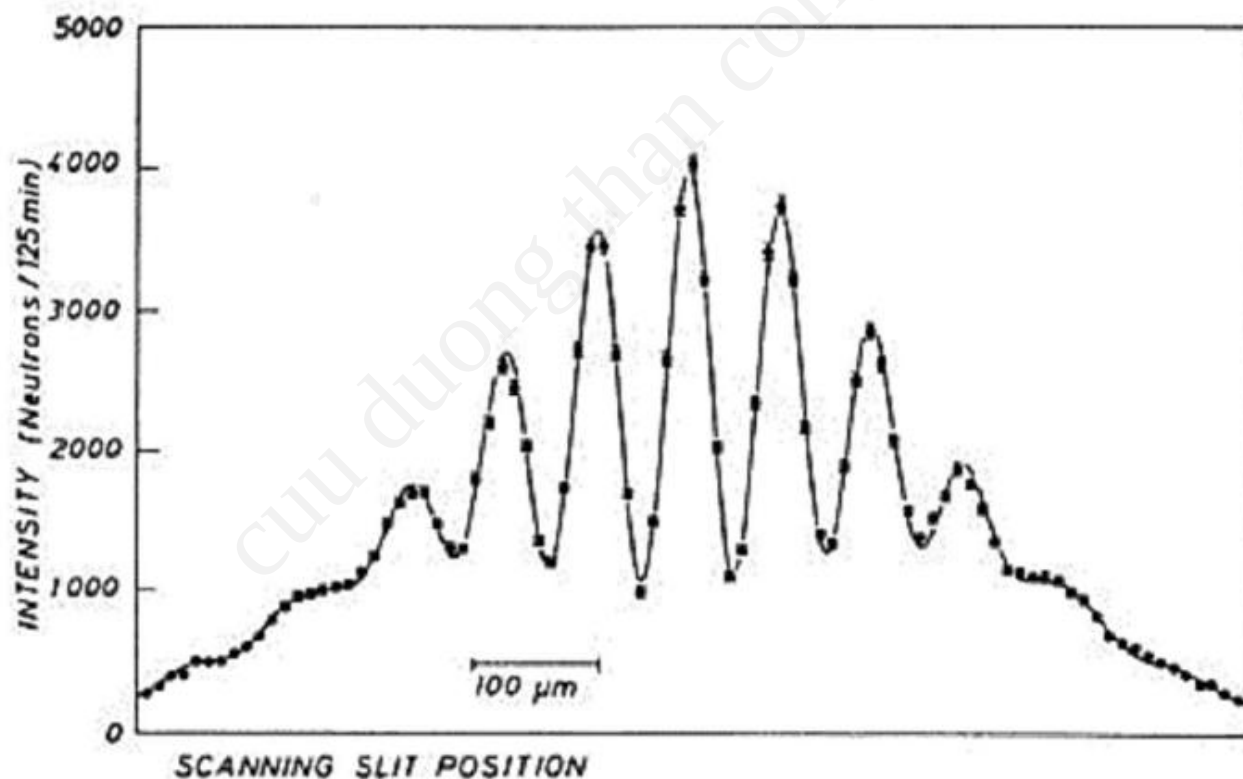


Tia X

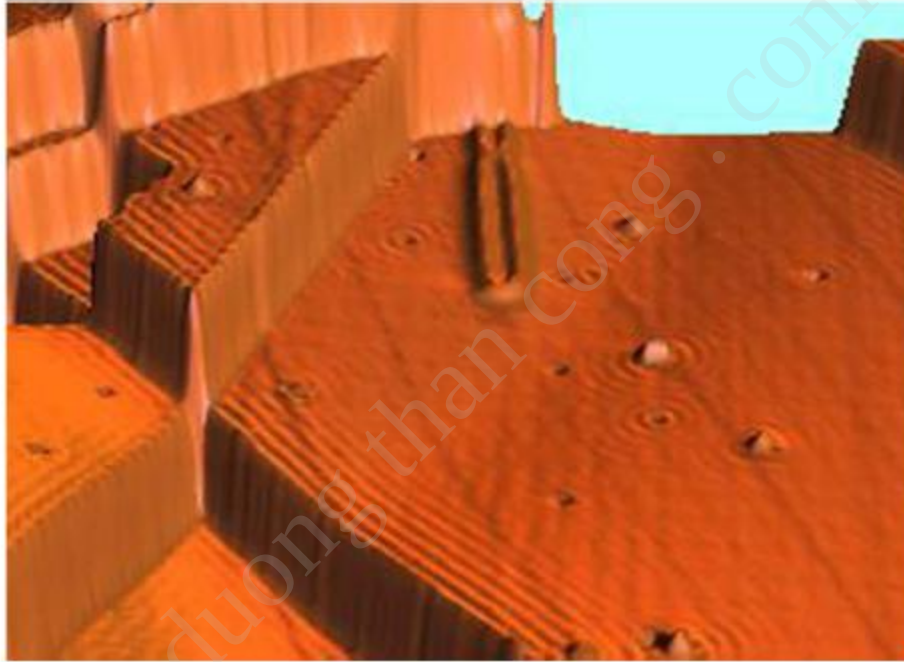


6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất (7)

- Zeilinger et al., 1988: Nhiễu xạ neutron trên hai khe.



6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất (8)



- Sóng dừng của electron trên bề mặt đồng, ảnh chụp bằng *Scanning Tunneling Microscope* (IBM Almaden Research Center).



6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất (9)

Ứng dụng của sóng De Broglie

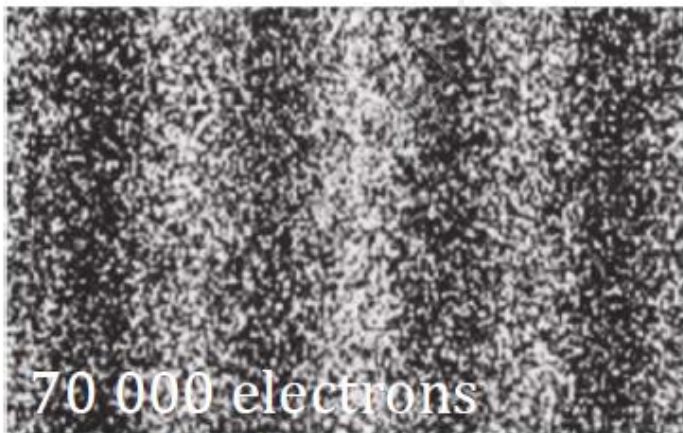
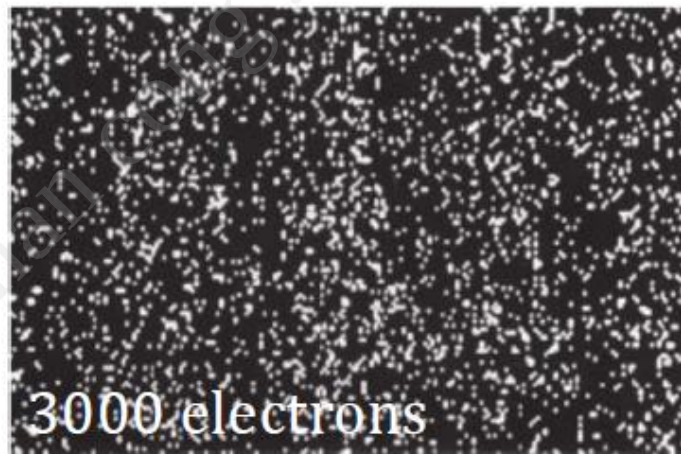
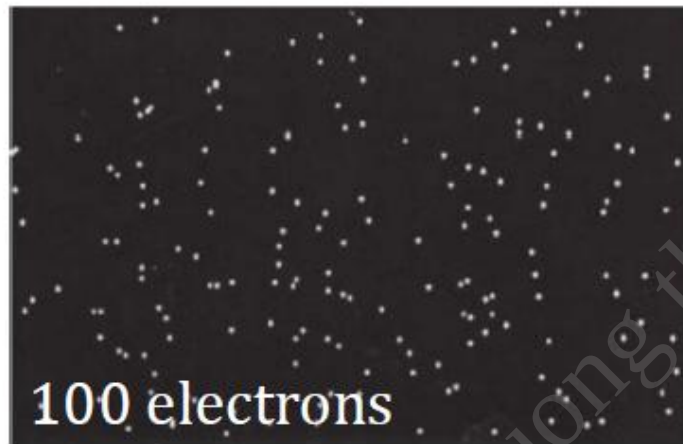
- Kính hiển vi điện tử dùng sóng electron thay cho sóng ánh sáng, có độ phóng đại lên đến 2 triệu lần.
- Nhiều xạ electron, nhiều xạ neutron được dùng để tìm hiểu cấu trúc vật chất, tương tự như nhiều xạ tia X.



6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất (10)

Bản chất của sóng De Broglie

- Giao thoa của sóng electron trên hệ hai khe:



Càng nhiều hạt, quy luật sóng càng rõ.

Nơi hạt đến nhiều cũng là nơi có cường độ sóng lớn.



6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất (11)

- Max Born, 1928: sóng vật chất là *sóng xác suất*.
- Bình phương biên độ hàm sóng ở một vị trí thì tỷ lệ với xác suất tìm thấy hạt tại đó.
- Gọi $\Psi(x,y,z)$ là hàm sóng vật chất tại vị trí (x,y,z) của một hạt, dV là một thể tích nhỏ bao quanh vị trí này, xác suất tìm thấy hạt trong thể tích dV là:

$$dP = |\Psi(x,y,z)|^2 dV$$

- $|\Psi(x,y,z)|^2$ là *mật độ xác suất* của hạt tại (x,y,z) .



6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất (12)

- $\Psi(x,y,z)$ là một số phức, nên ta còn có:

$$|\Psi(x,y,z)|^2 = \Psi \cdot \Psi^*$$

- Xác suất tìm thấy hạt trong toàn bộ không gian V , trong đó hạt tồn tại, phải bằng đơn vị, do đó:

$$\int_V |\Psi(x,y,z)|^2 dV = 1$$

- Đó là *điều kiện chuẩn hóa* của hàm sóng vật chất.



6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất (13)

Bài tập 2

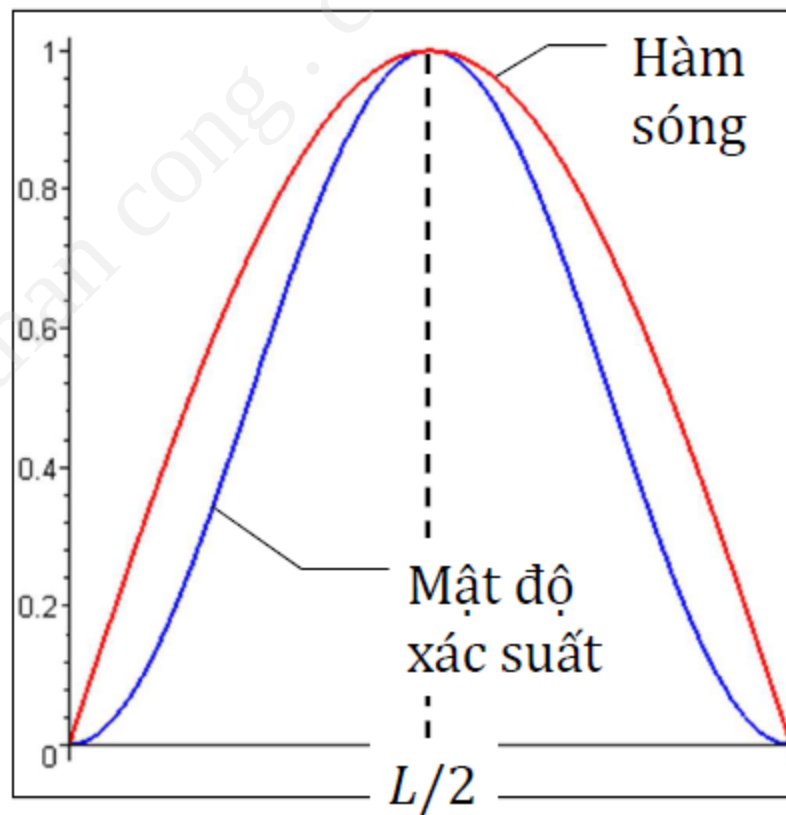
Hàm sóng của một hạt bị “giam” trong khoảng từ 0 đến L là $A\sin(\pi x/L)$, A là một hằng số. Xác suất tìm thấy hạt ở vị trí nào sau đây là lớn nhất?

- (a) $L/4$
- (b) $L/2$
- (c) $3L/4$
- (d) L



6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất (14)

- Mật độ xác suất:
- $w = A^2 \sin^2(\pi x/L)$
- Cực trị của w được cho bởi:
- $\sin(\pi x/L) \cos(\pi x/L) = 0$
- $\pi x/L = 0, \pi/2, \pi$
- $x = 0, L/2, L$
- w cực đại ứng với $x = L/2$.
- Câu trả lời đúng là (b).





6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất (15)

Bài tập 3

Bước sóng De Broglie của một electron được tăng tốc không vận tốc đầu bởi hiệu điện thế U bằng:

(a) $\frac{h}{\sqrt{2m_e eU}}$

(b) $\frac{h}{\sqrt{m_e eU}}$

(c) $\frac{2h}{\sqrt{2m_e eU}}$

(d) $\frac{h}{2\sqrt{m_e eU}}$



6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất (16)

- Động năng của electron sau khi tăng tốc:

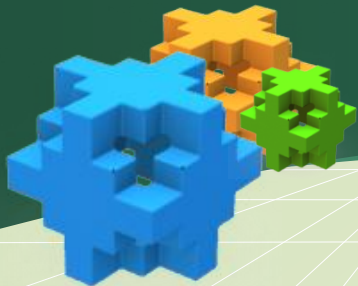
$$K = \frac{p^2}{2m_e} = eU$$

- Suy ra động lượng: $p = \sqrt{2m_e eU}$

- Vậy bước sóng De Broglie là:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e eU}}$$

- Câu trả lời đúng là (a).



Chương 6: Cơ học lượng tử

6.1 Lưỡng tính sóng hạt của vật chất

6.2 Phương trình Schrodinger

6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều

6.4 Hệ thức bất định Heisenberg

6.5 Kính hiển vi quét qua



6.2 Phương trình Schrodinger (1)

- a. Phương trình Schrödinger tổng quát
- b. Phương trình Schrödinger dừng
- c. Hàm sóng của hạt tự do



6.2 Phương trình Schrodinger (2)

2a. Phương trình Schrödinger tổng quát

- Hàm sóng $\Psi(x,y,z,t)$ của một hạt khối lượng m , chuyển động trong trường có thế năng $U(x,y,z,t)$ thỏa phương trình Schrödinger tổng quát:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U \right) \Psi \quad i = \sqrt{-1}$$

- trong đó $\hbar = h/2\pi$, và Δ là *Laplacian*:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$



6.2 Phương trình Schrodinger (3)

2b. Phương trình Schrödinger dừng

- Khi thế năng U không phụ thuộc vào thời gian thì nghiệm của phương trình Schrödinger có thể viết dưới dạng:

$$\Psi(x, y, z, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \Phi(x, y, z)$$

- với E là năng lượng của hạt, $\Phi(x, y, z)$ là *hàm sóng dừng*, thỏa phương trình Schrödinger dừng:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U \right) \Phi = E \Phi$$

$$\Delta \Phi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Phi = 0$$



6.2 Phương trình Schrodinger (4)

2c. Hàm sóng của hạt tự do

- Phương trình Schrödinger dừng của một hạt tự do chuyển động theo dọc trục x :

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Phi = 0$$

- với E bây giờ là động năng của hạt. Phương trình này có nghiệm tổng quát là:

$$\Phi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{p}{\hbar}$$



6.2 Phương trình Schrodinger (5)

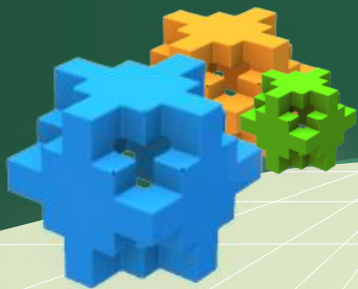
- Hàm sóng ứng với số hạng thứ nhất:

$$\Psi = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \cdot Ae^{i\frac{p}{\hbar}x} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}$$

$$\Psi = Ae^{-i(\omega t - kx)} \quad \omega = \frac{E}{\hbar} \quad k = \frac{p}{\hbar}$$

- là một sóng phẳng truyền theo trục $x > 0$, có tần số góc ω , vector sóng k , và bước sóng phù hợp với giả thuyết De Broglie:

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p}$$



Chương 6: Cơ học lượng tử

6.1 Lượng tính sóng hạt của vật chất

6.2 Phương trình Schrodinger

6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều

6.4 Hệ thức bất định Heisenberg

6.5 Kính hiển vi quét qua



6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều (1)

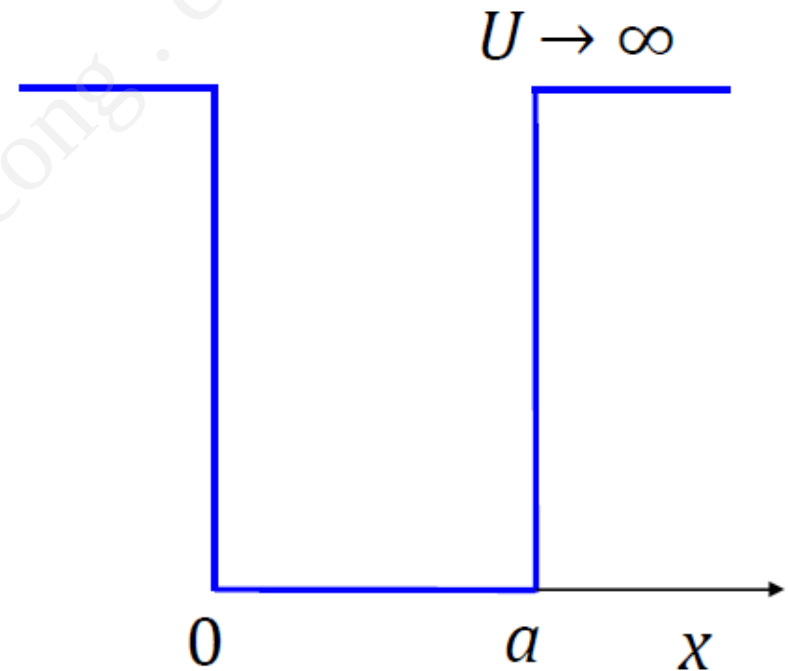
- a. Giếng thế vô hạn một chiều
- b. Năng lượng bị lượng tử hóa
- c. Hàm sóng
- d. Bài tập

6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều (2)

Giếng thế vô hạn một chiều

- Hạt chuyển động trong giếng thế vô hạn một chiều có thể năng xác định bởi :

$$U = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & x \leq 0, x \geq a \end{cases}$$



- trong đó a là độ rộng của giếng thế.

6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều (6)

Hàm sóng

- Phương trình Schrodinger dừng của hạt trong giếng thế:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Phi = 0$$

- Phương trình này có nghiệm tổng quát:

$$\Phi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

$$k = \sqrt{2mE} / \hbar = p / \hbar$$

6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều (7)

- Hàm sóng ở ngoài giếng là bằng không, vì hạt bị giam trong giếng thế vô hạn.
- Ngoài ra, để hàm sóng biến thiên *liên tục* thì ở hai vách giếng nó cũng phải bằng không:

$$\Phi(0) = 0, \quad \Phi(a) = 0$$

$$\Phi(0) = A \sin(0) + B \cos(0) = 0 \Rightarrow B = 0$$

$$\Phi(a) = A \sin(ka) = 0 \Rightarrow \sin(ka) = 0$$

$$k = n\pi/a \quad n = 1, 2, \dots$$

6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều (8)

- Hàm sóng dừng phụ thuộc vào n :

$$\Phi_n(x) = A \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right)$$

- Vì k bị lượng tử hóa nên năng lượng cũng vậy:

$$E_n = \frac{(\hbar k)^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = n^2 \frac{h^2}{8ma^2}$$

- Từ điều kiện chuẩn hóa ta tìm được hằng số A :

$$\Phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right)$$

6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều (9)

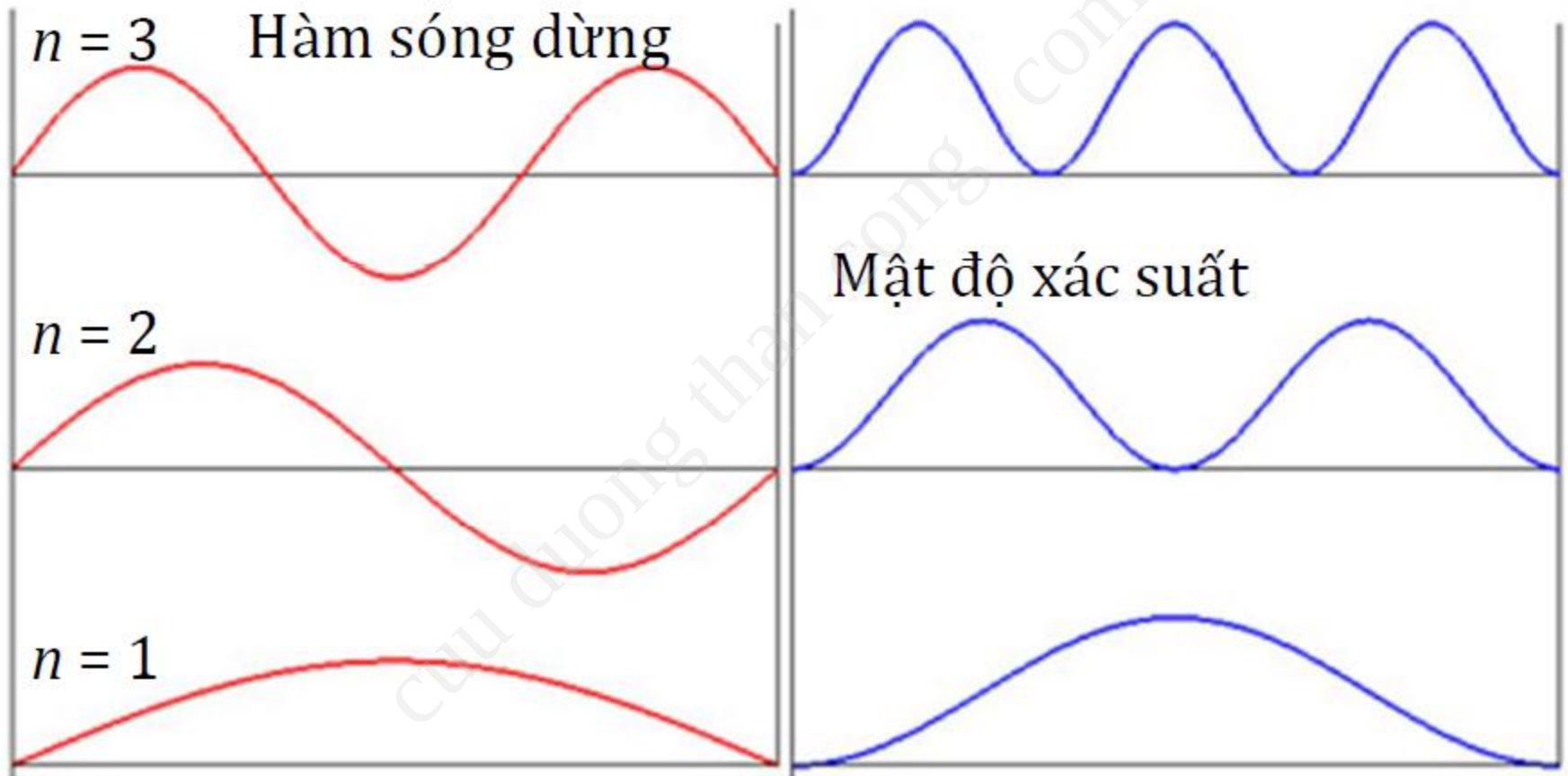
- Hàm sóng (phụ thuộc thời gian) sẽ là:

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right)$$

- Mật độ xác suất của hạt (độc lập với thời gian):

$$|\Psi_n(x, t)|^2 = \Psi_n \cdot \Psi_n^* = \frac{2}{a} \sin^2\left(n \frac{\pi}{a} x\right)$$

6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều (10)



6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều (3)

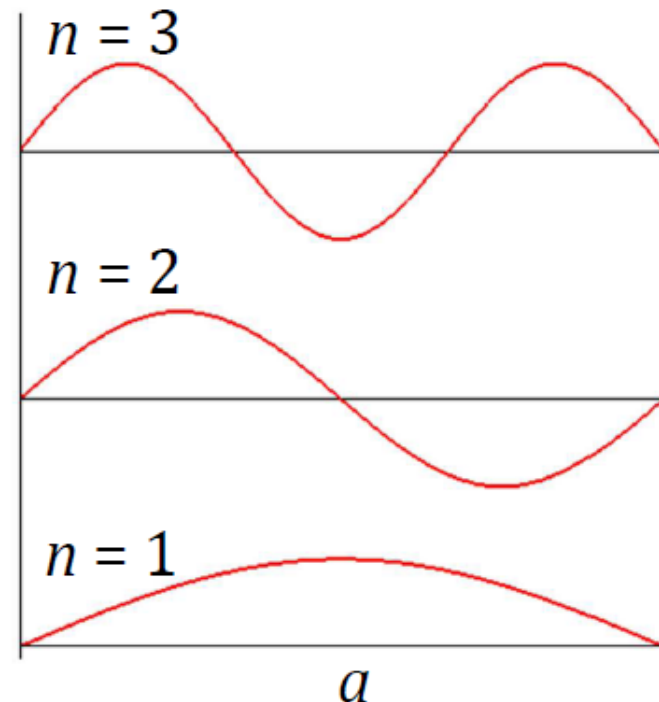
Năng lượng bị lượng tử hóa

- Sóng vật chất chuyển động lui tới giữa hai vách giếng thế, tạo nên sóng dừng.
- Khi đó bề rộng của giếng thế phải là một bội số của một nửa bước sóng:

$$a = n \frac{\lambda}{2} \quad n = 1, 2, \dots$$

- Suy ra động lượng hạt:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2a/n} = n \frac{h}{2a}$$



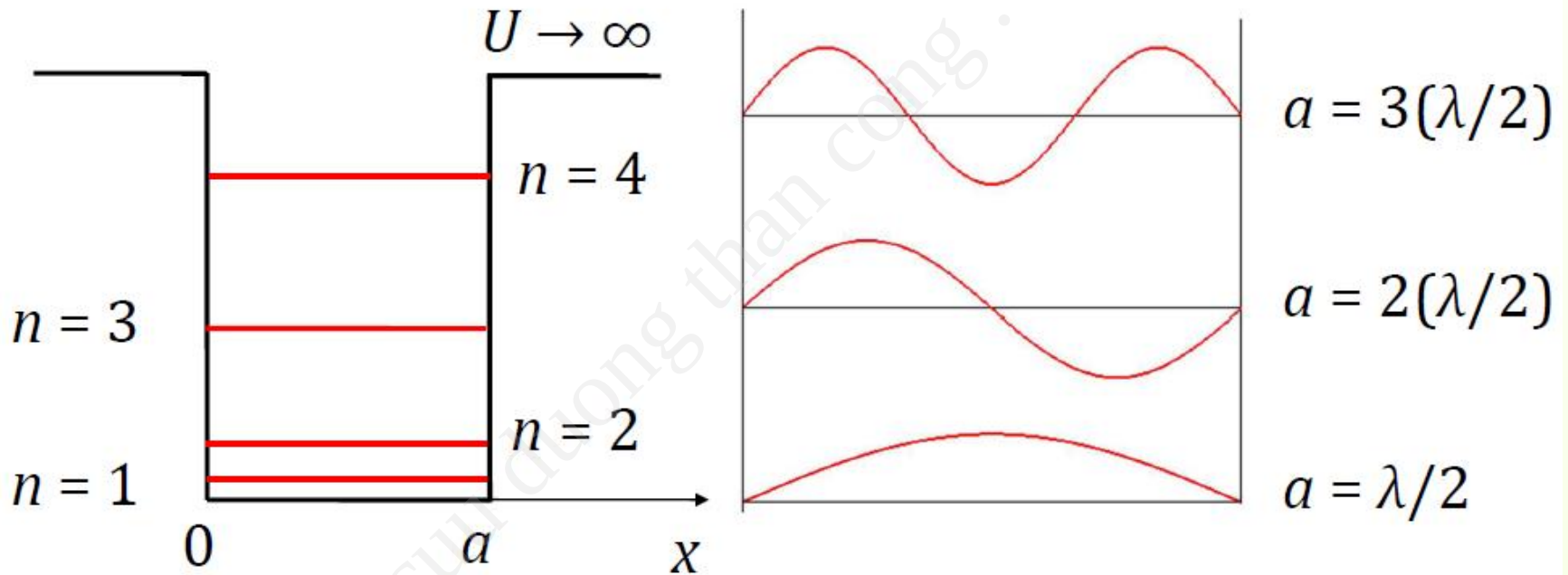
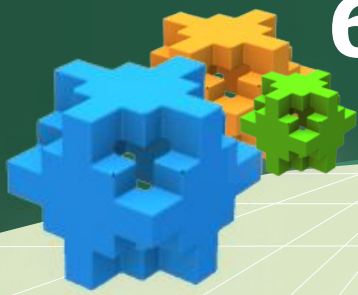
6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều (4)

- Do đó năng lượng của hạt là:

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = n^2 \frac{h^2}{8ma^2}$$

- Năng lượng hạt đã bị lượng tử hóa.
- Số n được gọi là *số lượng tử năng lượng*.
- Mức năng lượng thấp nhất, ứng với $n = 1$, là khác không, trái với quan niệm cổ điển.

6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều (5)





6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều (11)

3d. Bài tập 1

Một vi hạt khối lượng m , chuyển động trên trục x trong trường thế có dạng hố thế cao vô hạn, bề rộng a . Khi hạt có năng lượng:

$$E = 2\pi^2 \hbar^2 / ma^2$$

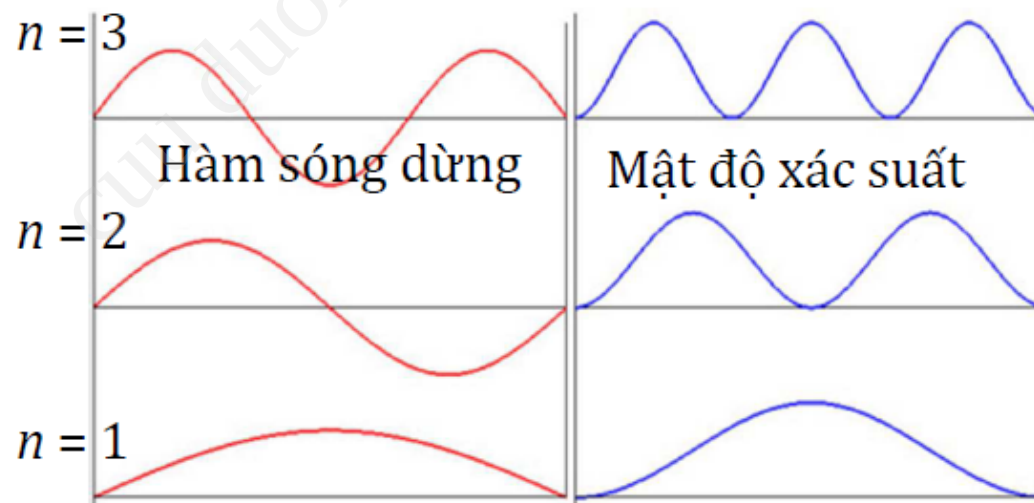
thì khả năng tìm thấy hạt là lớn nhất ở tọa độ x bằng:

- (a) $a/4$ và $3a/4$
- (b) $a/2$
- (c) $a/4$
- (d) $3a/4$

6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều (12)

3d. Trả lời bài tập 1

- Năng lượng của vi hạt trong hố thế vô hạn:
- $E_n = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$
- Trong trường hợp đang xét:
- $E = 2\pi^2 \hbar^2 / ma^2$
- $n = 2$, câu trả lời đúng là (a).





6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều (13)

3d. Bài tập 2

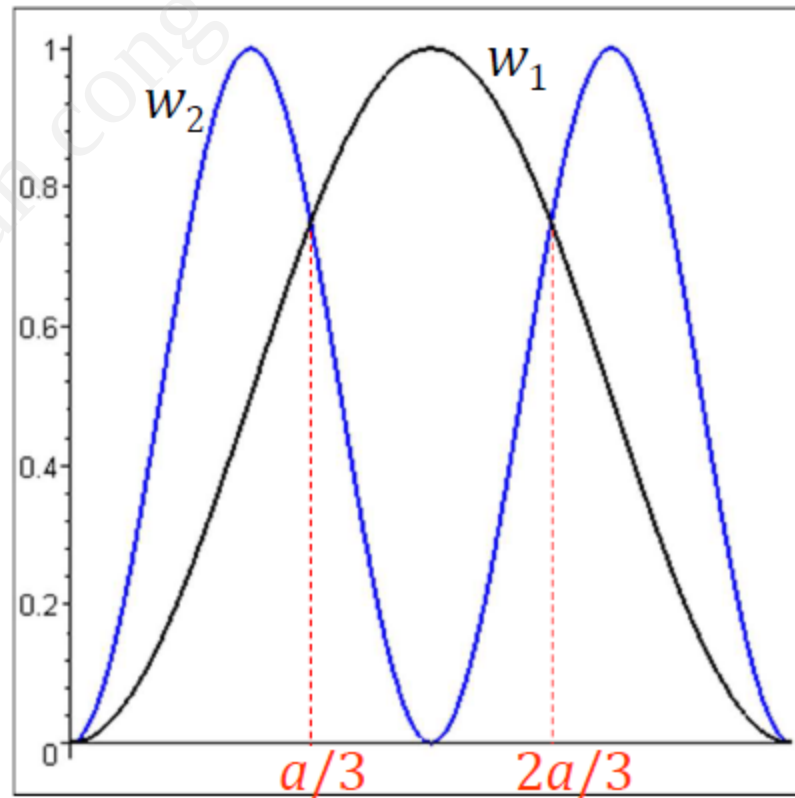
Xét một vi hạt trong giếng thế cao vô hạn, bề rộng a . Ở vị trí nào sau đây thì xác suất tìm thấy hạt ở trạng thái $n = 1$ và $n = 2$ là như nhau (trừ tại hai vách giếng thế):

- (a) $a/3$
- (b) $2a/3$
- (c) (a) và (b) đúng.
- (d) (a) và (b) sai.

6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều (14)

3d. Trả lời bài tập 2

- Ở vị trí cần tìm mật độ xác suất của hai trạng thái là như nhau:
- $w_1 = w_2$
- $\sin^2(\pi x/a) = \sin^2(2\pi x/a)$
- $\cos(\pi x/a) = \pm 1/2$
- $\pi x/a = \pi/3, 2\pi/3$
- $x = a/3, 2a/3$
- Câu trả lời đúng là (c).





6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều (15)

3d. Bài tập 3

Một electron trong một giếng thế vô hạn có bề rộng 2 nm chuyển từ mức có $n = 5$ xuống mức có $n = 3$. Bước sóng của photon phát ra là:

- (a) 97,8 nm
- (b) 824 nm
- (c) 2 nm
- (d) 8971 nm

6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều (16)

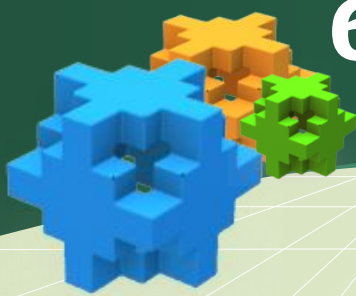
3d. Trả lời bài tập 3

- Khi electron chuyển từ mức n_2 về mức n_1 thì nó phát ra một photon có năng lượng:

$$h\frac{c}{\lambda} = E_{n_2} - E_{n_1} = (n_2^2 - n_1^2) \frac{h^2}{8ma^2}$$

- Suy ra bước sóng của photon:

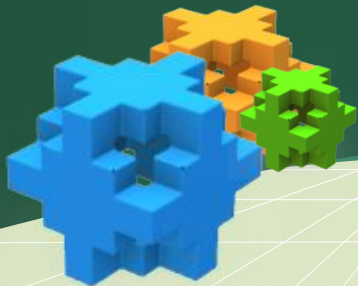
$$\lambda = \frac{hc}{h^2/8ma^2} \cdot \frac{1}{n_2^2 - n_1^2} = \frac{8cma^2}{h} \cdot \frac{1}{n_2^2 - n_1^2}$$



6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều (17)

$$\lambda = \frac{8 \times (3 \cdot 10^8 \text{ m/s}) (9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}) (2 \cdot 10^{-9} \text{ m})^2}{6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}} \cdot \frac{1}{5^2 - 3^2}$$

- $\lambda = 824 \text{ nm}$, câu trả lời đúng là (b).



Chương 6: Cơ học lượng tử

6.1 Lưỡng tính sóng hạt của vật chất

6.2 Phương trình Schrodinger

6.3 Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều

6.4 Hệ thức bất định Heisenberg

6.5 Kính hiển vi quét qua

6.4 Hệ thức bất định Heisenberg (1)



- a. Hệ thức bất định của vị trí và động lượng
- b. Ví dụ
- c. Hệ thức bất định của thời gian và năng lượng
- d. Hiệu ứng đường ngầm

6.4 Hệ thức bất định Heisenberg (2)

4a. Bất định của vị trí và động lượng

- Giữa độ bất định (độ chính xác) của tọa độ và động lượng có hệ thức:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \gtrsim h$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \gtrsim h$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \gtrsim h$$

- Không thể xác định được chính xác đồng thời tọa độ và động lượng của các vi hạt.
- Không thể xác định quỹ đạo vi hạt.

6.4 Hệ thức bất định Heisenberg (3)

4b. Ví dụ 1

- Một electron có vận tốc bằng $2,05 \times 10^6 \text{ m/s}$, được đo với độ chính xác là 1,5 %. Tìm Δx .

- Động lượng của electron:

$$p = mv = (9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}) \cdot (2,05 \cdot 10^6 \text{ m/s})$$
$$= 1,87 \cdot 10^{-24} \text{ kg.m/s}$$

- Độ bất định động lượng:

$$\Delta p = 1,5\% p = 2,80 \cdot 10^{-26} \text{ kg.m/s}$$

$$\Delta x \gtrsim \frac{h}{\Delta p_x} = 2,4 \times 10^{-8} \text{ m} = 24 \text{ nm}$$

- $\Delta x \sim 200$ lần kích thước nguyên tử !

6.4 Hệ thức bất định Heisenberg (4)



4b. Ví dụ 3

- Một quả banh golf có khối lượng 45 g đang bay với vận tốc 35 m/s. Vận tốc được đo với độ chính xác là 1,5 %. Tìm Δx .
- Làm tương tự như trong Ví dụ 1, ta suy ra độ bất định về vị trí của quả banh:

$$\Delta x \gtrsim 3 \times 10^{-32} \text{ m}$$

- Độ bất định này rất nhỏ: với các vật vĩ mô vẫn xác định được chính xác đồng thời vị trí và động lượng.

6.4 Hệ thức bất định Heisenberg (5)



4b. Ví dụ 4

- Bó sóng là tổ hợp tuyến tính của nhiều sóng hình sin có động lượng rất gần nhau.
- Phân bố của động lượng càng rộng (Δp lớn),
- thì bó sóng càng hẹp (Δx nhỏ).

6.4 Hệ thức bất định Heisenberg (6)

4c. Bất định của thời gian và năng lượng

- Gọi Δt là thời gian hạt tồn tại ở một trạng thái;
- ΔE là độ bất định của năng lượng hạt ở trạng thái đó.
- Giữa chúng có hệ thức:

$$\Delta t \cdot \Delta E \gtrsim h$$

- Độ bất định năng lượng của một trạng thái càng lớn thì thời gian tồn tại của trạng thái đó càng ngắn.
- Do đó một bó sóng không thể tồn tại lâu.

6.4 Hệ thức bất định Heisenberg (7)

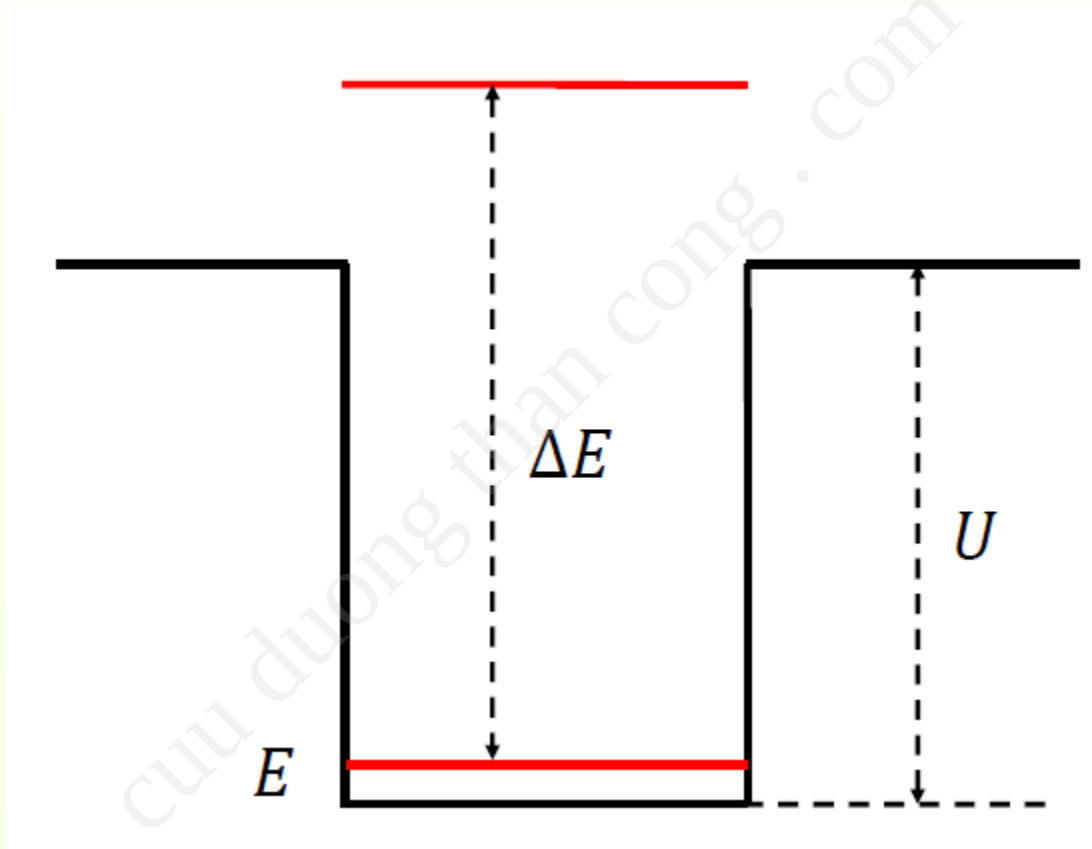
4d. Hiệu ứng đường ngầm

- Xét một hạt bị giam trong giếng thế có độ sâu U .
- Giả sử trạng thái hạt là không bền, chỉ tồn tại trong thời gian rất ngắn $\Delta t \approx h/U$.
- Trong khoảng thời gian đó độ bất định năng lượng của hạt là :

$$\Delta E \gtrsim \frac{h}{\Delta t} = \frac{h}{h/U} = U$$

- Hạt có độ bất định năng lượng lớn hơn độ sâu giếng thế, do đó có thể thoát ra khỏi giếng thế!

6.4 Hệ thức bất định Heisenberg (8)





Tổng kết chương 6 (1)

Giếng thế

$$\Phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right)$$

$$E_n = \frac{(\hbar k)^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = n^2 \frac{h^2}{8ma^2}$$

$$k = \sqrt{2mE} / \hbar = p / \hbar$$

bước sóng vật chất

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

xác suất tìm thấy hạt trong thể tích dV là:

$$dP = |\Psi(x, y, z)|^2 dV$$



mật độ xác suất của hạt tại (x, y, z) .

BĐT Heisenberg

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \gtrsim h$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \gtrsim h$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \gtrsim h$$

$$\Delta t \cdot \Delta E \gtrsim h$$