

CHƯƠNG 6

CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

1. LŨƠNG TÍNH SÓNG – HẠT CỦA VẬT CHẤT

1.1. Giả thuyết De Broglie

1.2. Thực nghiệm xác nhận giả thuyết De Broglie

1.3. Ý nghĩa xác suất của sóng De Broglie

2. HỆ THỨC BẤT ĐỊNH HEISENBERG

2.1. Hệ thức bất định đối với vị trí và động lượng

2.2. Hệ thức bất định đối với năng lượng và thời gian

3. PHƯƠNG TRÌNH CƠ BẢN CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

3.1. Phương trình Schrodinger

3.2. Ứng dụng của phương trình Schrodinger

1.1. GIẢ THUYẾT DE BROGLIE

VỀ LƯỢNG TÍNH SÓNG – HẠT CỦA VẬT CHẤT

1. Lượng tính sóng – hạt của ánh sáng.

- Tính sóng: giao thoa, nhiễu xạ.
- Tính hạt: hiệu ứng quang điện, Compton.

2. Lượng tính sóng – hạt của vi hạt.

- **Giả thuyết De Broglie:** Mọi vi hạt tự do có năng lượng xác định, động lượng xác định đều liên hợp với một sóng phẳng đơn sắc, gọi là sóng vật chất hay sóng De Broglie.

- Sóng De Broglie được xác định bởi hàm sóng có dạng tương tự như hàm sóng phẳng đơn sắc của ánh sáng:

$$\psi(\vec{r}.t) = \psi_0 \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})\right\}$$

Trong đó E và p là năng lượng và động lượng của vi hạt liên hệ với tần số và bước sóng của sóng De Broglie như sau:

$$E = hf = \frac{hc}{\lambda}, \quad p = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

1.2. THỰC NGHIỆM XÁC NHẬN GIẢ THUYẾT DE BROGLIE

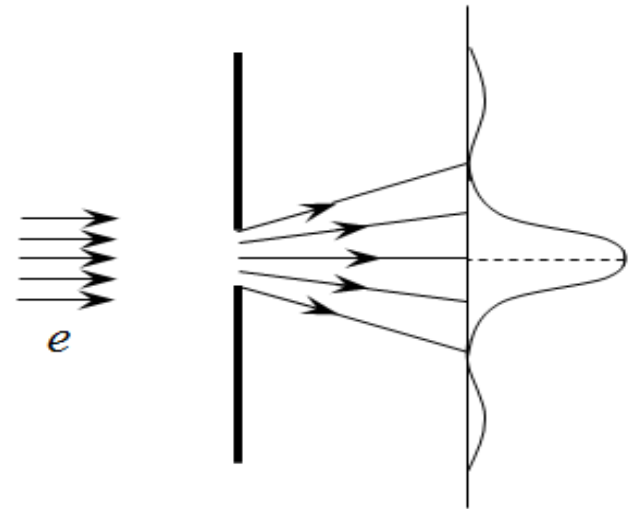
- Cho một chùm electron (hoặc một electron) qua một khe hẹp. Sau khi qua khe hẹp, các electron bị nhiễu xạ theo mọi phương và trên màn huỳnh quang đặt sau khe quan sát được các vân nhiễu xạ giống như trường hợp nhiễu xạ ánh sáng qua khe hẹp.

→ Vì hạt electron mang tính sóng.

- Trong thế giới vĩ mô, tính hạt thể hiện rõ hơn tính sóng, vì:

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

Giả sử quả cầu khối lượng 100 g được ném với vận tốc 10 m/s sẽ liên hợp với sóng có $\lambda = 6,625 \cdot 10^{-34} \text{ m} \rightarrow$ bước sóng quá nhỏ không thể đo được.



1.3. Ý NGHĨA XÁC SUẤT CỦA SÓNG DE BROGLIE

- Sóng De Broglie (sóng vật chất) là sóng xác suất, không phải là sóng điện từ. Một hạt vi mô riêng lẻ cũng thể hiện tính sóng.
- Ý nghĩa của sóng xác suất như sau: gọi $\psi(x, y, z)$ là hàm sóng vật chất tại điểm $O(x, y, z)$ của một vi hạt. Xác suất dP để tìm thấy hạt trong thể tích dV bao quanh điểm O :

$$dP = \psi \psi^* dV = |\psi|^2 dV$$

- Đại lượng $|\psi|^2$ được gọi là mật độ xác suất tìm thấy hạt trong một đơn vị thể tích dV .
- Xác suất tìm thấy hạt trong không gian ∞ luôn bằng 1:

$$P_{\infty} = \int_{\infty} |\psi|^2 dV = 1 \quad - \text{điều kiện chuẩn hóa của hàm sóng}$$

BÀI TẬP VÍ DỤ 1

Một electron không vận tốc đầu được gia tốc bởi hiệu điện thế U . Tìm bước sóng De Broglie của electron sau khi được gia tốc nếu:

- a. $U=0,51 \text{ V}$.
- b. $U=510 \text{ kV}$.

Hướng dẫn giải

- Năng lượng nghỉ của electron:

$$E_0 = m_0 c^2 = 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot (3 \cdot 10^8)^2 = 81,9 \cdot 10^{-15} \text{ J} = 0,51 \text{ MeV}$$

- Động năng của electron sau khi được gia tốc bởi U : $K = qU$

- **TH a:** $K=0,51 \text{ eV} \ll E_0 \rightarrow$ vận tốc e rất nhỏ $\rightarrow$ áp dụng cơ học cổ điển.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2m \cdot \frac{1}{2}mv^2}} = \frac{h}{\sqrt{2mK}} = 1,72 \text{ nm}$$

• **TH b: $K=510 \text{ kV} \sim E_0 \rightarrow$** vận tốc e rất lớn $\rightarrow$ áp dụng cơ học tương đối tính.

$$K = (m - m_0)c^2 = \left(\frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - m_0 \right) c^2 = qU$$

$$\rightarrow v = \frac{c \sqrt{qU(qU + 2m_0c^2)}}{qU + m_0c^2}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} v} = \frac{hc}{\sqrt{qU(qU + 2m_0c^2)}} = 1,4 \text{ pm}$$

2. HỆ THỨC BẤT ĐỊNH HEISENBERG

2.1. HỆ THỨC BẤT ĐỊNH ĐỐI VỚI VỊ TRÍ VÀ ĐỘNG LƯỢNG

- Gọi Δx là độ bất định (độ chính xác) của tọa độ x của một vi hạt, Δp_x là độ bất định của động lượng của hạt theo phương x, ta có mối liên hệ giữa Δx và Δp_x :

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h$$

- Tương tự ta có:

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq h$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geq h$$

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

→ Khái niệm quỹ đạo không tồn tại trong thế giới vi hạt. Nó được thay thế bằng khái niệm xác suất tìm thấy hạt.

BÀI TẬP VÍ DỤ 2

a. Trong thế giới vi mô:

Xét một e ở trong nguyên tử có vận tốc trên quỹ đạo là 10^6 m/s. Độ bất định về vị trí của nó bằng kích thước nguyên tử 10^{-10} m. Độ bất định về vận tốc:

$$\Delta v_x \geq \frac{h}{m \cdot \Delta x} = \frac{6,625 \cdot 10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-10}} = 7,2 \cdot 10^6 \text{ m/s}$$

→ Độ bất định về vận tốc lớn hơn cả vận tốc → không thể xác định chính xác đồng thời vị trí và vận tốc.

b. Trong thế giới vĩ mô:

Một quả banh golf có $m=45$ g bay với $v=35$ m/s. Vận tốc được đo với độ chính xác 1,5%, tức là $\Delta v=0,525$ m/s.

$$\Delta x \geq \frac{h}{m \Delta v} = \frac{6,6 \cdot 10^{-34}}{0,045 \cdot 0,525} = 280 \cdot 10^{-34} \text{ m}$$

→ Độ bất định về vị trí rất nhỏ → Có thể xác định đồng thời vị trí và động lượng của quả banh.

2.2. HỆ THỨC BẤT ĐỊNH ĐỐI VỚI NĂNG LƯỢNG VÀ THỜI GIAN.

Gọi Δt là thời gian vi hạt tồn tại ở một trạng thái, ΔE là độ bất định năng lượng hạt ở trạng thái đó.

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq h$$

- Nếu năng lượng của hệ càng bất định (ΔE lớn), thì thời gian tồn tại của hệ càng nhỏ (Δt nhỏ) và ngược lại.
- Trạng thái của hệ có năng lượng xác định (ΔE nhỏ) là trạng thái bền (Δt lớn), còn trạng thái của hệ có năng lượng bất định (ΔE lớn) là trạng thái không bền.

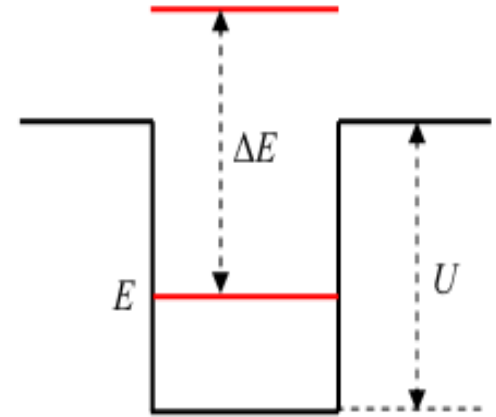
HIỆU ỨNG ĐƯỜNG NGẦM – HỆ QUẢ CỦA HỆ THỨC BẤT ĐỊNH ĐỐI VỚI NĂNG LƯỢNG VÀ THỜI GIAN

- Giả sử có một vi hạt bị giam trong một giếng thế năng có thế năng U .
- Hạt không thể ra khỏi giếng vì năng lượng của nó nhỏ hơn độ sâu của giếng thế ($E < U$).
- Tuy nhiên, nếu trạng thái của hạt là không bền và hạt chỉ tồn tại trong một khoảng thời gian rất ngắn ($\Delta t \approx h/U$), thì trong khoảng thời gian này độ bất định về năng lượng của hạt là:

$$\Delta E \geq \frac{h}{\Delta t} = U$$

- Độ bất định về năng lượng của hạt lớn hơn thế năng của giếng.
- Trong khoảng thời gian Δt rất nhỏ hạt có thể thoát ra khỏi giếng.
- Hiện tượng này gọi là hiệu ứng đường ngầm.

- Hiệu ứng đường ngầm chỉ xảy ra ở thế giới vi mô. Ví dụ: phát electron lạnh, phân rã α .



3. PHƯƠNG TRÌNH CƠ BẢN CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

3.1. PHƯƠNG TRÌNH SCHRÖDINGER

a. Phương trình Schrödinger tổng quát:

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

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

Trong đó: $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ - hằng số Planck rút gọn.

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad - \text{toán tử Laplace.}$$

b. Phương trình Schrödinger dừng: vi hạt có năng lượng toàn phần E chuyển động trong trường thế năng không phụ thuộc thời gian $U=U(x,y,z)$,

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

Trong đó: $\Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}$

- Nghiệm của phương trình trên là hàm sóng Ψ mô tả chuyển động (xác định trạng thái) của hạt trong trường lực thế.

c. Phương trình Schrödinger cho hạt chuyển động tự do: $U=0$

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0$$

3.2. ỨNG DỤNG CỦA PHƯƠNG TRÌNH SCHRÖDINGER

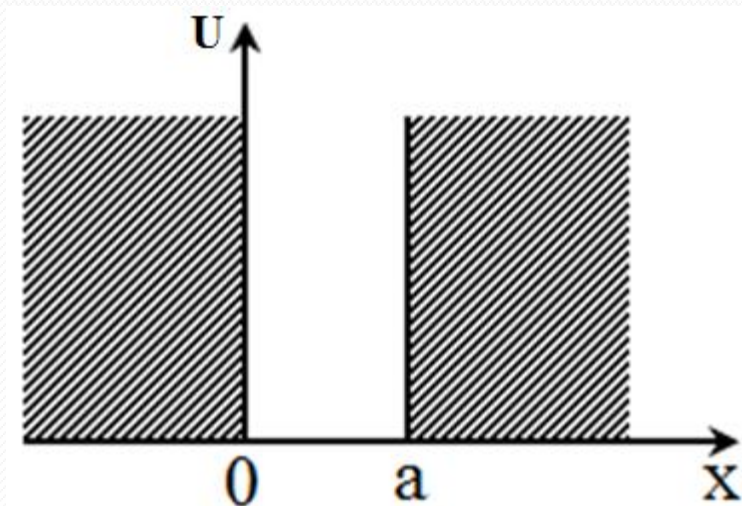
Phương trình Schrödinger dùng để giải một số bài toán cơ học lượng tử đơn giản. Nội dung chính bài toán cơ học lượng tử bao gồm việc tìm năng lượng E và hàm trạng thái ψ của hệ.

Bài toán: Hạt trong giếng thế vô hạn một chiều.

Bề rộng giếng bằng a .

Thế năng của giếng:

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



- Phương trình Schrödinger cho hạt nằm trong giếng ($U = 0$)

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0 \quad (1)$$

- Đặt: $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E > 0$

$$(1) \rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$$

- Nghiệm của (1) có dạng: $\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$
- Hạt nằm trong giếng $\rightarrow$ Xác suất tìm thấy hạt tại $x = 0$ và $x = a$ bằng không: $\psi(0) = 0, \psi(a) = 0$

$$\rightarrow \begin{cases} \psi(0) = B = 0 \\ \psi(a) = A \sin ka = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} B = 0 \\ k = \frac{n\pi}{a} \end{cases} \rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$$

- Năng lượng của hạt chỉ lấy những giá trị gián đoạn, phụ thuộc vào số lượng tử n ($n=1,2,3\dots$). Ta nói năng lượng của hạt bị lượng tử hóa:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$$

- Hàm sóng của hạt: $\psi_n = A \sin \frac{n\pi}{a} x$

- Điều kiện chuẩn hóa hàm sóng:

$$\int_0^a \psi^* \psi . dx = A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx = A^2 \frac{a}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

- Hàm sóng của hạt có dạng: $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x$

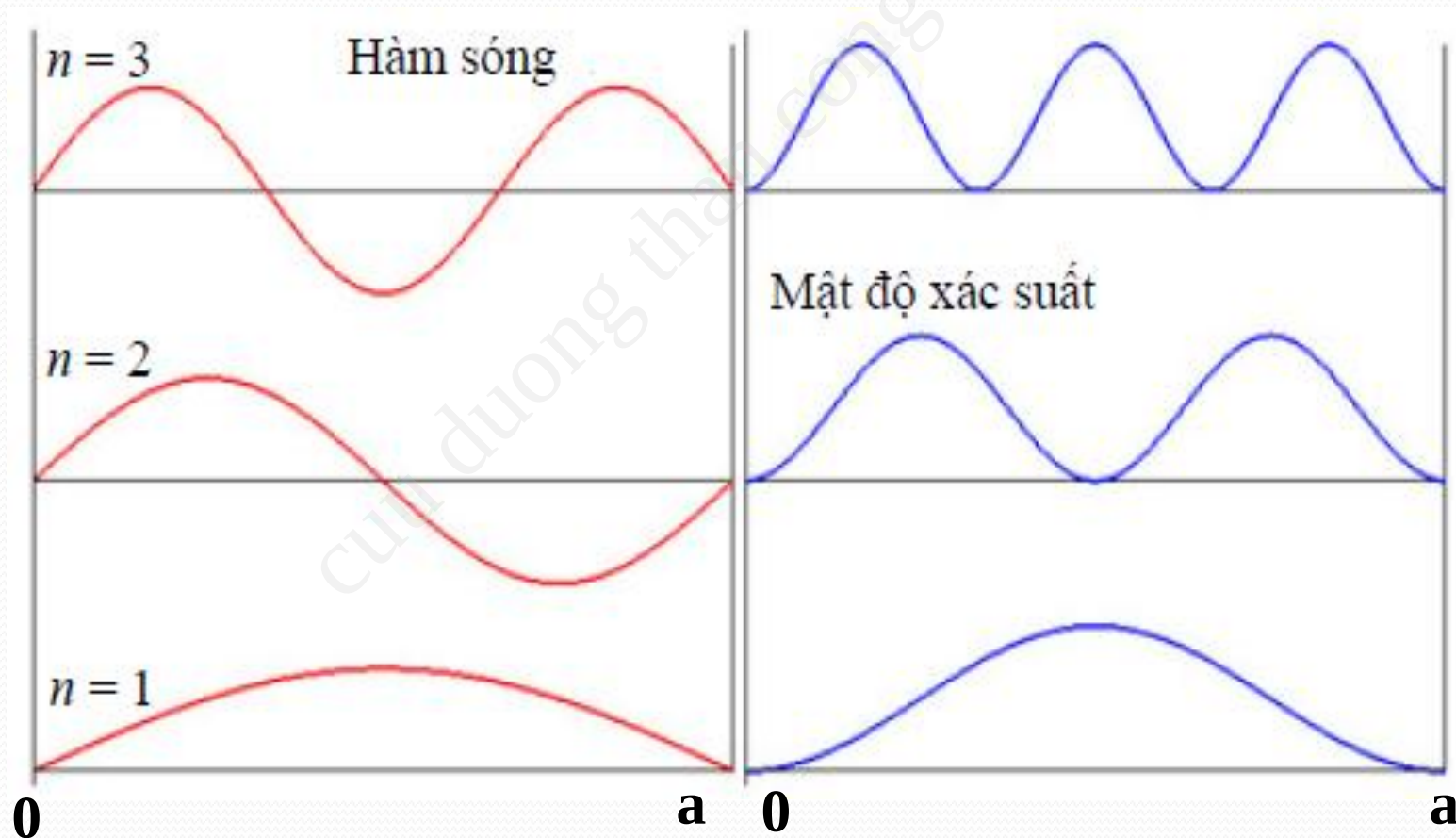
- Mật độ xác suất tìm thấy hạt trong giếng: $|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2(\frac{n\pi x}{a})$

$n=1$ là trạng thái cơ bản.

$n=2$ là trạng thái kích thích thứ nhất.

$n=3$ là trạng thái kích thích thứ hai.

...



BÀI TẬP VÍ DỤ 3

Một vi hạt chuyển động trong giếng thế một chiều sâu vô hạn, bề rộng a . Khi hạt ở trạng thái kích thích thứ nhất thì xác suất tìm thấy hạt trong đoạn $[0, a/3]$ là bao nhiêu?

Hướng dẫn giải

- Hàm sóng của hạt ở trạng thái kích thích thứ nhất ($n=2$):

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi}{a} x$$

- Xác suất tìm thấy hạt:

$$\int_0^{a/3} |\psi_n(x)|^2 dx = \int_0^{a/3} \frac{2}{a} \left(\sin \frac{2\pi}{a} x \right)^2 dx = 0,402$$