CHƯƠNG 3   CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

I. XÁC SUẤT CỦA HÀM PHÂN BỐ LIÊN TỤC (TK)

II. HÀM SÓNG

III. TOÁN TỬ (OPERATOR)

IV PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

V. HẠT TRONG HỐ THẾ

VI. DAO ĐỘNG TỬ ĐIỀU HÒA

VII. HIỆU ỨNG ĐƯỜNG NGẦM

II. HÀM SÓNG (Wave fuction)

1. Biểu thức sóng phẳng đơn sắc tại điểm M cách nguồn O một đoạn : $\vec{r} = \overrightarrow{OM}$

$$\psi(\vec{r},t) = A\sin(\omega t - \frac{2\pi.r}{T.v}) = A\sin(\omega t - \vec{k}.\vec{r})$$

Véctơ sóng $\vec{k}$ **xác định theo véctơ đơn vị của phương truyền sóng:** $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{n}$

Hàm sóng ở dạng phức:

vì

$$Ae^{-i\varphi} = A\{\cos\varphi + i\sin\varphi\}$$

$$\psi(\vec{r},t) = A\{\cos(\omega t - \vec{k}\vec{r}) + i\sin(\omega t - \vec{k}\vec{r})\}$$

$$\psi(\vec{r},t) = A\exp[-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})]$$

1.Ý nghĩa thống kê của hàm sóng

Theo thuyết sóng ánh sáng:

$$I \propto A^2 = A.e^{-i\varphi}.Ae^{i\varphi} = \psi\psi^* = |\psi|^2$$

Thuyết hạt ánh sáng: hạt photon tạo ra I tỷ lệ số photon qua 1m^2 trong 1 s gọi là mật độ hạt:

$$\rho(\vec{r},t) = |\psi|^2 = \psi\psi^* = Ae^{-i\varphi}Ae^{i\varphi} = A^2$$

Vì Hàm sóng phức mô tả trạng thái vi mô của hạt chuyển động nhanh có bình phương của biên độ:

$$\rho(\vec{r},t) = \psi\psi^* = A^2$$

2. Điều kiện chuẩn hóa: Xác suất tìm thấy hạt trong thể tích V bất kỳ mà hạt cư trú là 1.0.

$$\int_V \psi(\vec{r},t).\psi^*(\vec{r},t)dV = 1$$

3. Điều kiện của hàm sóng:

1- Giới nội.

2- Đơn trị.

3- Liên tục.

4- Đạo hàm bậc nhất của hàm sóng phải liên tục.

4. Quan hệ giữa sóng Broglie và vi hạt chuyển động tự do có năng lượng $E = h\nu = h\dfrac{c}{\lambda}$ và xung lượng $P = mv$

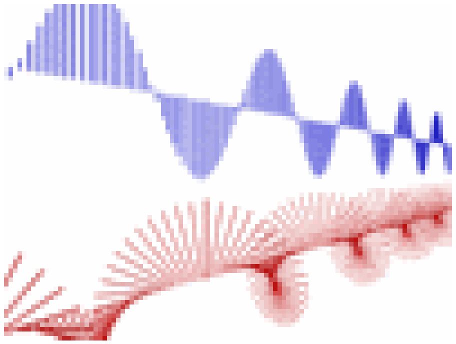
Tính tần số góc: $\omega = 2\pi\nu = \dfrac{2\pi c}{\lambda} = \dfrac{2\pi}{h}.\dfrac{hc}{\lambda} = \dfrac{E}{\hbar}.$

Còn véctơ sóng: $\vec{k} = \dfrac{2\pi}{\lambda}\vec{n} = \dfrac{2\pi}{h}\dfrac{h}{\lambda}\vec{n} = \dfrac{\vec{P}}{\hbar}$

Hàm sóng viết dưới dạng:

$$\psi(\vec{r},t) = A\exp[-i(\omega t - \vec{k}.\vec{r})]$$

$$= A\exp(-\frac{i}{\hbar})[Et - \vec{P}\vec{r}]$$



Vận tốc Pha - Vận tốc nhóm

Vận tốc Pha:

Vận tốc truyền sóng sao cho pha là không đổi:

$$\varphi = Et - Px = E(t + dt) - P(x + dx) = \text{const}$$

suy ra : $Edt = Pdx$

hay:

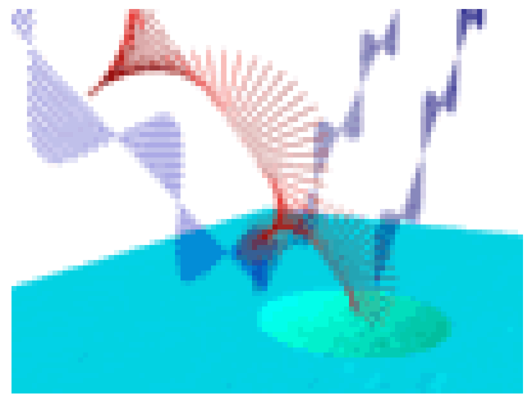
$$u = \frac{dx}{dt} = \frac{E}{P} = \frac{m.c^2}{m.v} = \frac{c^2}{v}$$

Vận tốc u lớn hơn vận tốc ánh sáng →

Vận tốc pha không phải là vận tốc truyền năng lượng.

Vận tốc nhóm là vận tốc chuyển động của toàn bộ bó sóng.

Vận tốc nhóm của bó sóng bằng vận tốc của hạt chuyển động.



$$\overline{u} = \frac{\partial E}{\;} = \frac{c^2 P}{\;} = \frac{c^2 mv}{\;} = v$$

$$\psi(\vec{r}, t) = A\exp[-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})]$$

III. TOÁN TỬ (OPERATOR)

1. Toán tử: Ánh xạ tác dụng lên một hàm biến hàm đó thành một hàm khác: $\hat{A}f(x,y,z,t) = g(x,y,z,t)$

Ví dụ : $f(x,y,z) = 2x + y^2 z$ $\qquad \hat{A}(2x + y^2 z) = 4xt$

2. Một số toán tử thông dụng

A-Toán tử đạo hàm: $\hat{A} = \dfrac{d}{dx}$

Ví dụ: $\hat{A}(2x + y^2 z) = \dfrac{d}{dx}(2x + y^2 z) = 2$

B-Toán tử grad: $\overrightarrow{\mathrm{Grad}} = \nabla = \dfrac{\partial}{\partial x}\vec{e}_1 + \dfrac{\partial}{\partial y}\vec{e}_2 + \dfrac{\partial}{\partial z}\vec{e}_3$

Ví dụ : $\overrightarrow{\mathrm{grad}}(2x + y^2 z) = \nabla(2x + y^2 z) = 2\vec{e}_1 + 2yz\vec{e}_2 + y^2\vec{e}_3$

C-Toán tử Laplace: $\hat{A} = \Delta = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial z^2}$

Ví dụ :

$$\hat{A}(2x + y^2 z) = \frac{\partial^2 (2x + y^2 z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 (2x + y^2 z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 (2x + y^2 z)}{\partial z^2}$$

$$\hat{A}(2x + y^2 z) = 2z$$

A. PHÉP TOÁN CHO TOÁN TỬ

1. PHÉP CỘNG:

$$\hat{A} + \hat{B} = \hat{C}$$

$$\hat{A} = \frac{d}{dx}; \hat{B} = x$$

Ví dụ : $f(x, y, z) = 2x + y^2 z$

$$\hat{C}(2x + y^2 z) = (\frac{d}{dx} + x)f(x, y, z) = 2 + 2x^2 + xy^2 z$$

2. PHÉP TRỪ

$$\hat{A} - \hat{B} = \hat{D}$$

$$\hat{B} - \hat{A} = \hat{E} = -\hat{D}$$

Ví dụ:

$$\hat{D}(2x + y^2 z) = 2 - 2x^2 - xy^2 z$$

3. PHÉP NHÂN

$$(\hat{A}.\hat{B})f = \hat{A}(\hat{B}f)$$

Ví dụ :

$$(\hat{A}.\hat{B})f = \frac{d}{dx}\{x(2x + y^2 z)\} = 4x + y^2 z$$

$$(\hat{B}.\hat{A})f = \hat{B}(\hat{A}f)$$

$$(\hat{B}\hat{A})f = x\{\frac{d}{dx}(2x + y^2 z)\} = 2x$$

$$(\hat{B}.\hat{A})f \neq (\hat{A}.\hat{B})f$$

B. GIAO HOÁN TỬ

1. Định nghĩa: $\hat{A}.\hat{B} = \hat{B}.\hat{A}$ $\hat{A} = \frac{d}{dx}; \hat{B} = \frac{d}{dy}$

Ví dụ : $f(x,y,z) = 2x + y^2 z$

$$\hat{A}.\hat{B}(2x + y^2 z) = \frac{d}{dx}\{\frac{d}{dy}(2x + y^2 z)\} = \frac{d}{dx}(2yz) = 0$$

$$\hat{B}.\hat{A}(2x + y^2 z) = \frac{d}{dy}\{\frac{d}{dx}(2x + y^2 z)\} = \frac{d}{dy}(2) = 0$$

2. Các toán tử giao hoán được

$\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ $\frac{d}{dx}; \frac{d}{dy}; \frac{d}{dz}$ $\frac{d^2}{dx^2}; \frac{d^2}{dy^2}; \frac{d^2}{dz^2}$ $\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}; \frac{\partial^2}{\partial y \partial x}$

3. Các toán tử không giao hoán được

$x; \frac{d}{dx}$ $y; \frac{d}{dy}$ $z; \frac{d}{dz}$ $\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}; \frac{\partial^2}{\partial y \partial z}...$

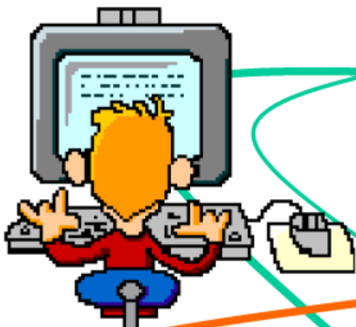
2. Tổ hợp toán tử giao hoán được $(\hat{A}+\hat{B})(\hat{C}+\hat{D})$

Khi mà $\hat{A}\hat{C}=\hat{C}\hat{A}\oplus\hat{A}\hat{D}=\hat{D}\hat{A}$

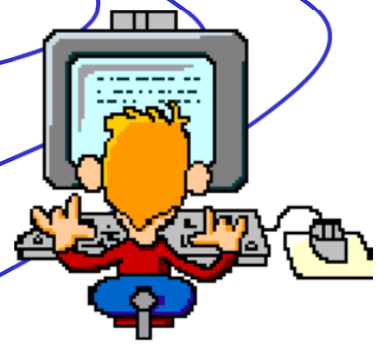
$$\hat{B}\hat{C}=\hat{C}\hat{B}\oplus\hat{B}\hat{D}=\hat{D}\hat{B}$$

Bài tập : Xem các TT sau có thể giao hoán được với nhau ?

$$\mathrm{Gra}\vec{\mathrm{d}}=\nabla=\frac{\partial}{\partial x}\vec{e}_1+\frac{\partial}{\partial y}\vec{e}_2+\frac{\partial}{\partial z}\vec{e}_3$$



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



$$\hat{\vec{r}}=x\vec{e}_1+y\vec{e}_2+z\vec{e}_3$$

$$\mathrm{Gra}\vec{\mathrm{d}}+\Delta+\hat{\vec{r}}$$

C. TOÁN TỬ TUYẾN TÍNH (LINEAR OPERATOR)

1. Định nghĩa: cho các hàm $f_1\ f_2 \ldots f_n$ và các hằng số $c_1\ c_2 \ldots c_n$ A là TT tuyến tính

$$\hat{A}\{\sum c_i.f_i\} = \sum c[\hat{A}.f_i]$$

Các TT tuyến tính

$$x;\ \frac{d}{dx};\ y;\ \frac{d}{dy};\ z;\ \frac{d}{dz};\ \frac{d^2}{dx^2};\ \frac{d^2}{dy^2};\ \frac{d^2}{dz^2}$$

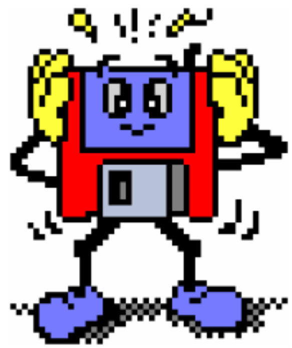
Bài tập : Xem các TT sau có tuyến tính không ?

$$\mathrm{Gra}\vec{d} = \nabla = \frac{\partial}{\partial x}\vec{e}_1 + \frac{\partial}{\partial y}\vec{e}_2 + \frac{\partial}{\partial z}\vec{e}_3$$

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

$$\hat{\vec{r}} = x\vec{e}_1 + y\vec{e}_2 + z\vec{e}_3$$

$$\mathrm{Gra}\vec{d} + \Delta + \hat{\vec{r}}$$



Lagrange

D. HÀM RIÊNG VÀ TRỊ RIÊNG CỦA TOÁN TỬ

1. Định nghĩa: $\hat{A}f(x) = \lambda f(x)$

Ví dụ : Ta có $\hat{a} = -\dfrac{d}{dx}$ **tìm hàm riêng trị riêng**

2. Dùng định nghĩa $\hat{a}f(x) = -\dfrac{df(x)}{dx} = \lambda f(x)$

3. Chuyển vế: $\dfrac{df(x)}{f(x)} = -\lambda dx$

4. Lấy tích phân $\displaystyle\int \frac{df(x)}{f(x)} = \int -\lambda dx \rightarrow \ln f(x) + c(\ln c_1) = -\lambda.x$

5. Biến đổi $\rightarrow \ln c_1 f(x) = -\lambda.x \rightarrow c_1 f(x) = e^{-\lambda x}$

$$f(x) = c_2 e^{-\lambda x}$$

6. Kết luận: Có nhiều trị riêng λ khác nhau→ có nhiều hàm riêng khác nhau

E. TOÁN TỬ TỰ LIÊN HỢP TUYẾN TÍNH HERMITTE

1. **Định nghĩa:Ta có** $f_1(x), f_2(x)$ **là các hàm bất kỳ**

Â là TT Hermitte: $\int f_1^*(x)\hat{A}f_2(x)dx = \int f_2(x)[\hat{A}^*].f_1^*(x)dx$

2. Ví dụ Xét toán tử $\hat{A} = -i\frac{d}{dx}$

Xét vế trái : Dùng tích phân từng phần:

$$-i\int f_1^*(x)\frac{d}{dx}f_2(x)dx = -i[f_1^*f_2 - (\int f_2\frac{d}{dx}f_1^*dx)]$$

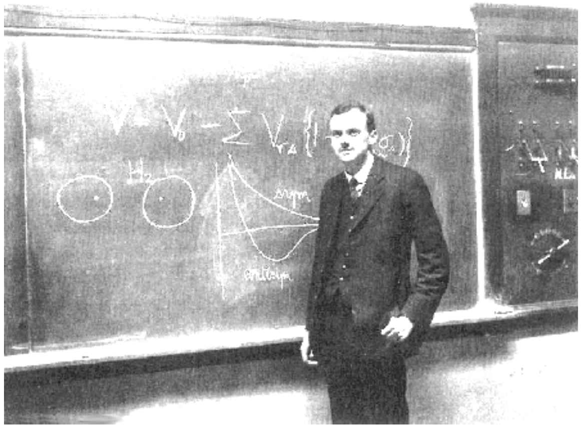
Vế phải: $\int f_2(x)[i\frac{d}{dx}].f_1^*(x)dx = i\int f_2(x)\frac{d}{dx}f_1^*(x)dx$

So sánh:

Để Â là Hermitte thì ta có: $f_1(x).f_2(x) = 0$

Kết luận: các hàm $f_i(x)$ khi nhân lẫn nhau bằng không
Gọi là trực giao

Tính chất TT hermitte

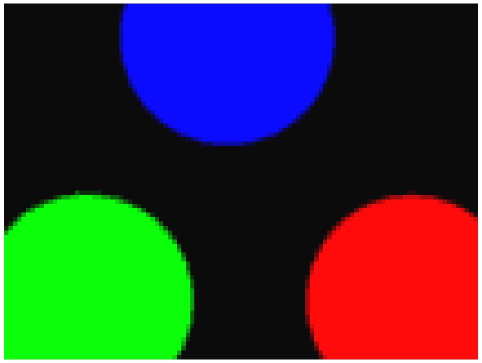


1. Nó có trị riêng là các giá trị thực.
2. Các hàm riêng là trực giao:

$$f_L(x).f_K(x) = \delta(L-K) = \begin{pmatrix} 1 \text{ khi } L = K \\ 0 \text{ khi } L \neq K \end{pmatrix}$$

3. Các hàm riêng tạo thành một hệ đủ: một hàm bất kỳ được khai triển thành tổ hợp TT các hàm trực giao

$$U(x) = \sum_{k=1}^{n} C_k f_k(x)$$



IV PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

Các tiên đề trong Cơ lượng tử

1. Mỗi đại lượng a trong CH cổ điển tương ứng một TT Hermitte â trong CH Lượng tử sao cho trị riêng của â là số thực bằng chính giá trị của đại lượng a.

Ví dụ $\hat{H}$ là toán tử năng lượng có trị riêng là E

2. Hệ thức của các TT có hình thức giống hệt như các đại lượng cổ điển tương ứng

Ví dụ: TT tọa độ là phép nhân $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{\vec{r}}$

TT mômen xung lượng $\vec{L} = [\vec{r}x.\vec{P}]$

Hai TT giao hoán thì chúng có cùng hàm riêng và không tuân theo nguyên lý bất định.

Các toán tử thông dụng trong Cơ lượng tử

1. TT tọa độ= Tương ứng phép nhân

$$\hat{x},\ \hat{y},\ \hat{z},\ \hat{\vec{r}}$$

2. Các toán tử xung lượng

$$\hat{P}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \qquad \hat{P}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \qquad \hat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

3. toán tử xung lượng tòan phần

$$\hat{P} = -i\hbar\vec{\nabla} = -i\hbar[\vec{e}_1.\frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_2.\frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_3.\frac{\partial}{\partial z}]$$

4. toán tử năng lượng:

$$E = \frac{P^2}{2m} + U(x,y,z)$$

$$\frac{\hat{P}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2})$$

toán tử thế năng

$$\hat{U}(x,y,z) = U(x,y,x)$$

PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

Ý nghĩa

1. Hàm riêng và trị riêng của toán tử năng lượng.

$$\hat{H}\varphi(x,y,z,t) = E\varphi(x,y,z,t)$$

Nếu năng lượng là không đổi

$$\psi(\vec{r},t) = A\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)\varphi(\vec{r}) = A\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)\varphi(x,y,z)$$

2. PT Schodinger không phụ thuộc t

$$\hat{H}\varphi(\vec{r}) = \hat{H}\varphi(x,y,z) = E\varphi(x,y,z)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x,y,z)\right]\varphi(x,y,z) = E.\varphi(x,y,z)$$

Giải được:- Trị riêng là mức năng lượng

- Hàm riêng mô tả trạng thái

GIẢI PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

MỤC ĐÍCH KHI GIẢI

1. TÌM TRỊ RIÊNG: Tức là xác định các mức năng lượng và xem nó có bị gián đọan không (lượng tử hóa)
2. TÌM HÀM RIÊNG: Dùng tính xác suất những nơi tìm thấy hạt (đám mây điện tử). Xác định hàm mật độ xác suất

CÁC LƯU Ý KHI GIẢI

1. BIẾT DẠNG TOÁN TỬ THẾ NĂNG: Thường đó là một phép nhân. Nếu đơn giản thì U=0
2. CHIỀU CỦA KHÔNG GIAN: 1D/ 2D/ 3D. Đơn giản là một chiều khi đó

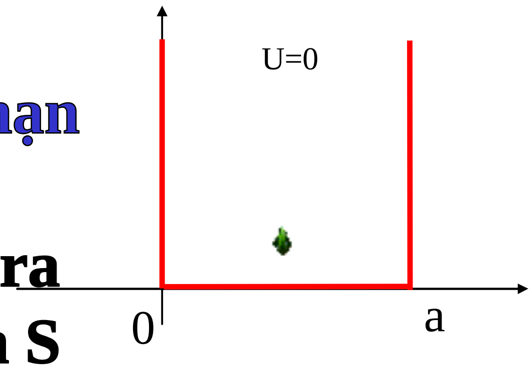
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

3. Có khi phải tách không gian làm nhiều vùng khác nhau để tìm hàm sóng cho từng vùng.

V HẠT TRONG HỐ THẾ VUÔNG

Bên trong hố $0 \geq x \geq a$ thì $U = 0$

Bên ngòai hố $0 > x$ và $x > a$ thì U→ vô hạn



Bên ngòai U lớn nên hạt không thể nhảy ra

→ **hạt chỉ tồn tại bên trong → Phương trình S**

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\varphi(x,y,z)+0=E\varphi(x,y,z)$$

→ **Xét chuyển động theo 1 phương x nên:**

$$\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}=-\frac{2m}{\hbar^2}E\varphi(x)=-k^2\varphi(x)$$

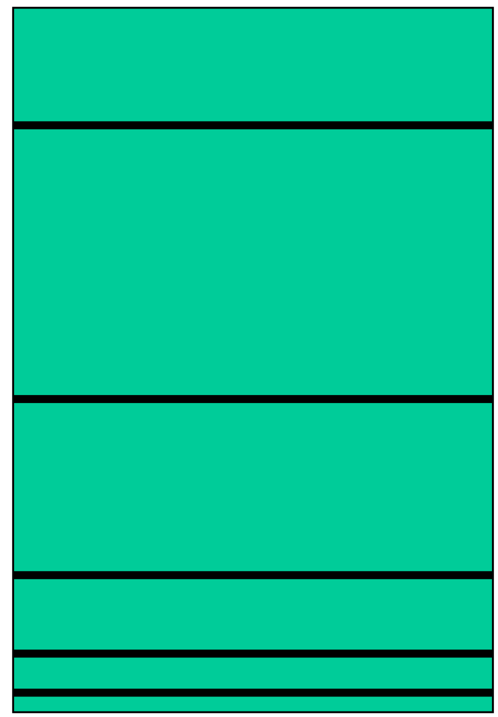
$$k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

→ **Nghiệm là:** $\varphi(x) = A\sin kx$

Lưu ý tại x=a thì hàm sóng bằng không $A\sin ka = 0 = \sin n\pi$

Kết quả: $ka = \pm n\pi$ $\quad k_n = \dfrac{n\pi}{a} \rightarrow k_n^2 = \dfrac{n^2\pi^2}{a^2} = \dfrac{2E_n m}{\hbar^2}$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \qquad n = 1,2,3...$$



Kết luận về mức năng lượng:

1- Năng lượng bị lượng tử hóa

2- Năng lượng tỉ lệ với bình phương các số nguyên

3- E_1 là mức thấp nhất (Ground state)

4- Từ E_2 lên trên là mức kích thích (excited state)

5- Khỏang cách các mức không đều

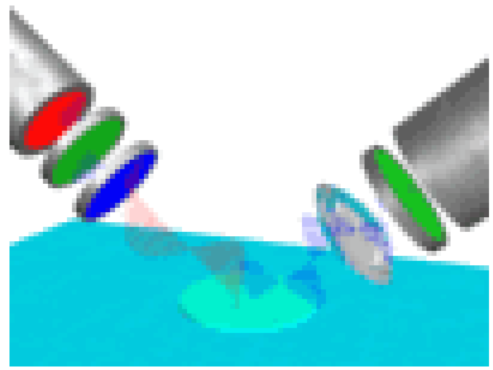
$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}[(n+1)^2 - n^2] = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(2n+1)$$

Kết quả:

$$\varphi(x) = A\sin kx \rightarrow A = ?$$

Theo sự chuẩn hóa hàm sóng :

$$\int_0^a |A|^2 \sin^2(kx)dx = |A|^2 \frac{1}{2}a = 1 \rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$



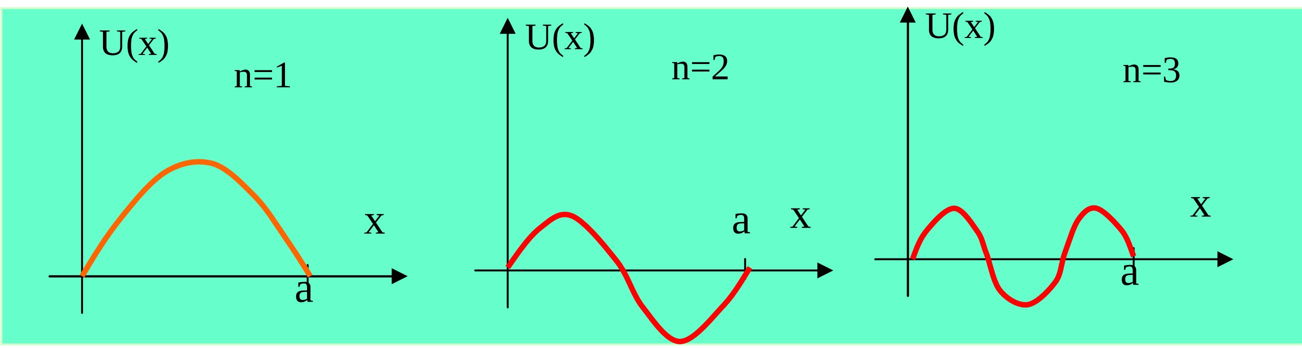
Kết luận về các hàm sóng bậc n:

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_n x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi x}{a})$$

1- Ta chứng minh các hàm sóng là trực giao.

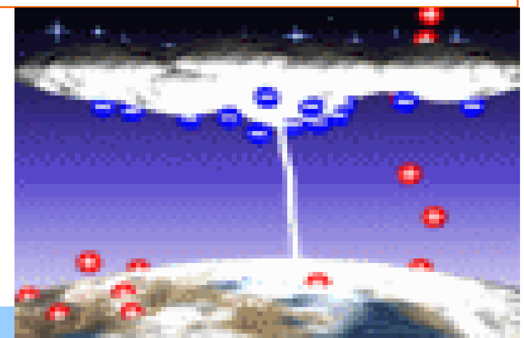
$$<\varphi_m^* / \varphi_n> = \frac{2}{a}\int_0^a \sin(k_m x)\sin(k_n x)dx = 0 (m \neq n)$$

2- Xác suất tìm thấy hạt tỉ lệ với mức năng lượng thứ n



Kết quả: nghiệm tổng quát là tổ hợp tuyến tính các nghiệm

$$f(x) = \sum c_n \varphi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum c_n \sin(\frac{n\pi x}{a})$$



Kết quả: nghiệm có yếu tố thời gian

$$\psi(x,t) = \varphi(x)\exp(-iEt) = \sum \sqrt{\frac{2}{a}} c_n \sin(\frac{n\pi x}{a})\exp(-iE_n t)$$

$$\sqrt{\frac{2}{a}} \sum c_n \sin(\frac{n\pi x}{a})\exp(-i\frac{n^2\pi^2\hbar}{2ma^2}t)$$

Kết quả: cho trường hợp 3D hạt trong hộp vuông

$$E = E_1 + E_2 + E_3 = \frac{nx^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} + \frac{ny^2\pi^2\hbar^2}{2mb^2} + \frac{nx^2\pi^2\hbar^2}{2mc^2}$$

$$\varphi_{nx,ny,nz}(x,y,x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{nx\pi x}{a})\sqrt{\frac{2}{b}}\sin(\frac{ny\pi y}{b})\sqrt{\frac{2}{c}}\sin(\frac{nz\pi z}{c})$$

V DAO ĐỘNG TỬ ĐIỀU HÒA

Trong 1D : Hệ chịu tác động lực tuần hoàn f=-kx, nên động năng U=kx^2/2

$$\hat{U}(x) = \frac{k\hat{x}^2}{2} = \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

Phương trình Schrodinger một chiều:

$$(-i\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2)u_n(x) = E_n u_n(x)$$

→ **Xét hai toán tử tăng và giảm:** $\hat{a}_+, \hat{a}_-$

$$\hat{a}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2m}}[\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \pm im\omega x]$$

→ **Lấy phép nhân 2 toán tử đó → viết lạI PT Schrodinger**

$$\hat{H}u_n(x) = \{(a_+a_-) + \frac{1}{2}\hbar\omega\}u_n(x) = E_n u_n(x)$$

V DAO ĐỘNG TỬ ĐIỀU HÒA

Ta chứng minh được luận điểm sau:

Nếu U(x) là nghiệm riêng thỏa PT Schrodinger với trị riêng E thì hàm $\hat{a}^{+}(x)$ cũng là nghiệm riêng của PT Schrodinger với năng lượng riêng là $E + \hbar\omega$

Hàm $\hat{a}^{-}(x)$ cũng là nghiệm riêng của PT Schrodinger với năng lượng riêng là $E - \hbar\omega$

Kết qủa về mức năng lượng

1- Các năng lượng cách đều nhau một đoạn $\Delta E = \hbar\omega$

2- Mức năng lượng thấp nhất có giá trị dương và là năng lượng ở nhiệt độ 0K. ?? $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$

3- Mức thứ J bất kỳ có giá trị $E_j = (j + 0,5)\hbar\omega$

NGHIỆM CỦA DAO ĐỘNG TỬ ĐIỀU HÒA

Nghiệm ở trạng thái cơ bản u_0: khi đó
Nếu tác dụng hạ bậc sẽ không còn sóng

$$\hat{a}^- u_0(x) = 0$$

Phương trình xác định:

$$\hat{a}^- u_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2m}}\left[\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} - im\omega x\right]u_0(x) = 0$$

Giải được nghiệm:

$$u_0(x) = A_0 \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

→ **Dùng điều kiện chuẩn hóa → Biên độ sóng là**

→ **Và viết lại hàm cơ bản:**

$$A_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}$$

$$u_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

Hàm ở trạng thái m

$$u_m(x) = (\hat{a}_+)^m u_0(x) = (\hat{a}_+)^m \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

Kết quả: nghiệm có yếu tố thời gian $\psi_m(x,t) = u_m(x)\exp(-iE_m t)$

Kết quả: cho trường hợp 3D hạt trong hộp vuông

$$U(x,y,z) = U_1(x) + U_2(y) + U_3(z) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 z^2$$

Kết quả: Về năng lượng

$$E_N = (nx + ny + nz + \frac{3}{2})\hbar\omega \; (N = nx + ny + nz)$$

Kết quả: Về hàm sóng

$$\varphi_{nx,ny,nz}(x,y,x) = X_{nx}(x).Y_{ny}(y).Z_{nz}(z)$$

Lúc này có sự suy biến: Cùng một mức năng lượng sẽ có nhiều trạng thái khác nhau do các giá trị nx, ny và nz tạo ra.

Ví dụ với mức $E_N = (2 + \frac{3}{2})\hbar\omega = \frac{7}{2}\hbar\omega$

	nx	ny	nz
Trạng thái 1	2	0	0
Trạng thái 2	0	2	0
Trạng thái 3	0	0	2
Trạng thái 4	1	1	0
Trạng thái 5	0	1	1
Trạng thái 6	1	0	1

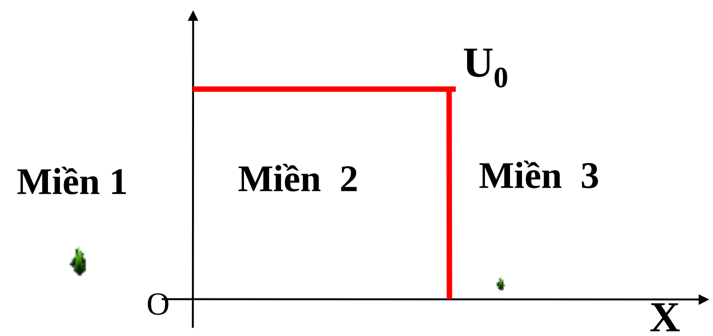
VII Hiệu ứng đường hầm Tuner effect

Giải bài toán hạt chuyển động vượt qua rào thế có U cao hơn năng lượng của nó.

Khi $0 \geq x$ → U = 0: miền 1

Khi $a \geq x \geq 0$ → $U = U_0$: miền 2

Khi $x \geq a$ → U = 0: miền 3



Trong Miền I và III $\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0$ $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Nghiệm:

$$\psi_1 = A_1 \exp(ik_1x) + B_1 \exp(-ik_1x)$$

Trong Miền II $\frac{d^2\psi_2}{dx^2} - k_2^2\psi_2 = 0$ $k_2^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}$

$$\psi_2 = A_1 \exp(-k_2x) + B_2 \exp(k_2x)$$

Để tìm nghiệm, dùng điều kiện biên, vì có 6 biên độ ứng các miền nhưng chỉ có 4 DK biên → phải bỏ một hệ số B_3 với giả thuyết sóng không phản xạ ở vô cùng.

Vấn đề ta quan tâm là sóng có qua rào không?

Hệ số truyền qua D: là tỷ số giữa bình phương biên độ sóng truyền qua hàng rào thế và bình phương biên độ sóng tới tại hàng rào thế.

$$D = \left|\frac{A_3^2}{A_1^2}\right| \neq 0 \quad ???$$

$$D = \frac{16n^2}{(1+n^2)^2}\exp(-2k_2 a) \neq 0$$

Kết qủa thu được

$$n = \frac{k_1}{k_2} = \sqrt{\frac{E}{U_0 - E}}$$

$$k_2^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}$$

Ví dụ: Nếu hiệu năng lượng cho là $E-U_0=1,28.10^{-31}$ J, khi đó ta có thể dùng lý thuyết để tính sự phụ thuộc của hệ số truyền qua D vào độ rộng hố thế a.

a(m)	10^{-10}	$1,5.10^{-10}$	2.10^{-10}	5.10^{-10}
D	0,1	0,03	0,008	5.10^{-7}

Hệ số truyền qua D chỉ đáng kể khi độ rộng hố thế a là rất nhỏ, khi đó hạt thể hiện tính chất sóng của vi hạt và điều đó không thể có với các hạt vĩ mô.

Ứng dụng:

1- Giải thích phát xạ lạnh electron trong kim loại

2-Phân rã hạt anpha từ nhân có 2 prôtôn và 2 Nơtrôn.

Ôn tập

1- Phương trình truyền sóng vật chất: $\psi(\vec{r},t) = A\exp[-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})]$

2- Ýnghĩa và tính chất hàm sóng

3-Vận tốc pha và nhóm

$$u_P = \frac{c^2}{v}; u_N = v$$

4- Toán tử và các phép toán của Toán tử. Toán Tử Hermitte

5- Giao hoán tử và các tính chất. Hàm riêng trị riêng.

6- PT Schrodinger

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x,y,z)]\varphi(x,y,z) = E.\varphi(x,y,z)$$

7- Hạt trong hố thế

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad n = 1,2,3...$$

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_n x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi x}{a})$$

$$E_j = (j + 0,5)\hbar\omega$$

8- Dao động tử điều hòa.

$$u_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2)$$

9- Hiệu ứng đường ngầm

$$D = \frac{16n^2}{(1+n^2)^2}\exp(-2k_2 a) \neq 0$$

$$n = \frac{k_1}{k_2} = \sqrt{\frac{E}{U_0 - E}}$$

$$k_2^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}$$