Vật lý Lượng tử

Tài liệu học tập và tham khảo

1.N.V.HiÖu,N.B.Ân,Cơ sở lý thuyết của vËt lý l-îng tö, NXB §HQGHN, 2003.

2.P.Q.T-, §. §. Thanh, C¬ häc L-îng tö, NXB §HQGHN,2003.

3.N. X. H·n, C¬ häc L-îng tö, NXB §HQGHN, 2003.

4.D.Halliday, R.Resnic, J.Walker, C¬ së VËt lý (T.6. Quang häc vµ VËt lý L-îng tö), NXB Gi¸o dôc dþch,

Nội dung

MỞ ĐẦU

1. <u>VËt lý Cæ ®iÓn?</u>

- §èi t-îng nghiªn cøu: vËt thÓ vÜ m«.
- C¬ së lý thuyÕt c¬ b¶n: c¸c ®Þnh luËt Newton, hÖ c¸c ph-¬ng tr×nh Maxwell.
- Thời *gian:* trước cuối TK 19

2. <u>VËt lý L-îng tö</u> ?

- Thời *gian:* cuối TK 19 đầu TK 20
- §èi t-îng nghiªn cøu: vËt thÓ vi m« (kÝch th-íc bËc nguyªn tö).
- Gi¶i thÝch c¸c hiÖn t-îng mµ VËt lý Cæ ®iÓn bã tay, trªn c¬ së lý thuyÕt vÒ:

+ l-ìng tÝnh sãng – h¹t cña bøc x¹ vµ h¹t vi m«

+ ph-¬ng tr×nh Schrodinger

+ sù gi¸n ®o¹n cña n¨ng l-îng

+ hiÖu øng ®-êng ngÇm

+ nguyªn lý bÊt ®Þnh Heisenberg

+ nguyªn lý lo¹i trõ Pauli

+ Spin cña h¹t vi m«

- VËt lý L-îng tö + ThuyÕt t-¬ng ®èi =

  = Cuéc c¸ch m¹ng VËt lý thÕ kû 20

lµ c¬ së kho¹ häc cho nhiÒu lÜnh vùc C«ng nghÖ cao:

CN th«ng tin, CN §iÖn tö- ViÔn th«ng, CN nan«…

3. VËt lý Cæ ®iÓn cã sai kh«ng?

Kh«ng sai – Hoµn toµn ®óng víi vËt thÓ VÜ M¤.

CHƯƠNG 0

I. tÝnh chÊt h¹t cña bøc x¹

1.1 Gi¶ thuyÕt Planck (1900)

- Bøc x¹ cña vËt ®en theo quan niÖm cæ ®iÓn

- MËt ®é n¨ng lîng bøc x¹ toµn phÇn

$$U = \frac{1}{8\pi}\left(\overline{\vec{E}^{2}} + \overline{\vec{H}^{2}}\right). \qquad (1)$$

- MËt ®é n¨ng lîng bøc x¹ ®¬n s¾c tÇn sè ν

$$\rho_{\nu} = \frac{8\pi}{c^{3}}\nu^{2}\,\overline{\varepsilon}_{\nu} \qquad (2)$$

mµ

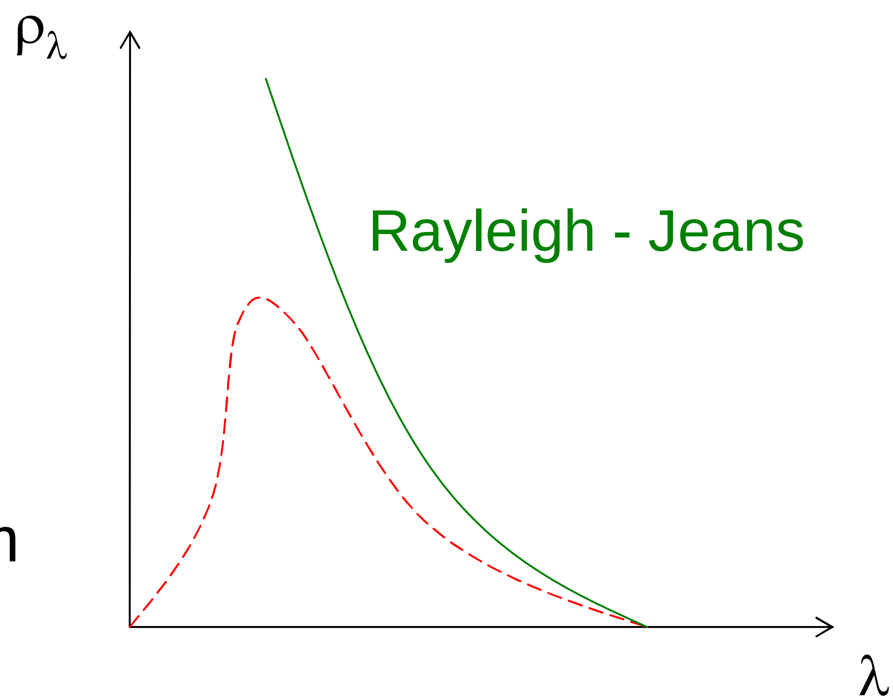
$$\bar{\varepsilon}_\nu = kT \qquad (3)$$

trong ®ã h»ng sè Boltzmann $k = 1{,}38.10^{-23}\ J/K$.

- C«ng thøc Rayleigh – Jeans:

$$\boxed{\rho_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT} \qquad (4)$$

Sù thÊt b¹i cña Rayleigh-Jeans ë vïng tö ngo¹i !



<u>H×nh 1.1</u>

So s¸nh c«ng thøc Rayleigh-Jeans víi kÕt qu¶ thùc nghiÖm

Theo Reileigh – Jeans th×

$$U = \int_0^\infty \rho_\nu d\nu = \frac{8\pi}{c^3} kT \int_0^\infty \nu^2 d\nu = \infty! \qquad (5)$$ V¤ Lý!

- Gi¶ thuyÕt l-îng tö Planck

Mäi tr¹ng th¸i cña bøc x¹ ®iÖn tõ ®¬n s¾c tÇn sè ν ®Òu chØ cã thÓ cã n¨ng l-îng lµ béi sè cña $h\nu$ gäi lµ l-îng tö n¨ng l-îng

$$\varepsilon_\nu(n) = nh\nu = n\hbar\omega \qquad (6)$$

trong ®ã: n lµ sè nguyªn, h»ng sè Planck

h = 6,63. 10^{-34} Js = 4,14.10^{-15} eVs

$$h = 2\pi\hbar\,, \quad \nu = \frac{\omega}{2\pi}\cdot$$

- Bøc x¹ cña vËt ®en theo gi¶ thuyÕt Planck

- N¨ng lîng trung b×nh cña tr¹ng th¸i bøc x¹ tÇn sè ν ®îc tÝnh b»ng ¸p dông gi¶ thuyÕt Planck:

ë T, tr¹ng th¸i bøc x¹ $\varepsilon_\nu(n)$ cã x¸c suÊt

$$P(\varepsilon_\nu(n)) = Ce^{-\varepsilon_\nu(n)/kT}. \qquad (7)$$

Do ®ã

$$\bar{\varepsilon}_\nu = \frac{\sum_n \varepsilon_\nu(n) e^{-\varepsilon_\nu(n)/kT}}{\sum_n e^{-\varepsilon_\nu(n)/kT}}. \qquad (8)$$

mµ $\varepsilon_\nu(n) = nh\nu$, ta cã

$$\bar{\varepsilon}_\nu = h\nu \cdot \frac{\sum_n n e^{-n\frac{h\nu}{kT}}}{\sum_n e^{-n\frac{h\nu}{kT}}}. \qquad (9)$$

cuèi cïng

$$\boxed{\bar{\varepsilon}_\nu = h\nu \; \frac{e^{-h\nu/kT}}{1 - e^{-h\nu/kT}} = h\nu \; \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}.} \qquad (10)$$

- MËt ®é n¨ng l- îng bøc x¹ ®¬n s¾c theo Planck:

$$\rho_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1}. \qquad (11)$$

- MËt ®é n¨ng l-îng bøc x¹ toµn phÇn:

$$U = \int_0^\infty \rho_\nu d\nu = \frac{8\pi h}{c^3}\int_0^\infty \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT}-1}d\nu = 1{,}08\frac{48\pi k^4}{c^3h^3}T^4. \qquad (12)$$

C¸c tr-êng hîp ®Æc biÖt cña c«ng thøc Planck

a) $h\nu << kT$

$$e^{h\nu/kT} = 1 + h\nu/kT \; ,$$

$$\rho_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT \; \cdot$$

§ã lµ c«ng thøc Rayleigh-Jeans

b) $h\nu >> kT$

$$e^{h\nu/kT} - 1 \approx e^{h\nu/kT} \; ,$$

$$\rho_\nu = \nu^3\frac{8\pi h}{c^3}e^{-h\nu/kT} \; .$$

1.2 ThuyÕt lîng tö ¸nh s¸ng (thuyÕt photon)

Einstein thõa nhËn tÝnh chÊt H¹T cña ¸nh s¸ng:

¸nh s¸ng lµ chïm c¸c h¹t gäi lµ c¸c lîng tö ¸nh s¸ng hay photon. C¸c photon nµy chuyÓn ®éng víi vËn tèc $v = c$ trong mäi hÖ quy chiÕu qu¸n tÝnh.

¸nh s¸ng ®¬n s¾c tÇn sè ν, vect¬ sãng $\vec{k} \leftrightarrow$ photon E, $\vec{p}$

ngoµi ra: $$E = h\nu, \quad \vec{p} = \frac{h}{2\pi}\vec{k} \qquad (11)$$

$$h = 2\pi\hbar, \quad \omega = 2\pi\nu \cdot$$

Suy ra:

$$E = \hbar\omega; \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} \cdot \qquad (11')$$

Gi÷a E vµ p cã hÖ thøc:

$$E = p.c \qquad (12)$$

v×

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi\frac{\nu}{c} \cdot$$

1.3. VËn dông thuyÕt photon gi¶i thÝch mét sè hiÖu øng

- HiÖu øng quang ®iÖn theo quan ®iÓm thuyÕt photon

a) Nh¾c l¹i kÕt qu¶ thÝ nghiÖm mµ vËt lý cæ ®iÓn kh«ng gi¶i thÝch ®îc:

- HiÖu øng chØ x¶y ra khi $\nu_{as'} > \nu_0$, kh«ng phô thuéc $I_{as'}$.
- I (dßng quang ®iÖn b·o hoµ) ~ I (¸nh s¸ng chiÕu vµo kim lo¹i)

b) Theo quan ®iÓm thuyÕt photon:

Photon va ch¹m vµ truyÒn n¨ng lîng cho $e \Rightarrow$ bøt e khái mÆt kim lo¹i.

- tho¶ m·n ®Þnh luËt b¶o toµn n¨ng lîng:

$$h\nu = A_0 + \frac{m_e \upsilon^2}{2} \qquad (13)$$

$$\frac{m_e \upsilon^2}{2} \geq 0 \quad \Rightarrow \quad \nu \geq \nu_0 \qquad (14)$$

với $\nu_0 = \frac{A_0}{h}$ là tÇn sè ng- ì ng, phụ thuộc KL (15)

- Sè ®iÖn tö bøt ra ~ sè pho ton

↕ ↕

I dßng quang ®iÖn ~ I ¸nh s¸ng chiÕu vµo kim lo¹i

V_0

+ Vận tốc của é chỉ phụ thuộc tần số AS, ko vào cường độ.

+ §iÖn thÕ h·m V_0 Từ $\frac{mv^2}{2} = eV_0 \to h(\nu - \nu_0) = eV_0$

→ *xác định h từ sự phụ thuộc V_0 vào ν trong KL nhất định*

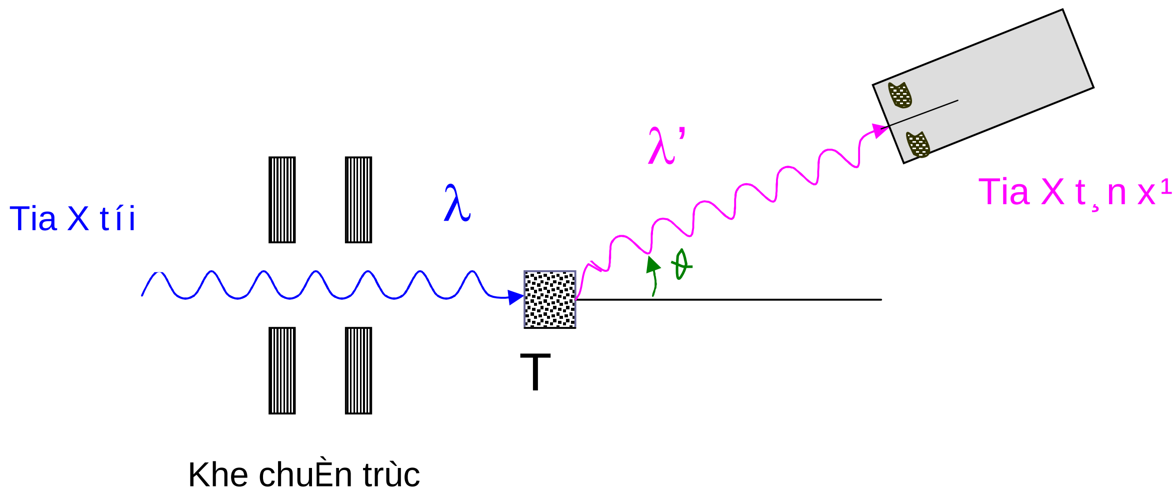
- HiÖu øng Compton theo thuyÕt photon

a) Nh¾c l¹i kÕt qu¶ thÝ nghiÖm mµ VLCĐ kh«ng gi¶i thÝch ®- îc

- ChiÕu tia X bíc sãng λ vµo bia graphit T
- Tia X t¸n x¹ cã hai cùc ®¹i t¹i λ vµ λ' > λ
- $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ phô thuéc gãc quan s¸t tia t¸n x¹ θ.

b) Theo quan ®iÓm thuyÕt photon

lµ bµI to¸n va ch¹m ®µn håi g÷a hai h¹t: photon vµ é → ®ång thêi tho¶ m·n hai ®Þnh luËt b¶o toµn E vµ $\boldsymbol{p}$.



H×nh 1.2. Dông cô nghiªn cøu hiÖu øng Compton

	Tr- íc t¸n x¹	Sau t¸n x¹
Pho ton	$p; \quad \varepsilon = cp$	$p'; \quad \varepsilon' = cp'$
§iÖn tö	$p_e = 0; \quad m_e c^2$	$\dfrac{m_e \upsilon}{\sqrt{1 - \dfrac{\upsilon^2}{c^2}}}; \quad \dfrac{m_e c^2}{\sqrt{1 - \dfrac{\upsilon^2}{c^2}}}$

¸p dông ®þnh luËt b¶o toµn xung l- îng vµ n¨ng l- îng toµn phÇn

$$\vec{p} = \frac{m_e \vec{\upsilon}}{\sqrt{1 - \dfrac{\upsilon^2}{c^2}}} + \vec{p}\,'$$

$$cp + m_e c^2 = cp' + \frac{m_e c^2}{\sqrt{1 - \frac{\upsilon^2}{c^2}}} \qquad ,$$

suy ra

$$\vec{p} - \vec{p}\,' = \frac{m_e \vec{\upsilon}}{\sqrt{1 - \frac{\upsilon^2}{c^2}}}$$

$$p - p' = m_e c \left(\frac{1}{\sqrt{1 - (\upsilon^2 / c^2)}} - 1 \right)$$

tõ hai ph-¬ng tr×nh nµy suy ra

$$pp'(1-\cos\theta) = m_e c(p - p')$$

trong ®ã θ lµ gãc t¸n x¹; $\hat{\theta}$ gi÷a $\vec{p}$ vµ $\vec{p}'$.

Sö dông

$$p = \frac{h}{2\pi}k \quad \text{mµ} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad p = \frac{h}{\lambda} \quad \text{vµ} \quad p' = \frac{h}{\lambda'}$$

Ta cã

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos\theta) \qquad (16)$$

®Æt

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c} = 2{,}43\,.10^{-12}\,m = 0{,}0243\ \overset{o}{\mathrm{A}} \qquad (17)$$

λ_c lµ ®é dµi Compton.

- C«ng thøc Compton

$$\lambda' - \lambda = \lambda_c (1 - \cos\theta) \qquad (18)$$

hoµn toµn phï hîp víi thÝ nghiÖm.

Râ rµng lµ $\Delta\lambda$ chØ phô thuéc θ, kh«ng phô thuéc λ tíi vµ b¶n chÊt bia T.

VÊn ®Ò trao ®æi – Bµi tËp

1. Nguyªn nh©n nµo dÉn ®Õn biÓu thøc ρ_ν (Planck) $\neq$ ρ_ν (cæ ®iÓn)
2. Photon lµ g×? (H¹t ¸nh s¸ng, E? p ? v ? m_0 ?)
3. B¶n chÊt hiÖn tîng quang ®iÖn theo quan ®iÓm vËt lý Lîng tö ?
4. B¶n chÊt hiÖu øng Compton theo quan ®iÓm vËt lý lîng tö ? XÐt c¸c trêng hîp khi $\theta = 0$ vµ $\theta = 180^0$. °
5. Bµi tËp 1.1 vµ 1.2

II. MÉu nguyªn tö cña bohr

2.1 Bµi to¸n nguyªn tö hydro theo thuyÕt ®iÖn tõ cæ ®iÓn

- T-¬ng ®-¬ng bµi to¸n chuyÓn ®éng cña mét h¹t khèi l-îng m (b»ng khèi l-îng thu gän cña ®iÖn tö – h¹t nh©n), ®iÖn tÝch -e, trong tr-êng xuyªn t©m thÕ n¨ng

$$U = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \qquad (1)$$

N¨ng l-îng

$$E = \frac{1}{2}mr^2\omega^2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{e^2}{r} \qquad (2)$$

M«men xung l-îng

$$M = mr^2\omega \qquad (3)$$

Ph-¬ng tr×nh chuyÓn ®éng xuyªn t©m

$$mr\omega^2 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{e^2}{r^2} \qquad (4)$$

do ®ã

$$\boxed{E = -\frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{e^2}{r}} \qquad (5)$$

Tõ ph-¬ng tr×nh (3) vµ (4) suy ra

$$r = 4\pi\varepsilon_0\cdot\frac{M^2}{me^2} \qquad (6)$$

HÖ thøc gi÷a E vµ M

$$E = -\frac{1}{32\pi^2\varepsilon_0^2}\cdot\frac{me^4}{M^2} \qquad (7)$$

- Theo lý thuyÕt ®iÖn tõ Maxwell:

®iÖn tö chuyÓn ®éng trßn cã gia tèc lu«n ph¸t ra n¨ng lîng (bøc x¹):

⇒ phæ liªn tôc

⇒ n¨ng lîng gi¶m liªn tôc, r gi¶m ®Õn 0 sau 10^{-10}s

(r¬i vµo h¹t nh©n, nguyªn tö kh«ng tån t¹i)

Thùc nghiÖm:

- quang phæ v¹ch
- nguyªn tö tån t¹i bÒn v÷ng víi líp vá ®iÖn tö cã kÝch thíc lín h¬n kÝch thíc h¹t nh©n nhiÒu lÇn.

⇒ H¹n chÕ cña lý thuyÕt Maxwell !

2.2 MÉu nguyªn tö cña Bohr(1913)

• Tiªn ®Ò:

-Mçi tr¹ng th¸i cña ®iÖn tö trong nguyªn tö cã mét n¨ng l-îng gi¸n ®o¹n hoµn toµn x¸c ®Þnh. ë tr¹ng th¸i nµy ®iÖn tö kh«ng ph¸t ra bøc x¹ ®iÖn tõ.

-§iÖn tö chØ ph¸t ra bøc x¹ ®iÖn tõ d-íi d¹ng 1 photon $h\nu$ khi chuyÓn tõ tr¹ng th¸i l-îng tö E_m sang E_n tho¶ m·n

$$E_m - E_n = h\nu \qquad (8)$$

Ng-îc l¹i khi hÊp thô photon $h\nu$, ®iÖn tö chuyÓn tõ tr¹ng th¸i l-îng tö E_n sang E_m cã n¨ng l-îng $E_m = h\nu + E_n$

• Quy t¾c l-îng tö ho¸ Bohr: lµ c¬ së ®Ó x¸c ®Þnh gi¸ trÞ n¨ng l-îng gi¸n ®o¹n E_n trong nguyªn tö.

Momen xung l-îng quü ®¹o cña ®iÖn tö ph¶i cã c¸c gi¸ trÞ gi¸n ®o¹n:

$$M_n = n\hbar = n\frac{h}{2\pi} \tag{9}$$

- Theo (7), n¨ng lîng cña tr¹ng th¸i trong nguyªn tö hydro

$$E_n = -\frac{1}{8\varepsilon_0^2} \cdot \frac{me^4}{h^2} \frac{1}{n^2} \tag{10}$$

trong ®ã n = 1, 2, 3, … lµ sè lîng tö cña tr¹ng th¸i ®ang xÐt.

$$\Rightarrow \mathrm{E_n} = -\frac{13{,}6\,(\mathrm{eV})}{\mathrm{n}^2} \tag{10 a}$$

Tr¹ng th¸i c¬ b¶n: cã n¨ng lîng thÊp nhÊt, øng víi n = 1

E_1 = - 13,6 eV

Tõ (8) vµ (10), tÇn sè ν do ®iÖn tö ph¸t ra khi chuyÓn tõ $E_m \rightarrow E_n$ (m > n) lµ

$$\nu = \frac{1}{h}(E_m - E_n) = \frac{1}{8\varepsilon_0^2} \cdot \frac{me^4}{h^3}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \qquad (11)$$

C«ng thøc th-êng dïng lµ:

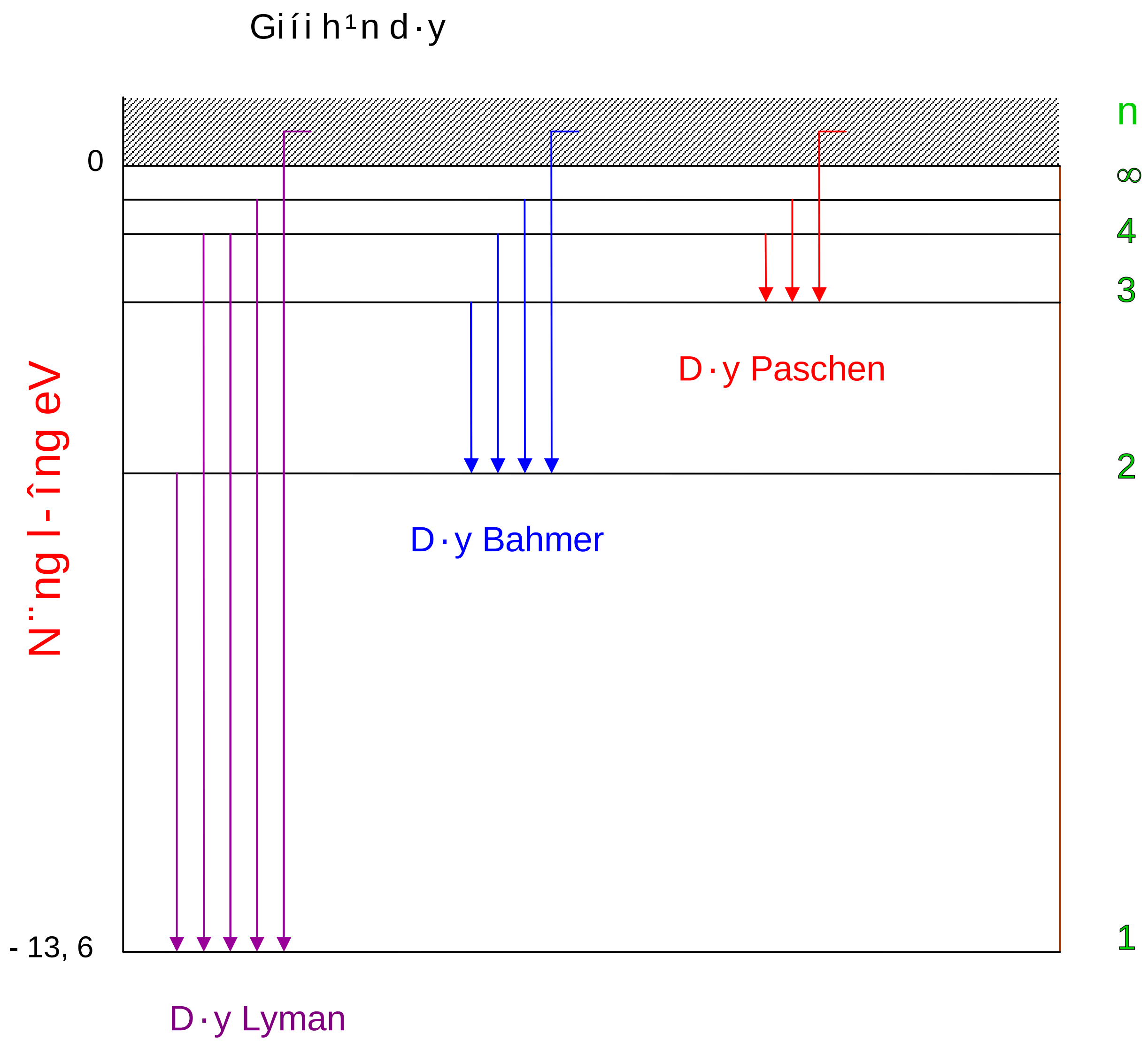
$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \qquad (12)$$

víi

$$R = \frac{1}{8\varepsilon_0^2} \cdot \frac{me^4}{h^3 c} \qquad (13)$$

gäi lµ h»ng sè Rydberg: R = $1{,}097.10^7$ m^{-1} = 0,01097 nm^{-1}.

- Quang phæ v¹ch cña nguyªn tö hydro



H×nh 2.1.

C¸c møc n¨ng l-îng vµ nh÷ng chuyÓn dêi trong quang phæ nguyªn tö hydro

- B¸n kÝnh Bohr: tõ (6) vµ $M = n\hbar$

$$r = 4\pi\varepsilon_0 \frac{\hbar^2 . n^2}{me^2} = \frac{h^2\varepsilon_0}{\pi me^2} \cdot n^2 \qquad (14)$$

thay sè víi n = 1 : r_B = 5,292.10^{-11}m ≈ 0,053 nm

- N¨ng lîng ion ho¸

$$E_H = E_\infty - E_1 \qquad (15)$$

thay sè: E_H = 13,6 eV.

VÊn ®Ò trao ®æi – Bµi tËp

1. M« t¶ cÊu t¹o nguyªn tö theo Bohr
2. T¹i sao gäi lµ mÉu b¸n cæ ®iÓn Bohr?
3. Tr¹ng th¸i c¬ b¶n? Tr¹ng th¸i kÝch thÝch?
4. Bµi tËp 1.3, 1.4, 1.5.

CHƯƠNG 1
NHỮNG TIÊN ĐỀ CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

I. ThuyÕt De Broglie về **lưỡng tính sóng- hạt của các hạt vi mô**

1.1. Sóng De Broglie -1924

§iÖn tö (é) võa cã tÝnh chÊt h¹t, võa cã tÝnh chÊt sãng gièng nh- ¸nh s¸ng: é chuyÓn ®éng tù do víi $E, p \leftrightarrow$ lan truyÒn sãng ph¼ng ®¬n s¾c tần số ν, véc tơ sóng **k** liên hệ với E, **p** như với photon:

ν = E / h ; **k** = 2π **P** / h hoặc $E = \hbar\omega \,, \vec{k}\ \vec{p} = \hbar \vec{k}$ (1)

1.2. Tính chất của sóng De Broglie-sóng mới-sóng vật chất

i- B-íc sãng De Broglie $$\lambda = \frac{h}{p} \qquad (2)$$

(vì λ = 2π/k)

iii- Hệ thức tán sắc: Từ $E^2 = m^2c^4 + p^2c^2$ và (1)

$$\frac{\nu^2}{c^2} = \frac{m^2c^2}{h^2} + \frac{k^2}{(2\pi)^2}$$

Với phôton m(nghỉ)=0 tacó hệ thức quen thuộc $2\pi\nu = ck$

iv- Chu vi quỹ đạo tròn của é cđ quanh hạt nhân phải bằng:

$2\pi r = n\lambda$, n = 1,2,3,.. (4)

ii- Vận tốc nhóm vg chính bằng vận tốc v của chuyển ®éng cña h¹t vi m«;

1.3. KiÓm chøng gi¶ thuyÕt De Broglie

- ThÝ nghiÖm Davison-Germer :x¸c ®Þnh λ_e, nhiễ*u xạ chùm é*

- tiªn ®o¸nE = 54 eV lµ λ_e = 167 pm- đoλ_e = 165 pm (U=54eV)

- bức tranh nhiễu xạ chùm é giống tia X

$\Rightarrow$ gi¶ thuyÕt De Broglie lµ ®óng - ®iÖn tö cã tÝnh chÊt sãng, ngay cả với 1 é.

1.4. **Diễn tả** sãng De Broglie cña h¹t vi m«

- Hµm sãng $\psi(\vec{r},t)$ là hàm phức của **r** và t .
  $\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2$ lµ c-êng ®é sãng.
  $\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2$ lín $\rightarrow$ c-êng ®é sãng lín $\leftrightarrow$ nhiÒu ®iÖn tö tíi.

- ý nghÜa thèng kª cña hµm sãng De Broglie

- c-êng ®é sãng ~ mËt ®é ®iÖn tö
  ~ x¸c suÊt ®Ó ®iÖn tö ®i ®Õn ®iÓm $\vec{r}$ ë thêi ®iÓm t.
- x¸c suÊt ®Þnh vÞ trÝ cña h¹t vi m« trong yÕu tè thÓ tÝch dr:

$$dW(\vec{r},t) = \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d\vec{r} \qquad (5)$$

- $\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2$ lµ mËt ®é x¸c suÊt- cho biÕt kh¶ n¨ng t×m thÊy h¹t vi m« trong 1®¬n vi thÓ tÝch lân cận ®iÓm r t¹i thời điÓm t.

- §iÒu kiÖn chuÈn ho¸ hµm sãng
  (h¹t vi m« nhÊt thiÕt ph¶i n»m trong thÓ tÝch V)

$$\int_V \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d\vec{r} = 1 \qquad (6)$$

NÕu $\psi(\vec{r},t)$ kh«ng tho¶ m·n (6) th× ph¶i chuÈn ho¸ ®Ó cã hµm sãng chuÈn ho¸:

$$\frac{\psi(\vec{r},t)}{\sqrt{\int_V \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d\,\vec{r}}}$$

- Quỹ đạo chuyển động không xác định-các hệ thức bất định Heisenberg:

$$\Delta x.\ \Delta p \geq 2\pi\hbar \text{ và } \Delta E.\ \Delta t \geq 2\pi\hbar \qquad (7)$$

1.5. L-ìng tÝnh sãng-h¹t cña ¸nh s¸ng vµ h¹t vi m«

- Gièng nhau:

$$E = \hbar\omega\,, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}\,, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

- Kh¸c nhau:

Víi ¸nh s¸ng: $\upsilon = c\,, \quad \lambda = \dfrac{hc}{E}$

Víi h¹t vi m«: $\upsilon \neq c\,, \quad \lambda = \dfrac{h}{p} = \dfrac{h}{m\upsilon}$

$\lambda(nm) = \sqrt{\dfrac{1{,}5}{U(von)}}$ hoÆc $\lambda(nm) = \sqrt{\dfrac{1{,}226}{K(eV)}}$ víi $K = \dfrac{1}{2}m\upsilon^2$

VÊn ®Ò trao ®æi – Bµi tËp

1. §äc thªm thÝ nghiÖm kiÓm chøng tÝnh chÊt sãng cña ®iÖn tö.
2. Chứng minh các tính chất của sóng D.Broglie.
3. Bµi tËp 2.1 ®Õn 2.6.

II. DiÔn t¶ tr¹ng th¸i h¹t vi m« bëi hµm sãng

2.1.Mçi tr¹ng th¸i cña h¹t vi m« ®-îc diÔn t¶ bëi HS $\psi(\vec{r},t)$
C¸c $\psi(\vec{r},t)$ tu©n theo nguyªn lý chång chÊp tr¹ng th¸i:
nÕu $\psi_1(\vec{r},t)$, $\psi_2(\vec{r},t)$, ..$\psi_N(\vec{r},t)$ diÔn t¶ tr¹ng th¸i vËt lý kh¶ dÜ th×

$$\psi(\vec{r},t)=\sum_{n=1}^{N}c_n\psi_n(\vec{r},t) \qquad (8)$$

víi C_n lµ h»ng sè tuú ý còng diÔn t¶ tr¹ng th¸i vËt lý kh¶ dÜ cña h¹t vi m«.

- MËt ®é x¸c suÊt x¸c ®Þnh vÞ trÝ h¹t vi m«

$$\rho(\vec{r},t)=\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2$$

• $\psi(\vec{r},t)$ tho¶ m·n ®iÒu kiÖn chuÈn ho¸

$$\int_V \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d\vec{r} = 1$$

V: kho¶ng kh«ng gian mµ h¹t vi m« chuyÓn ®éng trong ®ã.

• Kh«ng gian vect¬ c¸c hµm sãng: lµ tËp hîp mäi $\psi(\vec{r},t)$ cña h¹t vi m« - lµ kh«ng gian Hilbert nÕu tÝch v« h-íng cña hai hµm sãng ®-îc ®Þnh nghÜa

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int_V \varphi(\vec{r},t)^* \, \psi(\vec{r},t) \, d\vec{r} = \langle\psi|\varphi\rangle^* \qquad (9)$$

Trong ®ã c¸c hµm sãng $\varphi(\vec{r},t)$ vµ $\psi(\vec{r},t)$ cã $\int_V \left|\varphi(\vec{r},t)\right|^2 d\vec{r}$ vµ $\int_V \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d\vec{r}$ giíi néi.

Nếu: $\varphi(\vec{r},t)$ vµ $\psi(\vec{r},t)$ lµ trùc giao thì $\langle \varphi | \psi \rangle = 0$

Hö hµm c¬ së $\psi_n(\vec{r})$ lµ trùc giao chuÈn ho¸ nÕu mäi cặp $\psi(\vec{r},t)$ thoả mãn đk

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \int_V \psi_n(\vec{r})^* \psi_m(\vec{r})\, d\vec{r} = \underset{\psi_n(\mathrm{r})}{\delta_{nm}} \qquad (10)$$

Hö hµm c¬ së $\psi_n(\vec{\mathrm{r}})$ lµ ®ñ nÕu mäi $\psi(\vec{\mathrm{r}},\mathrm{t})$ ®-îc biÓu diÔn bởi

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n(t)\psi_n(\vec{r}) \qquad (11)$$

vµ tho¶ m·n

$$\sum_n \psi_n(\vec{r})\psi_n(\vec{r}\,')^* = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,') \qquad (12)$$

NÕu $r = r'$ $\rightarrow$ $\sum_n \psi_n(\vec{r})^* \psi_n(\vec{r}) = 1$

Trong ®ã: $c_n(t)$ lµ c¸c thµnh phÇn cña mét vect¬ trong kh«ng gian vect¬ v« sè chiÒu hoµn toµn x¸c ®Þnh $\psi(\vec{r},t)$ vµ hoµn toµn ®îc x¸c ®Þnh bëi $\psi(\vec{r},t)$.

$\psi_n(\vec{r})$ lµ hÖ hµm c¬ së trong kh«ng gian Hilbert c¸c hµm sãng.

$$\langle\psi_m|\psi\rangle = \int_V \psi_m(\vec{r})^* \psi(\vec{r},t)\, d\vec{r} = \int_V \psi_m(\vec{r})^* \sum_n c_n(t)\psi_n(\vec{r})\, d\vec{r} \tag{13}$$

$$= \sum_n c_n(t) \int \psi_m(\vec{r})^* \psi_n(\vec{r})\, d\vec{r} = \sum_n c_n(t)\, \delta_{nm} = c_m(t)$$

Theo (11) và (13), chuçi hÖ sè $c_n(t)$ vµ hµm sãng $\psi(\vec{r},t)$ lµ hai biÓu diÔn kh¸c nhau cña cïng mét tr¹ng th¸i của hạt vi m«. Nếu trạng thái của hạt vi mô được biểu diễn bằng chuỗi $c_n(t)$ thì xác suất tìm thấy hạt ở trong trạng thái $\Psi_n(r)$ là $|c_n(t)|^2$

- TD: xét h¹t tù do, tr¹ng th¸i với xung lượng **p** xác định ®îc diÔn t¶ bëi sãng ph¼ng ®¬n s¾c có dạng

$$\psi(\vec{r},t)=\psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\vec{r})}$$

có thể viết lại $\psi_p(\vec{r})=\psi_p(x,y,z,)=Ce^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$

Sö dông công thức $\int e^{i\vec{k}\vec{r}}d\vec{r}=2\pi\delta(\vec{k})$, chọn C=$(2\pi\hbar)^{-3/2}$ thu ®îc

$$\psi_p(\vec{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \qquad (14)$$

Các hàm Ψ_p(**r**) này thoả mãn đk chuẩn hoá và cả đk đủ.

Vậy một hµm sãng Ψ_p(**r,**t) bÊt kú đều có thể triển khai trong biểu diễn toạ độ như sau:

$$\psi(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_V c(\vec{p},t)\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}\, d\vec{p} \tag{15}$$

Ngược lại, các hệ số c(**p**,t) được biểu diễn qua hàm sóng Ψ(**r**,t) :

$$c(\vec{p},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_V e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}\, \psi(\vec{r},t)\, d\vec{r} \tag{16}$$

Được gọi là hµm sãng trong biÓu diÔn xung l- î ng.

III. DiÔn t¶ ®¹i l-îng vËt lý b»ng to¸n tö tuyÕn tÝnh tù liªn hîp. PT.**Schrodinger**

To¸n tö $\hat{A}^{+}$ lµ liªn hîp víi $\hat{A}$ nÕu víi mäi cÆp $\psi_1(\vec{r}),\ \ \psi_2(\vec{r})$ có

$$\int (\hat{A}\psi_1(\vec{r}))^{*}\,\psi_2(\vec{r})d\,\vec{r} = \int \psi_1(\vec{r})^{*}\,\hat{A}^{+}\psi_2(\vec{r})d\,\vec{r} \qquad (17)$$

NÕu $\hat{A}^{+} = \hat{A}$ th× $\hat{A}$ lµ to¸n tö tù liªn hîp.

3.1. Mçi ®¹i l-îng vËt lý trong c¬ häc cæ ®iÓn cã 1 to¸n tö tuyÕn tÝnh tù liªn hîp t-¬ng øng, t¸c dông lªn hµm sãng trong c¬ häc l-îng tö

$$\vec{\mathrm{r}} \rightarrow \vec{\mathrm{r}}\ ; \quad \vec{\mathrm{p}} \rightarrow \hat{\vec{\mathrm{P}}} = -\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla} \qquad (18)$$

- C¸c hÖ thøc giao ho¸n chÝnh t¾c - ®iÒu kiÖn l-îng tö ho¸

Hãy tÝnh

$$[r_i, \hat{P}_j]$$

$$[r_i, \hat{P}_j]\psi(\vec{r},t) = (r_i\hat{P}_j - \hat{P}_j r_i)\psi(\vec{r},t) = i\hbar\delta_{ij}\psi(\vec{r},t)$$

Víi mäi $\psi(\vec{r},t)$, suy ra

$$[r_i, \hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij} \qquad (19)$$

$$[r_i, r_j] = [\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0 \qquad (20)$$

®-a vµo dÊu mãc Poisson l-îng tö

$$\left\{\hat{A}, \hat{B}\right\}_q = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{B}] = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}] \qquad (21)$$

ViÕt l¹i ®iÒu kiÖn l-îng tö ho¸

$$\begin{aligned} \{r_i, r_j\}_q &= \{\hat{P}_i, \hat{P}_j\}_q = 0 \\ \{r_i, \hat{P}_j\} &= -\{\hat{P}_i, r_j\}_q = \delta_{ij}\,. \end{aligned} \qquad (22)$$

3.2. C¸c hÖ thøc gi÷a c¸c to¸n tö diÔn t¶ c¸c ®¹i l-îng vËt lý trong c¬ häc l-îng tö cã d¹ng gièng nh- hÖ thøc gi÷a c¸c ®¹i l-îng vËt lý t-¬ng øng trong c¬ häc cæ ®iÓn.

¸p dông tiªn ®Ò:

- Ph-¬ng tr×nh Schrodinger – To¸n tö n¨ng l-îng $\hat{H}$.

- N¨ng l-îng cña h¹t trong c¬ häc cæ ®iÓn

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \qquad (21)$$

- Thay thÕ c¸c ®¹i l-îng vËt lý cæ ®iÓn thµnh to¸n tö

$$\vec{p} \to -i\hbar\vec{\nabla} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}\right); \quad \vec{r} \to \vec{r} \qquad (22)$$

$$\hat{E} \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \qquad ; \quad t \to \hat{t}$$

- Thu ®-îc ph-¬ng tr×nh to¸n tö

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = -\hbar^2\frac{\vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r}) \qquad (23)$$

- T¸c dông hai vÕ lªn $\psi(\vec{r},t)$

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left[-\hbar^2\frac{\vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r},t) \qquad (24)$$

®©y lµ ph-¬ng tr×nh Schrodinger – ph-¬ng tr×nh c¬ b¶n cña vËt lý l-îng tö.

- To¸n tö n¨ng l-îng – Hamitonian:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \qquad (25)$$

- Ph-¬ng tr×nh Schrodinger dừng: đã biết

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\vec{r},t)} \qquad (26)$$

NÕu V(r) ko phô thuéc t-êng minh t , nghiÖm (22) cã d¹ng

$$\boxed{\psi_E(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi_E(\vec{r})} \qquad (27)$$

trong ®ã $\psi_E(\vec{r})$ tho¶ m·n ph-¬ng tr×nh Schrodinger dõng:

$$\boxed{\hat{H}\psi_E(\vec{r}) = E\psi_E(\vec{r})} \qquad (28)$$

Hµm sãng $\psi_E(\vec{r})$ lµ hµm riªng cña $\hat{H}$ t-¬ng øng trþ riªng E. Tr¹ng th¸i diÔn t¶ bëi $\psi_E(\vec{r})$ cã n¨ng l-îng E x¸c ®þnh gäi lµ tr¹ng th¸i dõng.

- To¸n tö m«men xung l-îng $\hat{L}$

- M«men xung l-îng quü ®¹o trong c¬ häc cæ ®iÓn

$$\vec{l} = [\vec{r} \wedge \vec{p}]$$

- To¸n tö m«men xung l-îng quü ®¹o trong c¬ häc l-îng tö

$$\hat{\vec{L}} = \left[\vec{r} \wedge \hat{\vec{P}} \right] = -i\hbar \left[\vec{r} \wedge \vec{\nabla} \right] \qquad (29)$$

c¸c thµnh phÇn

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \hat{L}_1 = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{L}_y &= \hat{L}_2 = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \right), \qquad (30) \\ \hat{L}_z &= \hat{L}_3 = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned}$$

- To¸n tö $\hat{\vec{L}}^2$

$$\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2 \,. \qquad (31)$$

- C¸c hÖ thøc giao ho¸n

$$\begin{aligned} \left[\hat{L}_x , \hat{L}_y \right] &= i\hbar \hat{L}_z \,, \\ \left[\hat{L}_y , \hat{L}_z \right] &= i\hbar \hat{L}_x \,, \\ \left[\hat{L}_z , \hat{L}_x \right] &= i\hbar \hat{L}_y \,. \end{aligned} \qquad (32)$$

$$\left[\hat{\vec{L}}^2 , \hat{L}_i \right] = 0 \,, \qquad i = 1,2,3. \qquad (33)$$

3.3. BiÓu diÔn c¸c to¸n tö b»ng c¸c ma trËn

Cho $\hat{A}$ diÔn t¶ ®¹i l-îng vËt lý A, $\psi(\vec{r})$, $\psi'(\vec{r})$ liªn hÖ víi nhau

$$\psi'(\vec{r}) = \hat{A}\psi(\vec{r}) \qquad (34)$$

Chän hÖ hµm c¬ së $\psi_n(\vec{r})$ trùc giao chuÈn ho¸, khai triÓn

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r})$$
$$\psi'(\vec{r}) = \sum_n c'_n \psi_n(\vec{r}) \qquad (35)$$

C¸c hÖ sè khai triÓn

$$c_n = \int \psi_n(\vec{r})^* \psi(\vec{r}) d\vec{r}$$
$$c'_n = \int \psi_n(\vec{r})^* \psi'(\vec{r}) d\vec{r}. \qquad (36)$$

H·y biÓu diÔn c'_n qua c_n . Dïng (13) vµ ®Æt

$$A_{nm} = \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_m \rangle = \langle \psi_n \,|\, \hat{A}\psi_m \rangle = \int \psi_n(\vec{r})^* \hat{A}\psi_m(\vec{r})\, d\,\vec{r} \qquad (37)$$

Tõ (31) thu ®-îc

$$c'_n = \int \psi_n(\vec{r})^* \hat{A}\psi(\vec{r})\, d\,\vec{r}$$

$$= \sum_m \int \psi_n(\vec{r})^* \hat{A}(\vec{r})\psi_m(\vec{r})d\vec{r}\, c_m$$

nghÜa lµ

$$c'_n = \sum_m A_{nm} c_m . \qquad (38)$$

Ký hiÖu $\tilde{\psi}$ vµ $\tilde{\psi}'$ lµ hai cét

$$\tilde{\psi} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \ldots \\ c_n \\ \ldots \end{pmatrix} , \qquad \tilde{\psi}' = \begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \ldots \\ c'_n \\ \ldots \end{pmatrix} ,$$

$\tilde{A}$ lµ ma trËn

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} & \ldots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} & \ldots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots \end{pmatrix} ,$$

ViÕt l¹i (34) d-íi d¹ng ma trËn $\tilde{\psi}' = \tilde{A}\tilde{\psi}$

(39)

(cét) = (ma trËn) (cét)

$\Rightarrow$ tÝnh to¸n gi¶i tÝch $\Rightarrow$ tÝnh to¸n ®¹i sè.

IV. Gi¸ trÞ ®o ®-îc cña c¸c ®¹i l-îng vËt lý

4.1. TrÞ riªng cña $\hat{A}$ diÔn t¶ ®¹i l-îng vËt lý A t¹o thµnh phæ c¸c gi¸ trÞ cña ®¹i l-îng vËt lý A mµ ta cã thÓ ®o ®-îc trong thùc nghiÖm.

- Vì $\hat{A}$ lµ Hermitic $\rightarrow$ trÞ riªng lµ thùc.
- Phæ các gi¸ trÞ ®o ®-îc có thể gi¸n ®o¹n/ liªn tôc/ gi¸n ®o¹n-liªn tôc/ d¶i liªn tôc t¸ch rêi.
- Các giá trị đo được cã thÓ suy biÕn. TD møc n¨ng l-îng:

với 1 gi¸ trÞ E cã nhiÒu ψ ®éc lËp tuyÕn tÝnh.

4.2. Gi¸ trÞ trung b×nh

$$\overline{A}(t) = \left\langle \hat{A} \right\rangle = \int_V \psi(\vec{r},t)^* \hat{A} \psi(\vec{r},t)\, d\,\vec{r} \qquad (40)$$

To¸n tö $\hat{A}$ cã hÖ hµm riªng $\psi_a(r)$ øng víi trÞ riªng a

$$\hat{A}\psi_a(\vec{r}) = a\,\psi_a(\vec{r}) \qquad (41)$$

xÐt tr-êng hîp a_n gi¸n ®o¹n:

t¹i thêi ®iÓm t_1 ®o ®-îc a_1: $\hat{A}\psi_1(\vec{r}) = a_1\psi_1(\vec{r}),$

t¹i thêi ®iÓm t_2 ®o ®-îc a_2: $\hat{A}\psi_2(\vec{r}) = a_2\psi_2(\vec{r}),$

NghÜa lµ:

$$\boxed{\hat{A}\psi_n(\vec{r}) = a_n\psi_n(\vec{r})} \qquad (42)$$

§iÒu kiÖn trùc giao chuÈn ho¸ cã d¹ng

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \int \psi_n(\vec{r})^* \psi_m(\vec{r})\, d\vec{r} = \delta_{nm} \tag{43}$$

TriÓn khai $\psi(\vec{r},t)$ theo hÖ hµm riªng $\psi_n(\vec{r})$

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n(t)\psi_n(\vec{r}) \tag{44}$$

Thay (44) vµo (40), dïng (43) thu ®-îc

$$\overline{A}(t) = \sum_n a_n |c_n(t)|^2 \tag{45}$$

$|c_n(t)|^2$ lµ x¸c suÊt ®Ó trong phÐp ®o A t¹i thêi ®iÓm t tìm thấy hạt ở trạng thái $\Psi_n(\mathbf{r})$ nhËn ®-îc gi¸ trÞ a_n.

Tr-êng hîp gi¸ trÞ riªng liªn tôc

$$\overline{A}(t) = \int a |c_a(t)|^2 da \tag{46}$$

4.3. Hµm sãng hÖ nhiÒu h¹t

- XÐt hÖ N h¹t vi m« m_1, m_2, …m_N chuyÓn ®éng trong tr-êng thÕ, t-¬ng t¸c víi nhau.

To¹ ®é $\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N$

Xung l-îng $\vec{p}_1, \vec{p}_2, ..., \vec{p}_N$

$$\vec{p}_\alpha = m_\alpha \dot{\vec{r}}_\alpha$$

ThÕ n¨ng $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_{N;} \vec{p}_1, \vec{p}_2, ..., \vec{p}_N)$

N¨ng l-îng toµn phÇn

$$E = \sum_\alpha \frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m_\alpha} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_{N;} \vec{p}_1, \vec{p}_2, ..., \vec{p}_N; t) \qquad (43)$$

Thay thÕ

$$\vec{r}_\alpha \rightarrow \vec{r}_\alpha$$

$$\vec{p}_\alpha \rightarrow \hat{\vec{P}} = -i\hbar\vec{\nabla}_\alpha = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \vec{r}_\alpha} \cdot \qquad (44)$$

C¸c hÖ thøc giao ho¸n gi÷a c¸c thµnh phÇn $r_{\alpha i}$ vµ p $_{\alpha i}$

$$[r_{\alpha i}, r_{\beta j}] = [\hat{P}_{\alpha i}, \hat{P}_{\beta j}] = 0,$$
$$[r_{\alpha i}, \hat{P}_{\beta j}] = -[\hat{P}_{\alpha i}, r_{\beta j}] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}. \qquad (45)$$

- Hamitonian cña hÖ sau khi thay (44) vµ (43)

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} \frac{\vec{p}_{\alpha}^{\,2}}{2m_{\alpha}} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_{N;} \hat{\vec{P}}_1, \hat{\vec{P}}_2, ..., \hat{\vec{P}}_N; t) \qquad (46)$$

- Hµm sãng cña hÖ $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N; t)$ lµ nghiÖm ph¬ng tr×nh Schrodinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N; t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N; t) \qquad (47)$$

- Tr-êng hîp V kh«ng phô thuéc t-êng minh vµo t, nghiÖm (47) cã d¹ng

$$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...,\vec{r}_N;t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi_E(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...,\vec{r}_N), \qquad (48)$$

$\psi_E(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...,\vec{r}_N)$ lµ nghiÖm cña ph-¬ng tr×nh Schrodinger dõng

$$\hat{H}\psi_E(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...,\vec{r}_N)=E\psi_E(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...,\vec{r}_N) \qquad (49)$$

chÝnh lµ hµm riªng cña $\hat{H}$ kh«ng phô thuéc t t-¬ng øng trÞ riªng E

$$\hat{H}=\sum_\alpha \frac{\hat{\vec{p}}_\alpha^{\,2}}{2m_\alpha}+V(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...,\vec{r}_N;\hat{\vec{P}}_1,\hat{\vec{P}}_2,...,\hat{\vec{P}}_N) \qquad (50)$$

- X¸c suÊt ®Þnh vÞ trÝ h¹t 1 trong thÓ tÝch dr_1 quanh ®iÓm $\vec{r}_1$, h¹t 2 trong thÓ tÝch dr_2 quanh ®iÓm $\vec{r}_2$, h¹t N trong thÓ tÝch dr_N quanh ®iÓm $\vec{r}_N$ t¹i thêi ®iÓm t bằng:

(51)

$$dW(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...,\vec{r}_N;t) = |\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...,\vec{r}_N;t)|^2\, d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 ... d\vec{r}_N .$$

§iÒu kiÖn chuÈn ho¸ hµm sãng là: (52)

$$\int...\int |\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...,\vec{r}_N;t)|^2\, d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 ... d\vec{r}_N = 1.$$

NÕu c¸c h¹t kh«ng t¬ng t¸c víi nhau th× : (53)

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} \hat{H}_{\alpha}$$

Trong ®ã, Hamiltoniancủa từng hạt chuyển động trong trường ngoài là

$$\hat{H}_\alpha = \frac{\hat{\vec{P}}_\alpha^2}{2m_\alpha} + V^{(\alpha)}(\vec{r}_\alpha, \hat{\vec{P}}_\alpha). \qquad (54)$$

Lóc nµy có thể tìm HS dươi dạng tích trực tiếp của N HS của từng hạt riêng biệt (55)

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N; t) = \psi^{(1)}(\vec{r}_1, t)\psi^{(2)}(\vec{r}_2, t)...\psi^{(N)}(\vec{r}_N, t)$$

mçi $\psi^{(\alpha)}(\vec{r}_\alpha, t)$ lµ hµm riªng cña $\hat{H}_\alpha$ (56)

$$\hat{H}_\alpha \psi^{(\alpha)}(\vec{r}_\alpha, t) = E^{(\alpha)}\psi^{(\alpha)}(\vec{r}_\alpha, t)$$

N¨ng l- î ng toµn phÇn cña hÖ $E = \sum_\alpha E^{(\alpha)}.$ (57)

XÐt hÖ N h¹t vi m« ®ång nhÊt, mỗi hạt khèi l-îng m.

Hamitonian của hệ

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} \frac{\hat{\vec{p}}_{\alpha}^{\,2}}{2m_{\alpha}} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N; \hat{\vec{P}}_1, \hat{\vec{P}}_2, ..., \hat{\vec{P}}_N; t)$$

kh«ng thay ®æi khi hoán vị 2 hạt bất kỳ $\vec{r}_{\alpha} \leftrightarrow \vec{r}_{\beta}$; $\vec{P}_{\alpha} \leftrightarrow \vec{P}_{\beta}$

Vì hạt vi mô kh«ng thÓ ph©n biÖt ®-îc $\rightarrow$ mËt ®é x¸c suÊt kh«ng thay ®æi khi ta hoán vị 2 hạt $\vec{r}_{\alpha} \leftrightarrow \vec{r}_{\beta}$, nghĩa lµ

$$|\psi(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_{\alpha}, ..., \vec{r}_{\beta}, ..., \vec{r}_N; t)|^2 = |\psi(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_{\beta}, ..., \vec{r}_{\alpha}, ..., \vec{r}_N; t)|^2 \quad (58)$$

Với mọi cặp chỉ số α,β

Khi N h¹t kh«ng t-¬ng t¸c víi nhau: hµm sãng hÖ N h¹t nh-(55), tuy nhiªn trong ®ã $\psi^{\alpha}(\vec{r}_{\alpha},t) \neq \psi^{\beta}(\vec{r}_{\beta},t)$, tuy thoả mãnPTSch, nhưng không thoả mãn đk (58) .

ĐK (58) đối với mô đun HS chuyÓn thµnh đk với chính HS

$$\psi(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_\alpha,\ldots,\vec{r}_\beta,\ldots,\vec{r}_N;t) = e^{i\eta}\,\psi(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_\beta,\ldots,\vec{r}_\alpha,\ldots,\vec{r}_N;t). \quad (59)$$

Trong đó giá trị thừa số pha $e^{i\eta}$ (η là số thực) phụ thuộc vào loại hạt vi mô.

VÊn ®Ò trao ®æi – Bµi tËp

1. Hµm sãng
2. Ph-¬ng tr×nh c¬ b¶n cña c¬ häc l-îng tö – c¸c ®¹i l-îng trong ®ã
3. Chøng minh c¸c hÖ thøc (28) vµ (29).
4. Khi nµo n¨ng l-îng cña hÖ E b»ng $E = \sum_{\alpha} E^{(\alpha)}$.

CHƯƠNG 2

CÁC ph-¬ng tr×nh, ®Þnh lý VÀ ĐỊNH LUẬT CƠBẢN suy ra tõ c¸c tiªn ®Ò cña c¬ häc l-îng tö

I. Ph-¬ng tr×nh chuyÓn ®éng lượng tử Heisenberg

Nghiªn cøu sù thay ®æi theo thêi gian cña gi¸ trÞ TB

$$\overline{A}(t) = \left\langle \hat{A} \right\rangle = \int_V \psi(\vec{r},t)^* \hat{A} \psi(\vec{r},t)\, d\,\vec{r} \tag{1}$$

$$\frac{d\overline{A}(t)}{dt} = \int \left[\begin{array}{l} \dfrac{\partial \psi(\vec{r},t)^*}{\partial t} \hat{A} \psi(\vec{r},t) + \\ \psi(\vec{r},t)^* \hat{A} \dfrac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} + \Psi(\bar{r},t)^* \dfrac{\partial A}{\partial t} \Psi(\bar{r},t) \end{array} \right] d\vec{r} \tag{2}$$

Sö dông ph-¬ng tr×nh Schrödinger

$$\frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi(\vec{r},t)$$

$$\frac{\partial \psi(\vec{r},t)^{*}}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}\hat{H}^{*}\psi(\vec{r},t)^{*} \qquad (3)$$

$$\frac{\mathrm{d}\,\overline{\mathrm{A}}(\mathrm{t})}{\mathrm{dt}} = \int_{\mathrm{V}} \psi(\vec{\mathrm{r}},\mathrm{t})^{*}\left[\frac{\partial \mathrm{A}}{\partial \mathrm{t}} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\hat{\mathrm{A}}\hat{\mathrm{H}} - \hat{\mathrm{H}}\hat{\mathrm{A}})\right]\psi(\vec{\mathrm{r}},\mathrm{t})\mathrm{d}\,\vec{\mathrm{r}} \qquad (4)$$

$$\frac{d\,\overline{A}(t)}{dt} = \left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle = \int_{V} \psi(\vec{r},t)^{*}\,\frac{d\hat{A}}{dt}\psi(\vec{r},t)d\,\vec{r} \qquad (5)$$

$$\frac{\mathrm{d}\,\hat{\mathrm{A}}}{\mathrm{dt}} = \frac{\partial \mathrm{A}}{\partial \mathrm{t}} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\hat{\mathrm{A}}\hat{\mathrm{H}} - \hat{\mathrm{H}}\hat{\mathrm{A}}) \qquad (6)$$

lµ ph¬ng tr×nh chuyÓn ®éng lîng tö Heisenberg.

Sö dông dÊu mãc Poisson

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{7}$$

Ph-¬ng tr×nh chuyÓn ®éng Heisenberg cã d¹ng

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{H}] \tag{8}$$

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \left\{\hat{A},\hat{H}\right\}_q \tag{8'}$$

t-¬ng tù ph-¬ng tr×nh Lagrangi¬ trong c¬ häc cæ ®iÓn

$$\frac{dL}{dt} = \frac{\partial L}{\partial t} + [H, L]$$

(L: hµm $\vec{r},\vec{p},t$; H: n¨ng l-îng)

II. C¸c ph-¬ng tr×nh chuyÓn ®éng l-îng tö của v $\vec{r}$ $\vec{p}$

ThiÕt lËp ph-¬ng tr×nh chuyÓn ®éng cña $\vec{r}$, $\vec{p}$ cho h¹t vi m« khối lượng m, chịu tác dụng trường lực thế năng $V(\vec{r})$

- C¸c ph-¬ng tr×nh Heisenberg cho $\vec{r}$, $\vec{p}$

$$\frac{d\,\vec{r}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\vec{r}, \hat{H}] \tag{9}$$

$$\frac{d\,\hat{\vec{P}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\vec{P}}, \hat{H}] \tag{10}$$

trong ®ã

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m} + V(\vec{r}) \tag{11}$$

Sö dông c¸c hÖ thøc giao ho¸n chÝnh t¾c gi÷a r_i vµ $\hat{P}_j$ suy ra

$$\frac{d\,\vec{r}}{dt} = \frac{\hat{\vec{P}}}{m} \qquad (12) \quad ; \qquad \frac{d\hat{\vec{P}}}{dt} = -\vec{\nabla} V(\vec{r}) \qquad (13).$$

Cã d¹ng gièng hÖt c¸c ph-¬ng tr×nh trong c¬ häc cæ ®iÓn

H·y thö l¹i (12) vµ (13):
V× $\vec{r}$ giao ho¸n $V(\vec{r})$ nªn ta cã $\vec{\upsilon} = \dfrac{\vec{P}}{m}\,; \quad \dfrac{d\vec{P}}{dt} = \vec{F}$

$$\frac{d\,\vec{r}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\cdot\frac{1}{2m}[\vec{r},\hat{\vec{P}}^2] = \frac{1}{i\hbar}\cdot\frac{1}{2m}\sum_j [\vec{r},\hat{P}_j^2]$$

$$[r_i, \hat{P}_j^2] = r_i \hat{P}_j^2 - \hat{P}_j^2 r_i =$$

$$= [r_i, \hat{P}_j]\hat{P}_j + \hat{P}_j[r_i, \hat{P}_j] = 2i\hbar\delta_{ij}\hat{P}_j$$

$$[\vec{r}, \hat{\vec{P}}^2] = 2i\hbar\hat{\vec{P}}$$

$$\frac{d\hat{\vec{P}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\vec{P}, V(\vec{r})] = -[\vec{\nabla}, V(\vec{r})]$$

$$[\vec{\nabla}, V(\vec{r})]\psi(\vec{r},t) = \vec{\nabla}\{V(\vec{r})\psi(\vec{r},t)\} - V(\vec{r})\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)$$

$$= \{\vec{\nabla}V(\vec{r})\}\cdot\psi(\vec{r},t)$$

$$[\vec{\nabla}, V(\vec{r})] = \vec{\nabla}V(\vec{r})$$

C¸c to¸n tö diÔn t¶ ®¹i l-îng vËt lý trong c¬ häc l-îng tö tu©n theo ph-¬ng tr×nh cã d¹ng gièng trong c¬ häc cæ ®iÓn.

III. C¸c ph-¬ng tr×nh chuyÓn ®éng cña c¸c gi¸ trÞ trung b×nh của TT toạ độ và TT $\overline{r}(t)$ ng lượng $\overline{p}(t)$

LÊy gi¸ trÞ trung b×nh hai vÕ c¸c ph-¬ng tr×nh (12) vµ (13)

$$\frac{d\,\overline{\vec{r}}(t)}{dt}=\frac{d}{dt}\left\langle \vec{r}\right\rangle =\frac{1}{m}\left\langle \hat{\vec{P}}\right\rangle =\frac{1}{m}\,\overline{\vec{p}}(t) \qquad (14)$$

$$\frac{d\,\overline{\vec{p}}(t)}{dt}=\frac{d}{dt}\left\langle \hat{\vec{P}}\right\rangle =-\left\langle \vec{\nabla}V(\vec{r})\right\rangle =-\overline{\vec{\nabla}V} \qquad (15)$$

§Þnh lý Ehrenfest

Gi¸ trÞ trung b×nh cña TT to¹ ®é $\overline{r}(t)$,TTxung l-îng $\overline{p}(t)$ vµ lùc $-\overline{\vec{\nabla}V}$ t¸c dông lªn h¹t vi m« tu©n theo nh÷ng ®Þnh luËt c¬ häc cæ ®iÓn.

IV. Phương trình liên tục

Mật độ xác suất định vị trí của hạt vi mô

$$\rho(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2 = \psi(\vec{r},t)^* \psi(\vec{r},t) \qquad (16)$$

Khảo sát sự biến thiên của mật độ xác suất theo thời gian

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho(\vec{r},t)}{\partial t} &= \frac{\partial \psi(\vec{r},t)^*}{\partial t}\psi(\vec{r},t) + \psi(\vec{r},t)^* \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} \\
&= -\frac{1}{i\hbar}(\hat{H}\psi(\vec{r},t))^* \psi(\vec{r},t) + \psi(\vec{r},t)^* \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi(\vec{r},t) \\
&= -\frac{i\hbar}{2m}(\vec{\nabla}^2 \psi(\vec{r},t))^* \psi(\vec{r},t) + \frac{i\hbar}{2m}\psi(\vec{r},t)^* \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{r},t) \\
&= \frac{i\hbar}{2m}\vec{\nabla}[\psi(\vec{r},t)^* \vec{\nabla}\psi(\vec{r},t) - (\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)^*)\psi(\vec{r},t)].
\end{aligned}$$

§Æt

$$\vec{j}(\vec{r},t) = -\frac{i\hbar}{2m}[\psi(\vec{r},t)^*\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t) - (\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)^*)\psi(\vec{r},t)]$$

$$\equiv -\frac{i\hbar}{2m}\psi(\vec{r},t)^*[\vec{\nabla} - \overleftarrow{\nabla}]\psi(\vec{r},t) \qquad (17)$$

Ph-¬ng tr×nh liªn tôc

$$\boxed{\frac{\partial\,\rho(\vec{r},t)}{\partial t} + div\,\vec{j}(\vec{r},t) = 0} \qquad (18)$$

Trong ®ã $\rho(\vec{r},t)$: mËt ®é x¸c suÊt

$\vec{j}(\vec{r},t)$: mËt ®é dßng x¸c suÊt

(18) cã d¹ng gièng ph-¬ng tr×nh liªn tôc khi nghiªn cøu c¬ häc chÊt láng. $\vec{j}(\vec{r},t)$ lµ vect¬ theo h-íng chuyÓn ®éng cña h¹t, cã ®é lín b»ng x¸c suÊt ®Ó h¹t ®i qua mét ®¬n vÞ diÖn tÝch vu«ng gãc víi $\vec{j}$ trong mét ®¬n vÞ thêi gian.

$$\rho_e(\vec{r},t) = e.\rho(\vec{r},t)$$: mËt ®é ®iÖn tÝch

$$\vec{j}_e(\vec{r},t) = e.\vec{j}(\vec{r},t)$$: mËt ®é dßng ®iÖn (19)

V. Nh÷ng ®¹i l-îng vËt lý ®ång thêi cã gi¸ trÞ x¸c ®Þnh

- ë tr¹ng th¸i $\psi_n(\vec{r})$ ®o ®¹i l-îng vËt lý A, ®-îc gi¸ trÞ A_n
  ®ång thêi ®o ®¹i l-îng vËt lý B, ®-îc gi¸ trÞ B_n

nghÜa lµ

$$\hat{A}\psi_n(\vec{r}) = A_n\psi_n(\vec{r}) \quad \text{vµ} \quad \hat{B}\psi_n(\vec{r}) = B_n\psi_n(\vec{r}) \qquad (20)$$

C¸c tr¹ng th¸i $\psi_n(\vec{r})$ lËp thµnh hÖ hµm c¬ së vµ mäi $\psi(\vec{r})$ cã d¹ng

$$\boxed{\psi(\vec{r}) = \sum_n c_n\psi_n(\vec{r})} \qquad (21)$$

Thử tính $[\hat{A},\hat{B}]\psi(\vec{r})$, dùng (20) và (21)

$$[\hat{A},\hat{B}]\psi(\vec{r}) = \hat{A}\hat{B}\psi(\vec{r}) - \hat{B}\hat{A}\psi(\vec{r}) = 0 \quad \text{với mọi } \psi(\vec{r})$$

$$[\hat{A},\hat{B}] = 0 \leftrightarrow \quad \hat{A} \text{ và } \hat{B} \text{ giao hoán} \qquad (22)$$

Các đại lượng vật lý A, B, C… đồng thời có giá trị xác định thì $\hat{A},\hat{B},\hat{C},...$ phải giao hoán với nhau, hoặc $\hat{A},\hat{B},\hat{C},...$ có cùng hàm riêng $\psi_n(\vec{r})$

Thí dụ

$$[x_i, x_j] = [\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0$$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{P}_i, \hat{P}^2] = 0$$

$$\left.\begin{aligned} &[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \\ &[\hat{r}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij} \\ &[\hat{r}, \hat{P}^2] = 2i\hbar \hat{P} \end{aligned}\right\}$$

§o ®ång thêi L_x vµ L_y hoÆc x vµ P_x th× kh«ng nhËn ®îc c¸c gi¸ trÞ x¸c ®Þnh. VËy ®é chÝnh x¸c ®¹t ®îc ®Õn møc nµo?

VI. Nguyªn lý bÊt ®Þnh Heisenberg

- Từ trên,nếu hai ĐLVL A,B không đồng thời có giá trị xác định thì các tt tương ứng với chúng không giao hoán. Khi đó:

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hat{C} \neq 0$$

Gọi tt thăng giáng

$$\Delta A = \hat{A} - \left\langle \hat{A} \right\rangle, \Delta B = \hat{B} - \left\langle \hat{B} \right\rangle$$

HT Bất định Heisb.

$$\left\langle (\Delta A)^2 \right\rangle \left\langle (\Delta B)^2 \right\rangle \geq \frac{1}{4} \left\langle \hat{C} \right\rangle^2 = \frac{1}{4} \left| \left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle \right|^2 \quad (23)$$

HTBĐ xác định cận dưới của tích 2 phương sai của 2 ĐLVL không đồng thời có giá trị xác định A, B.

Trường hợp = r , = t .HÖ thøc bÊt ®Þnh gi÷a E vµ t:

$$\boxed{\Delta E . \Delta t \geq 2\pi \hbar} \quad (24)$$

Δt lín → E x¸c ®Þnh: tr¹ng th¸i cã E x¸c ®Þnh lµ c©n b»ng – æn ®Þnh.

Δt nhá → E bÊt ®Þnh: tr¹ng th¸i cã E bÊt ®Þnh lµ kh«ng c©n b»ng.

ý nghÜa : kh¸ch quan, b¶n chÊt sãng cña h¹t vi m«.

TD: TÝnh ®é bÊt ®Þnh vÒ vËn tèc víi e trong ng.t./ h¹t m=0,1 kg, ®é bÊt ®Þnh vÞ trÝ 10-3m. NhËn xÐt.

VÊn ®Ò trao ®æi – Bµi tËp

Bµi tËp: 2.14, 2.15 vµ 2. 21

VII. các định luật bảo toàn

Kh¶o s¸t c¸c ®Þnh luËt b¶o toµn xung l-îng, m«men xung l-îng, n¨ng l-îng trong CHLT

- C¬ häc cæ ®iÓn: ®¹i l-îng cã ®¹o hµm theo thêi gian b»ng kh«ng $\rightarrow$ b¶o toµn.
- C¬ häc l-îng tö: ®¹i l-îng mµ to¸n tö biÓu diÔn cã ®¹o hµm theo thêi gian b»ng kh«ng $\rightarrow$ b¶o toµn.

Tõ ph-¬ng tr×nh lượng tử Heisenberg

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \{\hat{A}, \hat{H}\}_q$$

tr-êng hîp $\hat{A}$ kh«ng phô thuéc t-êng minh t:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \{\hat{A},\hat{H}\}_q = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{H}] \qquad (1)$$

Theo ®Þnh nghÜa, ®¹i l-îng A ®-îc b¶o toµn khi

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{H}] = 0 \qquad (2)$$

nghÜa lµ khi $[\hat{A},\hat{H}] = 0 \rightarrow$ ®¹i l-îng A ®-îc b¶o toµn.

7.1. §Þnh luËt b¶o toµn xung l-îng:

V× to¸n tö xung l-îng ko phô thuéc t-êng minh vào t nªn

(3)

$$\frac{d\hat{P}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{P},\hat{H}]$$

(4)

Vì $[\hat{P},\hat{H}] = 0$ Nên $\frac{d\hat{P}}{dt} = 0$

(5)

Xung l-îng cña h¹t vi m« lµ ®ai l-îng b¶o toàn

(Liªn quan víi t/c bÊt biÕn cña tt H víi phÐp tÞnh tiÕn)

7.2. §Þnh luËt b¶o toµn m«men xung l-îng qu**ỹ đạo** toµn phÇn:

TÝnh to¸n tõ t/c bÊt biÕn cña tt H víi phÐp quay cho thÊy

$$[\hat{L},\hat{H}] = 0 \qquad (6)$$

Vì $\hat{L}$ ko phô thuéc t-êng minh vào thời gian , nên

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{L},\hat{H}] = 0 \qquad \text{do đó} \qquad \frac{d\hat{L}}{dt} = 0 \qquad (8)$$

Mômen xung lượng L lµ ®¹i l-îng b¶o toµn.

7.3. §Þnh luËt b¶o toµn n¨ng l-îng

V× lu«n cã

$$[\hat{H},\hat{H}] = 0 \qquad (9)$$

nªn

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = 0 \qquad (10)$$

$\Rightarrow$ N¨ng l-îng E lµ ®¹i l-îng b¶o toµn.

7.4. **Định luật** b¶o toµn tÝnh ch½n lÎ (chØ cã CHLT):

XÐt phÐp nghÞch ®¶o kh«ng gian

®æi dÊu: $\vec{r} \to -\vec{r}\ , \quad \hat{P} \to -\hat{P}$

kh«ng ®æi dÊu: $\hat{L} = [\hat{r} \wedge \hat{P}] \to [-\hat{r} \wedge (-\hat{P})] = [\hat{r} \wedge \hat{P}]$ (11)

Hµm sãng lµ ch½n nÕu $\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$

Hµm sãng lµ lÎ nÕu $\psi(\vec{r}) = -\psi(-\vec{r})$

V× $\hat{H}$ bÊt biÕn víi phÐp biÕn ®æi (11) nªn tÝnh ch½n lÎ cña hµm sãng kh«ng thay ®æi theo thời gian

$\Rightarrow$ tÝnh ch½n lÎ ®îc b¶o toµn.

CHƯƠNG 3

LÝ THUYẾT LƯỢNG tö VỀ m«men xung l-îng

I. To¸n tö m«men xung l-îng quü ®¹o $\hat{L}$

$$\hat{L} = [\hat{r} \wedge \hat{P}] = -i\hbar[\hat{r} \wedge \vec{\nabla}] \qquad (1)$$

$$\hat{L}_x = \hat{L}_1 = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),$$

$$\hat{L}_y = \hat{L}_2 = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right),$$

$$\hat{L}_z = \hat{L}_3 = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

- C¸c hÖ thøc giao ho¸n quan träng

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \; ; \; [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x \; ; \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$$

II. Mômen xung lượng quỹ đạo $\hat{L}_z$, $\hat{L}^2$ và các hàm cÇu

BiÕn ®æi

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ z = r\cos\theta \end{cases}$$

th×

$$\hat{L}_z = \hat{L}_3 = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \qquad (2)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + ctg\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \qquad (3)$$

2.1. Hµm riªng cña $\hat{L}_z$ vµ $\hat{L}^2$ lµ **hàm cầu** $Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (4)$$

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (5)$$

víi l = 0,1,2, 3, 4, 5…được ký hiệu tương ứng là: s,p,d,f,g,h..

cßn $m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$. (với 1 giá trị l cho trước có 2l+1 gi¸ trÞ của m)

Thý dô:

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad ; \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$Y_{1,\pm1} = \pm\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi} \quad ; \quad Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16}}(3\cos^2\theta - 1)$$

2.2. Trþ riªng cña c¸c to¸n tö- giá trị của L và L_z

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2 \qquad L = \hbar\sqrt{l(l+1)} \qquad (6)$$

$$L_z = m\hbar \qquad (7)$$

(quy t¾c l-îng tö ho¸ cña Bohr)

2.3. Sự lượng tử hoá của L trong không gian.

(8)

TD. Với l=1 thì m= 0, 1 và -1. Véc tơ **L** chỉ có thể có 3 hướng ħxác định trong không gian sao cho $L_z = 0, \hbar, -\hbar$.

III. Spin cña h¹t vi m«

C¸c kÕt qu¶ thÝ nghiÖm thõa nhËn ®iÖn tö tù nã cã m«men ®éng l-îng riªng – spin – c¸c c«ng thøc t-¬ng tù $\hat{L}$, chØ $l \to s$, s =1/2.

$$S = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)} = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \qquad (9)$$

H×nh chiÕu lªn trôc z:

$$S_z = m_S\hbar \qquad \text{víi} \qquad m_s = +\frac{1}{2}; \quad -\frac{1}{2} \qquad (10)$$

M«men tõ riªng (khi ®Æt trong tõ tr-êng)

$$\vec{\mu}_S = -\frac{|e|}{m_e c}\vec{S} \qquad (11)$$

- To¸n tö Spin cña h¹t vi m« $\hat{\vec{S}}$

$$\begin{aligned} \hat{S}_x\hat{S}_y - \hat{S}_y\hat{S}_x &= i\hbar\hat{S}_z \\ \hat{S}_y\hat{S}_z - \hat{S}_z\hat{S}_y &= i\hbar\hat{S}_x \\ \hat{S}_z\hat{S}_x - \hat{S}_x\hat{S}_z &= i\hbar\hat{S}_y \end{aligned} \qquad (12)$$

V× c¸c h×nh chiÕu S_x, S_y, S_z chØ cã thÓ cã 2 gi¸ trÞ $\pm\frac{1}{2}$ th× $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ ph¶i m« t¶ bëi ma trËn vu«ng cÊp hai, ®Æt:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z \qquad (13)$$

Trong ®ã $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ lµ c¸c ma trËn vu«ng cÊp 2, cã trÞ riªng ± 1 – ma trËn Pauli. Sö dông (12), (13) t×m ®îc

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (14)$$

trþ riªng cña $\hat{\sigma}_z$ lµ $\pm 1 \Rightarrow$ trþ riªng cña $\hat{S}_z$ lµ $\pm \hbar/2$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad (15)$$

- To¸n tö $\hat{\vec{S}}^2$:

$$S^2 = \frac{\hbar^2}{4}(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad (16)$$

- Tãm l¹i:

$$S_z = m_s \hbar \; ; \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

$$S = \hbar\sqrt{s(s+1)} \; ; \quad s = \frac{1}{2}$$

IV. To¸n tö m«men xung l-îng toµn phÇn $\hat{\vec{J}}$

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}} \qquad (17)$$

- TrÞ riªng cña $\hat{\vec{J}}$ lµ $\hbar\sqrt{j(j+1)}$

  j: nguyªn, b¸n nguyªn, kh«ng ©m.
- TrÞ riªng cña $\hat{J}_z$ lµ : $m_j\hbar$; J_z cã (2j+1) gi¸ trÞ:

$$-j\hbar, (-j+1)\hbar, ..., (j-1)\hbar, j\hbar$$

TËp hîp (2j +1) hàm sóng ứng(2j+1) trÞ riªng khác nhau cña $\hat{J}_z$ vµ với cùng một trÞ riªng $j(j+1)\hbar^2$ của $\hat{J}^2$

→ gọi là một ®a tuyÕn:

Nếu j = 0 → 1 hµm sãng, ®¬n tuyÕn

j = 1/2 → 2 hµm sãng, ứng J_z = 1/2 và -1/2 ,l-ìng tuyÕn

j =1 → 3 hµm sãng, ứng J_z = 1, 0 và -1, tam tuyÕn

- C¸c hÖ thøc giao ho¸n

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z \; ; \; [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x \; ; \; [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y \qquad (18)$$

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \qquad (19)$$

th× $\hat{J}^2$ giao ho¸n víi mäi $\hat{J}_i$

$$[\hat{J}_i, \hat{J}^2] = 0 \qquad (20)$$

tÝnh to¸n cho thÊy

$$[\hat{J}, \hat{H}] = 0 \qquad (21)$$

MÆc dï $\hat{\vec{L}}, \hat{\vec{S}}$ kh«ng giao ho¸n víi $\hat{H}$ nh-ng $\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}} = \hat{\vec{J}}$ l¹i giao ho¸n víi $\hat{H}$ ngay c¶ khi cã t-¬ng t¸c Spin-quü ®¹o ~ $\left(\hat{\vec{S}} . \hat{\vec{L}} \right)$

- Theo ph-¬ng tr×nh Heisenberg:

$$\frac{d\,\hat{J}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{J},\hat{H}]$$

th×

$$\frac{d\,\hat{J}}{dt} = 0 \qquad (22)$$

$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$ lµ ®¹i l-îng ®-îc b¶o toµn.

Tr-êng hîp hÖ nhiÒu h¹t, $\hat{H}$ bÊt biÕn víi phÐp quay kh«ng gian th× :

$$\hat{\vec{J}} = \sum_{\alpha} \vec{J}_{\alpha} \qquad \text{b¶o toµn} \qquad (23)$$

M«men tõ quü ®¹o $\vec{\mu}_L$ do ®iÖn tö mang ®iÖn tÝch chuyÓn ®éng

$$\vec{\mu}_L = -\mu_B \vec{L} \qquad (24)$$

víi magneton Bohr

$$\mu_B = \frac{|e|}{2m_e c} \qquad (25)$$

- M«men tõ riªng

$$\vec{\mu}_S = -2\mu_B \vec{S} \qquad (26)$$

M«men spin 2 lÇn hiÖu qu¶ h¬n $\vec{\mu}_L$ trong viÖc lµm ph¸t sinh tõ

- M«men tõ toµn phÇn

$$\vec{\mu}_e = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S \qquad (27)$$

V. Céng m«men xung l- îng

- xÐt hÖ hai h¹t, bỏ qua tương tác giữa chúng

- H¹t 1: j_1 , $(2j_1 + 1)$ hµm sãng $\psi^{(1)}_{j_1\mu_1}$, $-j_1 \leq \mu_1 \leq j_1$

- H¹t 2: j_2 , $(2j_2 + 1)$ hµm sãng $\psi^{(2)}_{j_2\mu_2}$, $-j_2 \leq \mu_2 \leq j_2$

- M«men xung l- îng hÖ $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{J}}^{(1)} + \hat{\vec{J}}^{(2)}$ (28)

trong ®ã

$$\hat{\vec{J}}^{(1)2}\psi^{(1)}_{j_1\mu_1} = j_1(j_1+1)\hbar^2\psi^{(1)}_{j_1\mu_1} \tag{29}$$

$$\hat{\vec{J}}^{(2)2}\psi^{(2)}_{j_2\mu_2} = j_2(j_2+1)\hbar^2\psi^{(2)}_{j_2\mu_2} \tag{30}$$

Hµm sãng hÖ

$$\Phi_{j\mu} = \sum_{\mu_1+\mu_2=\mu} C^{j\mu}_{j_1\mu_1 j_2\mu_2}\psi^{(1)}_{j_1\mu_1}\psi^{(2)}_{j_2\mu_2} \tag{31}$$

C:hệ số Clebsh-Gordan,thực,thoả mãn đk trực giao,chuẩnhoá.

víi

$$\hat{J}\Phi_{j\mu} = j(j+1)\hbar^2\Phi_{j\mu} \qquad (32)$$

víi

$$\left|j_1 \overset{(35)}{-} j_2\right| \le j \le j_1 + j_2 \qquad (33)$$

$$\hat{J}_z\Phi_{j\mu} = (\mu_1 + \mu_2)\hbar\Phi_{j\mu} \qquad (34)$$

$$-j < \mu = (\mu_1 + \mu_2) < j$$

Tóm lại: Với j_1 , j_2 cho trước lập được các HS (31) của hệ 2 hạt có MMXLTP **j** và hình chiếu μ (35) với j(33)lấy các giá trị cách nhau 1đv, j(max)= $j_1 + j_2$, j(min)= $j_1 - j_2$. Mỗi j xuất hiện 1 lần. Ứng 1 j có (2j +1) giá trị khác nhau μ. Số HS(31) với tất cả các giá trị khả dĩ của j là : $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$.

Tr-êng hîp 1 h¹t víi hai lo¹i bËc tù do kh¸c nhau

- BËc tù do chuyÓn ®éng quü ®¹o $\hat{\vec{L}}$, bậc tự do spin $\hat{\vec{S}}$

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$$

Với $s = \pm 1/2$ $\qquad j = l \pm 1/2$

- cã liªn kÕt $\hat{\vec{L}}.\hat{\vec{S}}$ th×: $\hat{\vec{J}}$ b¶o toµn, $\hat{\vec{L}}$ cã thÓ kh«ng

$\rightarrow$ph¶i lÊy $j = l \pm \frac{1}{2}$ lµm sè l-îng tö tr¹ng th¸i.

HÖ gåm nhiÒu ®iÖn tö chuyÓn ®éng trong tr-êng xuyªn t©m:

- T-¬ng t¸c $\hat{\vec{L}}.\hat{\vec{S}}$ m¹nh h¬n t-¬ng t¸c Coulomb

sau ®ã

$$\hat{\vec{j}}_\alpha = \hat{\vec{l}}_\alpha + \hat{s}_\alpha$$

$$\hat{\vec{J}} = \sum_\alpha \hat{J}_\alpha \qquad \text{(jj – coupling)}$$

- T-¬ng t¸c $\hat{\vec{L}}.\hat{\vec{S}}$ yÕu h¬n Coulomb

$$\hat{L} = \sum_\alpha l_\alpha \; ; \quad \hat{S} = \sum_\alpha \hat{s}_\alpha \quad \Rightarrow \quad \hat{J} = \hat{L} + \hat{S} \qquad \text{(LS – coupling)}$$

VÊn ®Ò trao ®æi – Bµi tËp

1. §äc thªm phÇn tÝnh to¸n hµm riªng, trÞ riªng cña $\hat{L}_z$ vµ $\hat{\vec{L}}^2$
1. S^2 vµ S_z cã thÓ ®o ®ång thêi. Chøng minh.
2. S_x^2, S_y^2, S_z^2 cã thÓ ®ång thêi x¸c ®Þnh hay kh«ng?
3. C¸c gi¸ trÞ ®o ®îc cña L, L_z, S, S_z. C¸c lîng tö sè l, m, m_s

CHƯƠNG 4

HÀM SÓNG VÀ phæ n¨ng l-îng CỦA MỘT SỐ HỆ VI MÔ ĐIỂN HÌNH

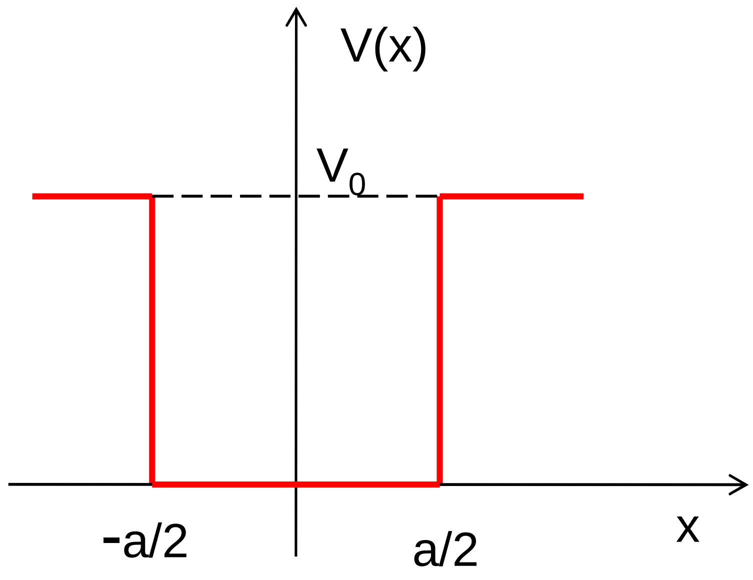
Phæ n¨ng l- îng cña h¹t vi m« - do d¹ng thÕ n¨ng quyÕt ®Þnh- :Gi¸n ®o¹n / liªn tôc / møc gi¸n ®o¹n – vïng liªn tôc / vïng liªn tôc – ph©n c¸ch bëi vïng cÊm.

I. H¹t vi m« trong giÕng thÕ n¨ng

H¹t vi m« m, chuyÓn ®éng däc Ox, thÕ n¨ng V(x)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & khi \quad |x| < \dfrac{a}{2} \\ V_0 > 0 & khi \quad |x| > \dfrac{a}{2} \end{cases} \qquad (1)$$

GiÕng thÕ ch÷ nhËt mét chiÒu réng a, cao V_0.



H×nh 8.1

Ph-¬ng tr×nh Schrodinger cho tr¹ng th¸i dõng ψ(x), n¨ng l-îng E

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \begin{cases} E\psi(x) & khi \quad |x| < \dfrac{a}{2} \\ (E - V_0)\psi(x) & khi \quad |x| > \dfrac{a}{2} \end{cases} \qquad (2)$$

Tr-êng hîp E < V_0 :

®Æt

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}, \tag{3}$$

$$\lambda^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} = k_0^2 - k^2 .$$

Ph-¬ng tr×nh Schrodinger ®-îc viÕt l¹i

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \begin{cases} -k^2\psi(x) & khi \quad |x| < \dfrac{a}{2} \\ \lambda^2\psi(x) & khi \quad |x| > \dfrac{a}{2} \end{cases} \tag{4}$$

NghiÖm tæng qu¸t cña ph-¬ng tr×nh (4) cã d¹ng

$$\psi(x) = \begin{cases} A\cos kx + B\sin kx & khi \quad |x| < \dfrac{a}{2} \\ Ce^{-\lambda x} + De^{\lambda x} & khi \quad |x| > \dfrac{a}{2} \end{cases} \qquad (5)$$

Do $\psi(x)$ ph¶i giíi néi khi $x \to \pm\infty$ nªn:

$De^{\lambda x}$ bÞ lo¹i bá trong kho¶ng x > a/2, $Ce^{\lambda x}$ bÞ lo¹i bá trong kho¶ng x < a/2, v× thÕ (5) cã d¹ng

$$\psi(x) = \begin{cases} De^{\lambda x} & khi \quad x \le -\dfrac{a}{2} \\ A\cos kx + B\sin kx & khi \quad -\dfrac{a}{2} \le x \le \dfrac{a}{2} \\ Ce^{-\lambda x} & khi \quad x \ge \dfrac{a}{2} \end{cases} \qquad (6)$$

xÐt tÝnh ch½n lÎ cña hµm sãng:

hµm ch½n $\psi^{ch}(x) = \psi^{ch}(-x)$ cã d¹ng

$$\psi^{ch}(x) = \begin{cases} Ce^{\lambda x} & khi \quad x \le -\dfrac{a}{2} \\ A\cos kx & khi \quad -\dfrac{a}{2} \le x \le \dfrac{a}{2} \\ Ce^{-\lambda x} & khi \quad x \ge \dfrac{a}{2} \end{cases} \qquad (7a)$$

hµm lÎ $\psi^{l}(x) = -\psi^{l}(-x)$ cã d¹ng

$$\psi^{l}(x) = \begin{cases} -Ce^{\lambda x} & khi \quad x \le -\dfrac{a}{2} \\ B\sin kx & khi \quad -\dfrac{a}{2} \le x \le \dfrac{a}{2} \\ Ce^{-\lambda x} & khi \quad x \ge \dfrac{a}{2} \end{cases} \qquad (7b)$$

Sö dông ®iÒu kiÖn liªn tôc cña $\psi(x)$ vµ $d\psi(x)/dx$ t¹i $x= \pm a/2$

Víi $\psi^{ch}(x)$ t¹i x=a/2

$$ka\ tg\frac{ka}{2} = \lambda a \qquad (8a)$$

Víi $\psi^{l}(x)$ t¹i x=-a/2

$$-ka\ tg\frac{ka}{2} = \lambda a \qquad (8b)$$

Gi¶i (8a) vµ (8b) b»ng ®å thÞ, thay k, λ tõ (3) $\Rightarrow$ sè nghiÖm E gi¸n ®o¹n phô thuéc V_0a^2

NÕu $V_0a^2 < \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}$ th× (8a) cã 1 nghiÖm, (8b) kh«ng cã nghiÖm.

nÕu $\frac{\hbar^2\pi^2}{2m} < V_0a^2 < 4\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}$ th× (8a) cã 1, (8b) cã 1

NÕu $4\frac{\hbar^2\pi^2}{2m} < V_0 a^2 < 9\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}$ th× (8a) cã 2 nghiÖm, (8b) cã mét nghiÖm.

- Trêng hîp E > V_0 (h÷u h¹n)

ψ(x) giíi néi khi x $\rightarrow \pm\infty$ lu«n tho¶ m·n $\Rightarrow$ E nhËn mäi gi¸ trÞ $\Rightarrow$ phæ E liªn tôc.

- Trêng hîp $V_0 \rightarrow \infty$:

$\lambda \rightarrow \infty$ do ®ã

$$\psi(x) = 0 \text{ khi } |x| \geq a/2 \qquad (9)$$

Sö dông tÝnh chÊt liªn tôc

$$\psi(a/2) = \psi(-a/2) = 0$$

$$\psi^{ch}(-a/2) = A\cos(k\,a/2) = 0$$

Suy ra

$$\frac{ka}{2} = (2n+1)\frac{\pi}{2} \qquad (9a)$$

vµ $\psi^{I}(a/2) = B\sin(k\,a/2) = 0$

suy ra

$$\frac{ka}{2} = 2n \cdot \frac{\pi}{2} \qquad (9b)$$

KÕt hîp c¶ (9a) vµ (9b) ta cã:

$$ka = n\pi\,, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

nghÜa lµ E cã c¸c gi¸ trÞ gi¸n ®o¹n

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

<u>Tãm l¹i:</u>

Víi V_0 h÷u h¹n:+ phổ E gi¸n ®o¹n khi E < V_0

+ phổ E liªn tôc khi E > V_0

+ ρ (ngoµi giÕng) $\neq 0$.

Víi $V_0 \rightarrow \infty$: + phổ E gi¸n ®o¹n, không còn phổ liên tục nữa

+ ρ (ngoµi giÕng) = 0. Hạt vi mô bị giam tuyệt đối trong giếng thếnăng

Sù l-îng tö ho¸ E xuÊt hiÖn do ®iÒu kiÖn biªn cña ph-¬ng tr×nh Schrodinger (Bohr thªm gi¶ thuyÕt vÒ l-îng tö ho¸).

VÊn ®Ò trao ®æi – Bµi tËp

1. §äc thªm thÕ bËc thang, hµng rµo thÕ (P. Q. T-, §. §. Thanh, C¬ häc l-îng tö, trang 77)
2. Bµi tËp: 2.7, 2.8, 2.9, 2.12*, 2.16, 2.19, 2.20, 2.21.

II. Nguyªn tö tù**ơng tự** hydro

2.1. **Phổ năng lượng**

XÐt chuyÓn ®éng cña mét h¹t μ (khèi l-îng thu gän cña đtö – h¹t nh©n), ®iÖn tÝch –e, chuyÓn ®éng trong tr-êng tÜnh ®iÖn cña Ze cè ®Þnh. Chän gèc täa ®é t¹i vÞ trÝ Ze.

Ph-¬ng tr×nh Schrodinger

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} \tag{10}$$

Dïng täa ®é cÇu

$$-\hbar^2\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2}\left[r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2r\frac{\partial}{\partial r}\right] + \frac{1}{r^2}\hat{L}^2 \tag{11}$$

trong ®ã

$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + ctg\,\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\right] + \frac{1}{\sin^2\theta}\hat{L}_z^2 \qquad (12)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \qquad (13)$$

V× $\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z$ giao ho¸n nhau, giao ho¸n $\hat{H}$ $\rightarrow$ xÐt tr¹ng th¸i dõng mµ hµm sãng ®ång thêi lµ hµm riªng cña $\hat{\vec{L}}^2$ vµ $\hat{L}_z$:

$$\hat{\vec{L}}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (14)$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (15)$$

- T×m nghiÖm $\psi(r,\theta,\varphi)$ cña ph-¬ng tr×nh

$$\hat{H}\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi)$$

d-íi d¹ng

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

• X¸c ®Þnh hµm sãng xuyªn t©m R(r):

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}\right]-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}R(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}R(r)=ER(r) \tag{16}$$

a/ XÐt tr¹ng th¸i liªn kÕt cña ®iÖn tö: E < 0

®Æt

$$\alpha^2=\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}$$

$$\lambda=\frac{2\mu Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\alpha\hbar^2}=\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\left(\frac{\mu}{2|E|}\right)^{1/2} \tag{17}$$

Thay r $\rightarrow$ ρ = αr (kh«ng thø nguyªn)

ViÕt l¹i (16)

$$\frac{d^2\widetilde{R}}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{d\widetilde{R}}{d\rho}+\left[\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\widetilde{R}=0 \qquad (18)$$

(18) tho¶ m·n ®iÒu kiÖn $\widetilde{R}(\rho)=R(\rho/\alpha)$ h÷u h¹n ë ρ = 0; giíi néi khi ρ → ∞ nÕu vµ chØ nÕu víi sè nguyªn l ®· cho:

$$\lambda - (l+1) = n_r \quad ; \qquad n_r = 0, 1, 2, \ldots$$

nghÜa lµ

$$\lambda = n = n_r + l + 1 \qquad (19)$$

N¨ng lîng gi¸n ®o¹n cã gi¸ trÞ

$$E_n = -\frac{\mu}{2\hbar^2 n^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \qquad (20)$$

E_n chØ phô thuéc n chø kh«ng phô thuéc n_r , l riªng rẽ.

n: sè lîng tö chÝnh, n = 1, 2, 3, …

Hµm sãng là tích của hàm cầu và hàm xuyên tâm,®-îc ®Æc tr-ng bëi ba sè l-îng tö n, l, m:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (21)$$

C¸c sè l-îng tö cña nguyªn tö hydro

Tªn	Ký hiÖu	C¸c gi¸ trÞ cho phÐp	Liªn quan víi	C¸c gi¸ trÞ kh¶ dÜ
Sè l-îng tö chÝnh	n	1, 2, 3, …	N¨ng l-îng E	∞
Sè l-îng tö quü ®¹o	l	0, 1, 2, …(n-1)	M«men quü ®¹o $\vec{L}$	n
Sè l-îng tö tõ	m	0, $\pm$1, $\pm$2, …$\pm l$	H×nh chiÕu m«men quü ®¹o L_z	(2l+1)

Sè tr¹ng th¸i cã cïng n lµ:

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2 \qquad (22)$$

Nghĩa là mức năng lượng En suy biến bội n^2 theo l và m.

-Suy biến theo l là đăc trưng của trường Coulomb.

-Suy biến theo m là hệ quả của tính đối xứng cầu của thế năng (trường xuyên tâm) En $\rightarrow$ Enl

b/ Xét tr¹ng th¸i E > 0:

Ph¬ng tr×nh (16) h÷u h¹n ë r $\rightarrow$ 0 vµ giíi néi ë r $\rightarrow \infty$ víi mäi E. Do đó phæ E liªn tôc.

2.3. Hàm sóng

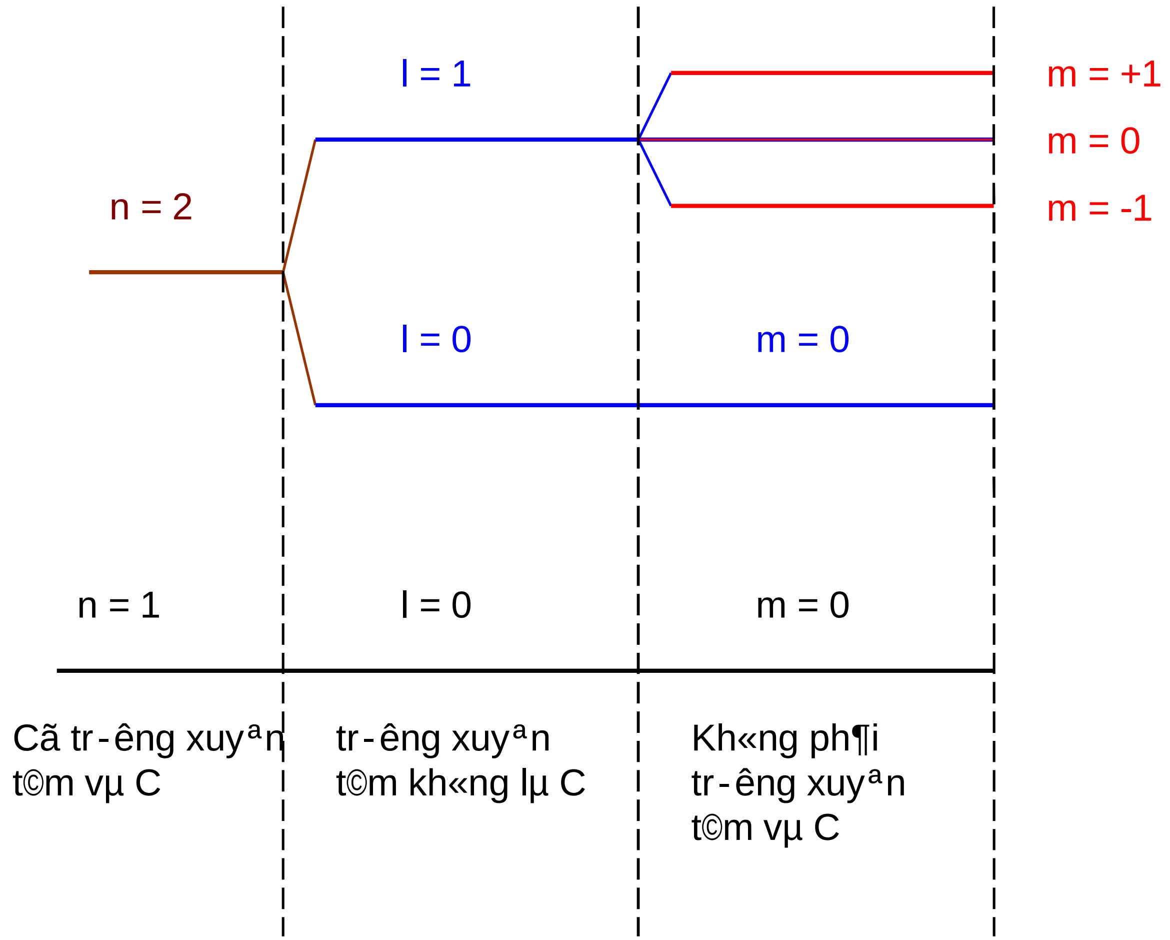
- Hµm sãng cña ®iÖn tö trong nguyªn tö hydro

$$\psi(\vec{r},t) = const\ .e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

TD: $R_{10}(r) = 2(z/a_B)^{3/2}\exp(-zr/a_B)$

~ Suy biÕn theo m lµ hÖ qu¶ cña tÝnh chÊt ®èi xøng cÇu cña tr-êng xuyªn t©m.

~ khi ®Æt vµo tõ tr-êng ngoµi , $E_n \rightarrow E_{nlm}$ (mÊt suy biÕn theo m).



VÊn ®Ò trao ®æi – Bµi tËp

1. §äc thªm quang phæ vµ sù ph©n bè ®iÖn tö quanh h¹t nh©n cña nguyªn tö hydro.
2. Sù ph©n bè ®iÖn tö vµ phæ n¨ng l-îng trong nguyªn tö hydro.
3. So s¸nh kÕt qua c¬ häc l-îng tö víi lý thuyÕt ch-a ®Çy ®ñ Bohr.
4. C¸c l-îng tö sè n, l, m..
5. Bµi tËp 2. 10, 2.11, 2.14, 2.18, 2.20, 2.21.

III. Dao ®éng tö ®iÒu hoµ

XÐt chuyÓn ®éng cña h¹t vi m« m, chuyÓn ®éng däc Ox, thÕ n¨ng

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 . \qquad (23)$$

Trong C¬ häc cæ ®iÓn h¹t nµy thùc hiÖn dao ®éng ®iÒu hoµ víi tÇn sè gãc

$$\omega = \sqrt{\frac{K}{m}} . \qquad (24)$$

Trong C¬ häc l-îng tö hÖ ®ã lµ dao ®éng tö ®iÒu hoµ.

Ph-¬ng tr×nh Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}Kx^2 \right]\psi(x) = E\psi(x) \qquad (25)$$

§Æt

$$\beta = \left(\frac{mK}{\hbar^2}\right)^{1/4} \; ; \; \tau = \frac{2E}{\hbar}\left(\frac{m}{K}\right)^{1/2} = \frac{2E}{\hbar\omega} \qquad (26)$$

vµ dïng

$$\xi = \beta x,$$

ta viÕt l¹i ph-¬ng tr×nh (25)

$$\frac{d^2\tilde{\psi}}{d\xi^2} + \left(\tau - \xi^2\right)\tilde{\psi} = 0. \qquad (27)$$

Hµm sãng $\tilde{\psi}(\xi) = \psi(\xi/\beta)$ giíi néi khi x$\rightarrow \pm\infty$ nÕu

$$\tau = 2n + 1 \qquad (28)$$

n = 0, 1, 2, 3, …

N¨ng l- îng E_n cña dao ®éng tö ®iÒu hoµ:

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega . \qquad (29)$$

víi n=0 $$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega > 0$$

lµ n¨ng l- îng thấp nhất của DĐTĐH- gọi là NL không.

Sự tồn tại năng lượng thấp nhất E_0 chỉ có thể lý giải trên cơ sở LTLT gắn với hệ thức bất định giữa toạ độ và xung lượng.

- Do gèc n¨ng l- îng cã thÓ ®- îc lùa chän mét c¸ch tuú ý, nªn cã thÓ quy - íc chän E_0 lµm gèc tÝnh n¨ng l- îng.

Khi ®ã, DĐTĐH chỉ có thể có năng lượng là bội số của năng lượng $\hbar\omega$

$$E_n = n\hbar\omega \qquad (30)$$

$\Rightarrow$ Gi¶ thuyÕt Planck: NL của 1 dđtđh bằng một bội số nguyên của lượng tử năng lượng $\hbar\omega$

Tãm t¾t

C¸c tr¹ng th¸i dõng cña DĐTĐH cã n¨ng l-îng gi¸n ®o¹n c¸ch ®Òu nhau $\hbar\omega$

$$E_n = n\hbar\omega \qquad E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$$

Nếu coi tr¹ng th¸i ψ_0 víi E_0 thÊp nhÊt- không chứa LTNL nào

Thì trạng thái ψ_1 víi $E_1 = E_0 + \hbar\omega$ là kết quả của việc thêm 1 LTNL vào trạng thái ψ_0. ψ_1 chứa 1 LTNL $\hbar\omega$

Trạng thái ψ_2 víi $E_2 = E_0 + 2\hbar\omega$ là kết quả của việc thêm 2 LTNL vào trạng thái ψ_0. ψ_2 chứa 2 LTNL. $\hbar\omega$

....Trạng thái ψ_n năng lượng $E_n = n\hbar\omega$ chứa n LTNL.

So s¸nh với CHCĐ: $E_{min} = 0$, hạt ko chuyển động ở phạm vi U>E (T<0)

Trong CHLT: $E_0 = \hbar\omega/2 \neq 0$, có xác suất tìm thấy hạt vi mô trong vùng E<U. Với NL En,có n điểm tại đó không tìm thấy hạt

Đó là ®Æc tr-ng quan träng cña h¹t vi m« - lµ kÕt qu¶ cña T/C sóng- hÖ thøc bÊt ®Þnh Heisenberg- T và U ko đo được chính xác một cách đồng thời.

VÊn ®Ò trao ®æi – Bµi tËp

1. §äc thªm chøng minh ®Ó ph¬ng tr×nh (27) cã nghiÖm giíi néi khi $x \rightarrow \pm\infty$, τ ph¶i tho¶ m·n (28).
2. Bµi tËp 2.13, 2.17.
3. Tìm phổ năng lượng của DĐTĐH bằng phương pháp đại số qua biểu diễn số hạt.

IV. §iÖn tö trong tr-êng tuÇn hoµn cña tinh thÓ

4.1.M¹ng Bravais và mạng đảo

- Tinh thÓ lµ vËt thÓ cã cÊu tróc bªn trong theo quy luËt: c¸c h¹t ph¶i tù s¾p xÕp ®Ó trªn kho¶ng rÊt réng cã trËt tù c¸ch nhau r_0.

  D¹ng chuyÓn ®éng duy nhÊt cña h¹t lµ dao ®éng quanh vÞ trÝ c©n b»ng.

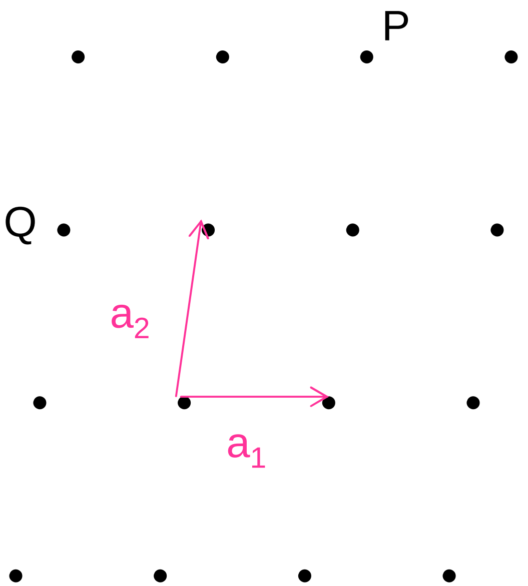
- PhÐp tÞnh tiÕn VR $T(\vec{R})$: $T(\vec{R}): \quad \vec{r} \to \vec{r} + \vec{R}$ víi mäi $\vec{r}$
- Tinh thÓ cã tÝnh bÊt biÕn (®èi xøng) ®èi víi phÐp tÞnh tiÕn $T(\vec{e}_\alpha), T(\vec{e}_\beta), T(\vec{e}_\gamma)$ theo trôc Ox, Oy, Oz nghÜa lµ mçi ng.t dêi ®Õn ng.t kh¸c cïng lo¹i-tt (v« h¹n) sang vÞ trÝ trïng khit vÞ trÝ cò

  Cã nhiÒu c¸ch chän h-íng, nãi chung kh«ng vu«ng gãc.

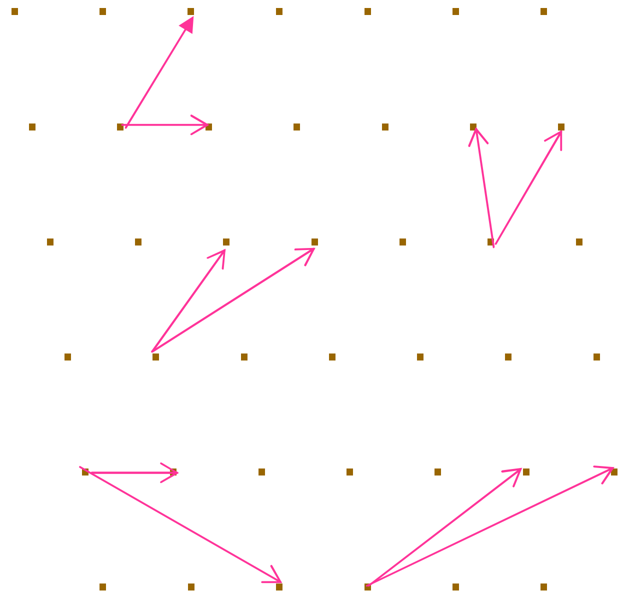
  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ lµ vect¬ ng¾n nhÊt theo mçi h-íng th×

$$\vec{e}_\alpha = n_1\vec{a}_1, \quad \vec{e}_\beta = n_2\vec{a}_2, \quad \vec{e}_\gamma = n_3\vec{a}_3$$

n_1, n_2, n_3 : sè nguyªn



H×nh 8.2



H×nh 8.3

Tinh thÓ bÊt biÕn $T(\vec{R})$ mµ

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \quad (31)$$

t¹o thµnh nhãm tÞnh tiÕn, víi quy t¾c nh©n sau:

$$T(\vec{R}_1)T(\vec{R}_2) = T(\vec{R}_1 + \vec{R}_2)$$

. M¹ng Bravais: tËp hîp c¸c ®iÓm $\vec{R}$ (31) t¹o thµnh m¹ng kh«ng gian – m¹ng B – 14 lo¹i m¹ng B

- Nót m¹ng : ®Çu mót vÐc t¬ $\vec{R}$
- Vect¬ c¬ së cña m¹ng B: $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$
- H»ng sè m¹ng: a_1, a_2, a_3
- « c¬ së lµ thÓ tÝch kh«ng gian mµ:

  * Khi thùc hiÖn mäi phÐp tÞnh tiÕn (31) thì tập hợp tất cả các ô thu được từ ô ban đầu sẽ lÊp ®Çy toµn bé kh«ng gian

  *Mỗi ô chỉ chứa 1 nút mạng

. « Wigner-Seitz: mét trong c¸c c¸ch chän « c¬ së næi tiÕng, cã ®Çy ®ñ tÝnh ®èi xøng cña mạng Bravais- gọi là ô cơ sở đxứng

MẠNG ĐẢO

- Xét các véc tơ **K** trong không gian véc tơ sóng thoả mãn đk:

$$e^{i\vec{R}\vec{K}} = 1 \qquad (32)$$

- Với mọi **R** xác định theo công thức

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$$

Điểm cuối của các véc tơ $\vec{K}$ như thế cũng t¹o thµnh m¹ng trong kh«ng gian vect¬ sãng - gọi là m¹ng ®¶o

$$\vec{K} = g_1\vec{b}_1 + g_2\vec{b}_2 + g_3\vec{b}_3 \qquad (33)$$

$$\vec{a}_i\vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij} \qquad (34)$$

- Ô Wigner của mạng đảo là vïng Brillonin thø nhÊt -Bằng cách tịnh tiên vùng 1.B các đoạn bằng véc tơ K của mạng sẽ thu được các vùng B bậc cao.

Thí dô	m¹ng B (thùc)	m¹ng ®¶o
H»ng sè m¹ng	a →	$b = \frac{2\pi}{a}$
ThÓ tích « c¬ së	υ →	$\frac{(2\pi)^3}{\upsilon}$

4.2.Hµm sãng cña ®iÖn tö trong tr-êng tuÇn hoµn

XÐt chuyÓn ®éng cña ®iÖn tö khối lượng m trong tr-êng thÕ V(r) kh«ng ®æi cña tinh thÓ tuÇn hoµn

- Ph-¬ng tr×nh Schrodinger

$$\left[-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \qquad (35)$$

Do tính tuần hoàn của tinh thể

$$V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r}) \qquad (36)$$

Làm phép thaythế: r bëi r +R

$$\left[-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}+V(\vec{r}+\vec{R})\right]\psi(\vec{r}+\vec{R})=E\psi(\vec{r}+\vec{R}) \tag{37}$$

Sö dông tÝnh tuÇn hoµn cña thÕ n¨ng (36) ta cã:

$$\left[-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}+V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}+\vec{R})=E\psi(\vec{r}+\vec{R}) \tag{38}$$

Tøc lµ 2 hµm sãng $\psi(\vec{r})$ vµ $\psi(\vec{r}+\vec{R})$ cïng tho¶ m·n mét ph¬ng tr×nh (35= 38). Có thể xảy ra 2 trường hợp.

a- Trêng hîp kh«ng suy biÕn: $\psi(\vec{r}+\vec{R})$ ph¶i tØ lÖ víi $\psi(\vec{r})$ Ta viÕt

$$\psi(\vec{r}+\vec{R})=e^{i\varphi(\vec{R})}\psi(\vec{r}) \tag{39}$$

Chän hÖ sè tØ lÖ d¹ng $e^{i\varphi(\vec{R})}$ với φ(**r**) là hàm thực của **r** v× :

$$T(\vec{R}_1)T(\vec{R}_2) \to e^{i\varphi(\vec{R}_1)}e^{i\varphi(\vec{R}_2)} = e^{i\varphi(\vec{R}_1+\vec{R}_2)} = T(\vec{R}_1+\vec{R}_2) \qquad (40)$$

$$\varphi(\vec{R}_1)\varphi(\vec{R}_2) = \varphi(\vec{R}_1+\vec{R}_2)$$

$\Rightarrow$ φ lµ hµm tuyÕn tÝnh cña $\vec{R}$ nghÜa lµ cã một véc tơ $\vec{k}$ mµ

$$\varphi(\vec{R}) = \vec{k}\vec{R} \qquad (41)$$

Thay vµo (39) nhËn ®îc d¹ng hµm sãng cña Ð trong tinh thÓ:

$$\psi(\vec{r}+\vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}}\psi(\vec{r}) \qquad (42)$$

Trêng hîp suy biÕn bội n, cïng một E cã n nghiÖm $\psi_i(\vec{r})$ ®éc lËp tuyÕn tÝnh

$$\left[-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}+V(\vec{r})\right]\psi_i(\vec{r}) = E\psi_i(\vec{r})\,, \quad i=1,2,...n$$

Do tính tuần hoàn của V nên Ψ_i (**r+R**) cũng thoả mãn PT tương tự

$$\left[-\frac{\hbar^2\vec\nabla^2}{2m}+V(\vec r)\right]\psi_i(\vec r+\vec R)=E\psi_i(\vec r+\vec R)\ ,\quad i=1,2,\ldots n \qquad (43)$$

Do ®ã mçi $\psi_i(\vec r+\vec R)$ lµ tæ hîp tuyÕn tÝnh cña n hàm $\psi_j(\vec r)$, j= 1, 2, …, n

$$\psi_i(\vec r+\vec R)=\sum_{j=1}^{n}C_{ij}(\vec R)\psi_j(\vec r)$$

cuèi cïng thu ®îc

$$\tilde\psi_i(\vec r+\vec R)=e^{i\vec k_i\vec R}\tilde\psi_i(\vec r) \qquad (44)$$

- ViÕt l¹i c¶ (42) vµ (44): $\psi_{kv}(\vec r+\vec R)=e^{i\vec k\vec R}\psi_{kv}(\vec r)$ (45)

Trong đó $\vec k$ biÕn ®æi ứng víi phÐp tþnh tiÕn. Víi mỗi gi¸ trþ $\vec k$ cã các $\psi_k(\vec r)$ kh¸c nhau được đánh số bởi chØ sè ν: $\psi_{k\nu}(\vec r)$

KL: HS của é trong trường V tuần hoàn luôn có thể chọn sao cho trong phép tịnh tiến các hàm này biến đổi theo (45).

§Æt

$$\boxed{\psi_{k\nu}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{k\nu}(\vec{r})} \qquad (46)$$

thay (46) vµo (45)

$$e^{i\vec{k}(\vec{r}+\vec{R})} u_{k\nu}(\vec{r}+\vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{k\nu}(\vec{r})$$

Suy ra hàm $u_{k\nu}$(**r**) phải là hàm tuần hoàn giống như thế năng.

§Þnh lý Bloch

$$\boxed{u_{k\nu}(\vec{r}+\vec{R}) = u_{k\nu}(\vec{r})} \qquad (47)$$

Trong c¸c phÐp tÞnh tiÕn $\vec{R}$ t¹o thµnh m¹ng B, $\psi_{k\nu}(\vec{r})$ cña ®iÖn tö trong trêng tuÇn hoµn biÕn ®æi theo ct (42), vµ do ®ã cã d¹ng (46), trong ®ã $u_{k\nu}(\vec{r})$ lµ c¸c hµm tuÇn hoµn m¹ng.

Véc tơ **k** ở (45) xác định sự biến đổi HS của é trong trường thế tuần hoàn với phép TT thuộc mạng B. Tích **p**=ħ**k** -chuẩn Xung Lượng của trạng thái có HS đó.

Hàm tuần hoàn $u_{k\nu}$(**r**) được gọi là hàm Bloch.

- TD: víi h¹t tù do V(r) = 0. HS là sóng phẳng $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}$

PT (46) tự động thoả mãn. Chuẩn XL chính là XL ħ**k** .
Nếu $\vec{K}$ là vect¬ bÊt kú của m¹ng ®¶o th× $e^{i\vec{K}\vec{R}} = 1$
Ta có:

$$e^{i\vec{k}\vec{R}} = e^{i\vec{k}\vec{R}} e^{i\vec{K}\vec{R}} = e^{i(\vec{k}+\vec{K})\vec{R}}$$

Hai véc tơ $\hbar\vec{k}$, $\hbar(\vec{k}+\vec{K})$ t-¬ng ®-¬ng nhau.(45) thoả mãn khi lấy CXL ħ**k** cũng đúng khi lấy CXL ħ(**k** + **K)** :

$$\psi_{kv}(\vec{r}+\vec{R}) = e^{i(\vec{k}+\vec{K})\vec{R}} \psi_{kv}(\vec{r})$$

Một HS có thể có vô số CXL tương đương nhau- ħ**k** là CXL.
Trong số các ħ**k** này có 1 gía trị ħ**k₀** mà **k₀** nằm trong vùng 1.B. Có thể chọn **k₀** lµm ®¹i diÖn cho tÊt c¶ các giá trị $\vec{k}_0 + \vec{K}$ tương đương nó. Véc tơ đại diện này được xác đinh đơn giá, trong vùng 1.B . Do quy ước này, có nhiêu HS khác nhau, với NL khác nhau nhưng cùng CXL. Nên đưa УĐánh sô các vùng NL cùng CXL : ΨУk(**r**) và EУ(**k**)

4.3. Vïng n¨ng l-îng (trong gần đúng liên kết mạnh)

- Xuất phát từ HS ®iÖn tö vµnh ngoµi của nguyªn tö riªng biÖt - liªn kÕt víi ion m¹ng- là φ(r).
- Khi t¹o thµnh tinh thÓ HS của các Đ ở vành ngoài các ng.t. lân cận phủ nhau. Thì HS của é liªn kÕt víi ion ë nót mạng R_i sẽ lµ $\varphi(\vec{r}-\vec{R}_i)$. Do HS bi phủ, các é có thể di chuyển,mà ko định xứ tại ng.t cố định nào: é bị tập thể hoá, HS của nó phải là tæ hîp tuyÕn tÝnh của các hàm này víi mäi nót m¹ng $R_{i,,}$ . . Ta lập tổ hợp tuyến tính:

$$\sum_{R_i} e^{i\vec{k}\vec{R}_i}\varphi(\vec{r}-\vec{R}_i)$$

víi k trongvïng 1.B, rồi chuÈn ho¸.

- Hµm sãng cña Đ cã ћk ®· tÊp thÓ ho¸- c¸c Đ l-u ®éng:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r})=\frac{\sum_{\vec{R}_i} e^{i\vec{k}\vec{R}_i}\varphi(\vec{r}-\vec{R}_i)}{\left[\int\left|\sum_{\vec{R}_i} e^{i\vec{k}\vec{R}_i}\varphi(\vec{r}-\vec{R}_i)\right|^2 dr\right]^{\frac{1}{2}}} \qquad (48)$$

Trong đó C(k) là hÖ sè chuÈn ho¸. Bình phương của nó là:

$$C(\vec{k})^2 = \int \Big| \sum_{\vec{R}_i} e^{i\vec{k}\vec{R}_i}\varphi(\vec{r}-\vec{R}_i) \Big|^2 d\vec{r} = \sum_{\vec{R}_i}\sum_{\vec{R}_j} e^{i\vec{k}(\vec{R}_i-\vec{R}_j)}\alpha(\vec{R}_i-\vec{R}_j) \quad (49)$$

$$\alpha(\vec{R}_i-\vec{R}_j) = \int \varphi(\vec{r}-\vec{R}_j)^*\varphi(\vec{r}-\vec{R}_i)d\vec{r} \quad (50)$$

- N¨ng l- îng cña Ð trong tinh thÓ lµ gi¸ trÞ TB cña Hamiltonian ë tr¹ng th¸i **Ψ$_{\mathbf{k}}$(r)**

$$E(\vec{k}) = \int \psi_{\vec{k}}(\vec{r})^*\left[-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m}+V(\vec{r})\right]\psi_{\vec{k}}(\vec{r})d\vec{r} \quad (51)$$

Sö dông (48) vµ (49) thu ®- îc

$$E(\vec{k}) = \frac{1}{C(\vec{k})^2}\sum_{\vec{R}_i}\sum_{\vec{R}_j} e^{i\vec{k}(\vec{R}_i-\vec{R}_j)}\varepsilon(\vec{R}_i-\vec{R}_j) \quad (52)$$

-

Trong ®ã

$$\varepsilon(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = \int \varphi(\vec{r} - \vec{R}_j)^* [-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r})] \varphi(\vec{r} - \vec{R}_i) d\vec{r} \qquad (53)$$

Gäi N lµ sè « c¬ së trong tinh thÓ – N rÊt lín, ta cã:

$$\sum_{\vec{R}_i} \sum_{\vec{R}_j} e^{i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \alpha(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = N \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} \alpha(\vec{R})$$

$$= \alpha(0) + N \sum_{\vec{R} \neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}} \alpha(\vec{R})$$

Nhí lµ

$$\alpha(0) = \int \varphi(\vec{r})^* \varphi(\vec{r}) d\vec{r} = 1 \qquad (54)$$

$$\sum_{\vec{R}_i}\sum_{\vec{R}_j} e^{i\vec{k}(\vec{R}_i-\vec{R}_j)}\varepsilon(\vec{R}_i-\vec{R}_j) = N\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}}\varepsilon(\vec{R})$$

$$= \varepsilon(0) + N\sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}}\varepsilon(\vec{R})$$

nhí r»ng

$$\varepsilon(0) = \overline{E} = \int \varphi(\vec{r})^*[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\vec{r})]\varphi(\vec{r})d\vec{r} \qquad (55)$$

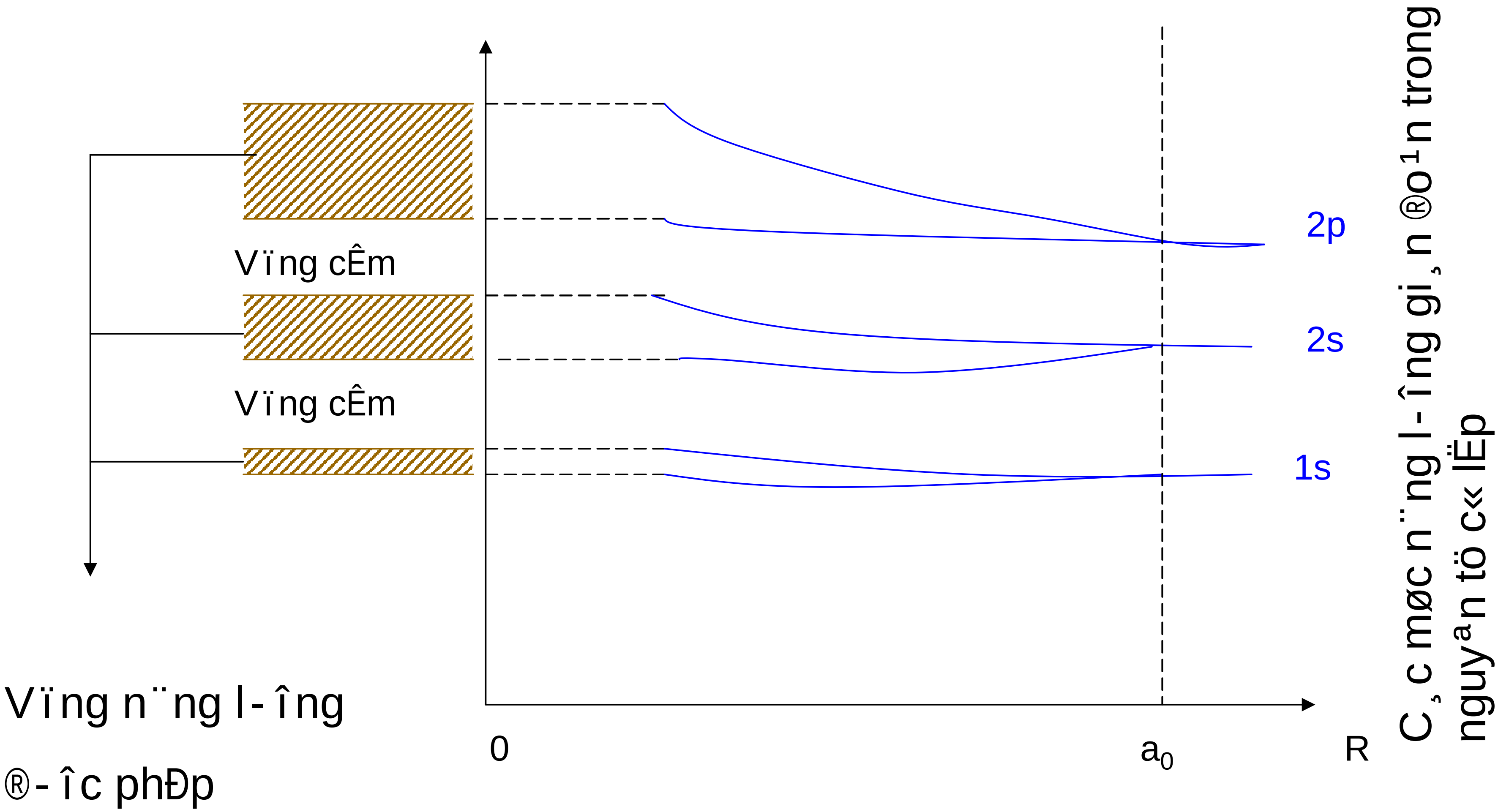
lµ n¨ng l-îng trung b×nh cña ®iÖn tö trong nguyªn tö c« lËp – khi ch-a t¹o thµnh tinh thÓ.

Cuèi cïng (52) cã d¹ng:

$$E(\vec{k}) = \frac{\bar{E} + N\sum\limits_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}}\varepsilon(\vec{R})}{1 + N\sum\limits_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}}\alpha(\vec{R})} \qquad (56)$$

- Khi $\vec{k}$ ↑↓ th× E ↑↓ tõ $E_{min} \rightarrow E_{max}$ gÇn $\bar{E}$
- NhËn xÐt:

- Khi t¹o thµnh tinh thÓ, cã sù phñ cña $\varphi(\vec{r} - \vec{R}_i)$, nhÊt lµ ®iÖn tö ë vµnh ngoµi. Mçi møc $\bar{E}$ (gi¸n ®o¹n) trong nguyªn tö riªng biÖt më réng thµnh vïng n¨ng lîng Emin → Emax gÇn $\bar{E}$, t¹o thµnh vïng NL ®îc phÐp, cã N møc con rÊt gÇn nhau.
- Khe n¨ng lîng – vïng cÊm
- Tr¹ng th¸i ®îc phÐp
- Theo chiÒu t¨ng E, bÒ réng vïng ®îc phÐp t¨ng, vïng cÊm gi¶m.


Vïng cÊm
Vïng cÊm
2p
2s
1s
0
a_0
R
Vïng n¨ng l-îng
®-îc phÐp
C¸c møc n¨ng l-îng gi¸n ®o¹n trong nguyªn tö c« lËp

H×nh 8.4

VÊn ®Ò trao ®æi – Bµi tËp

- Vïng n¨ng l-îng ®-îc phÐp – vïng cÊm – tr¹ng th¸i ®-îc phÐp $\psi_{nlms.}$.
- Thö tÝnh kho¶ng c¸ch gi÷a c¸c møc con trong vïng n¨ng l-îng ®-îc phÐp nÕu nång ®é nguyªn tö lµ $10^{28}m^{-3}$, bÒ réng n¨ng l-îng lµ 1 eV.

4.4. Dao ®éng m¹ng tinh thÓ

chuçi nguyªn tö cùng lo¹i

- Täa ®é nguyªn tö thø n : x_n = na, a lµ h»ng sè m¹ng
- §é dÞch chuyÓn: $u_n(t) = u(x_n,t)$
- GT: t-¬ng t¸c chØ cã 2 nguyªn tö gÇn nhau: n vµ n+1
- ThÕ n¨ng t-¬ng t¸c ~ $u_n(t) - u_{n+1}(t)$
- ThÕ n¨ng toµn phÇn của hệ, với α là hệ số tỉ lệ là

$$U = \frac{\alpha}{2}\sum_n |u_n(t) - u_{n+1}(t)|^2 \qquad (57)$$

- §éng n¨ng toµn phÇn

$$T = \frac{M}{2}\sum_n \left[\frac{du_n(t)}{dt}\right]^2 \qquad (58)$$

- Lùc t¸c dông lªn nguyªn tö n là

$$F_n = -\frac{\partial U}{\partial u_n} = -\alpha[2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}]$$

mÆt kh¸c

$$F_n = M\,\frac{d^2u_n(t)}{dt^2}$$

Suy ra hÖ ph-¬ng tr×nh chuyÓn ®éng

$$\frac{d^2u_n(t)}{dt^2} + \frac{\alpha}{M}[2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}] = 0 \qquad (59)$$

xÐt nghiÖm d-íi d¹ng sãng ®¬n s¾c với A ≠ 0

$$u_n = u(x_n, t) = Ae^{i[kx_n - \omega(k)t]} \qquad (60)$$

Thay vµo (59) thu ®-îc

$$\omega(k)^2 = \frac{2\alpha}{M}(1-\cos ka) = \frac{4\alpha}{M}\sin^2\frac{ka}{2}$$ (ɩ9)

nghÜa lµ

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\alpha}{M}}\,\left|\,\sin\frac{ka}{2}\,\right|$$ (61)

®-êng cong t¸n s¾c (61) phụ thuộc không tuyến tính vào k, giống như hiện tượng tán sắc trong quang học. Nó cã cùc ®¹i $\omega_{\max} = 2\sqrt{\alpha/M}$ t¹i k= π/a, phô thuéc h»ng sè lùc α, khèi l-îng nguyªn tö M. Bước sóng tối thiểu λ_{min} = 2a lµ ®Æc tr-ng riªng cña hÖ dao ®éng gi¸n ®o¹n.

Chỉ khi k rất bé, ka <<1 , ta có sự phụ thuộc tt vào k của tần số. Thật vậy, lúc này:

th×

$$\sin\frac{ka}{2} \approx \frac{ka}{2}$$

$$\omega(k) \approx ka\sqrt{\frac{\alpha}{M}}$$

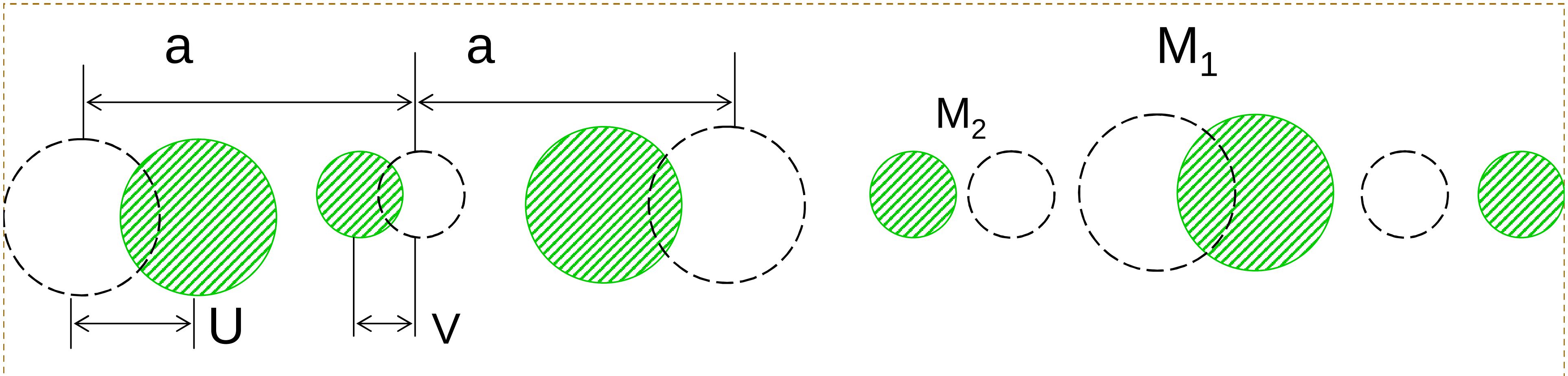
lóc nµy lời giải có dạng sóng truyền với tốc độ υ không phụ thuộc véc tơ sóng k

$$u(x_n, t) = Ae^{ik(x_n - \upsilon t)} \quad \text{với} \quad \upsilon = a\sqrt{\frac{\alpha}{M}} = \text{const}$$

dao động mạng tinh thể trùng với sóng âm với v là tốc độ truyền âm$\rightarrow$ các dao ®éng (60) tần số ω(k) tho¶ m·n (61) gäi lµ dao ®éng ©m.

chuçi hai lo¹i nguyªn tö kh¸c nhau

- Hai lo¹i M_1 , M_2 xếp xen kẽ c¸ch nhau a, h»ng sè m¹ng 2a, mỗi ô cơ sở chứa 2 ng.t
- M_1 ®é dêi $u_{2n}(t)$; M_2 ®é dêi $v_{2n+1}(t)$



H×nh 8.7

- HÖ 2 ph-¬ng tr×nh chuyÓn ®éng

$$M_1 \frac{d^2 u_{2n}}{dt^2} + \alpha(2u_{2n} - \upsilon_{2n+1} - \upsilon_{2n-1}) = 0$$

$$M_2 \frac{d^2 \upsilon_{2n+1}}{dt^2} + \alpha(2\upsilon_{2n+1} - u_{2n+2} - u_{2n}) = 0 \qquad (62)$$

NghiÖm ph-¬ng tr×nh (62) dưới dạng sóng đơn sắc

$$u_{2n}(t) = u(x_{2n}, t) = Ae^{i[kx_{2n} - \omega(k)t]}$$

$$\upsilon_{2n+1} = \upsilon(x_{2n+1}, t) = Be^{i[kx_{2n+1} - \omega(k)t]} \tag{63}$$

Thay vµo hÖ (62) với A, B ko đồng thời bằng 0, được PT đại số với 2 biến A,B

$$[2\alpha - M_1\,\omega(k)^2]A - 2\alpha\cos ka\, B = 0$$

$$[2\alpha - M_2\,\omega(k)^2]B - 2\alpha\cos ka\, A = 0 \tag{64}$$

§Þnh thøc cña hÖ (64) ph¶i b»ng kh«ng để tồn tại lời giải không tầm thường

$$\begin{vmatrix} 2\alpha - M_1\omega(k)^2 & -2\alpha\cos ka \\ -2\alpha\cos ka & 2\alpha - M_2\omega(k)^2 \end{vmatrix} = 0$$

nghÜa lµ

$$[2\alpha - M_1\,\omega(k)^2][2\alpha - M_2\,\omega(k)^2] - 4\alpha^2\cos^2 ka = 0 \qquad (65)$$

Ph¬ng tr×nh cã 2 lêi gi¶i đối với $\omega(k)^2$

$$\omega_0(k)^2 = \alpha\left\{\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)+\left[\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)^2-\frac{4}{M_1M_2}\sin^2 ka\right]^{\frac{1}{2}}\right\} \qquad (66)$$

$$\omega_A(k)^2 = \alpha\left\{\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)-\left[\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)^2-\frac{4}{M_1M_2}\sin^2 ka\right]^{\frac{1}{2}}\right\} \qquad (67)$$

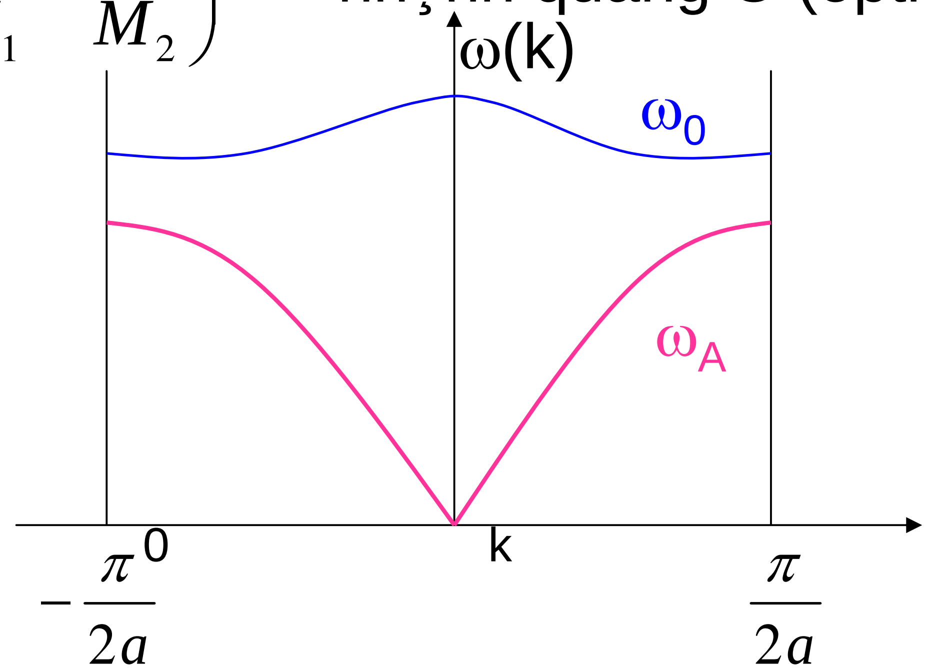
- V í i ka<<1 (k rất bé).

Nhánh trên, $\omega_A(k)$ phụ thuộc tuyến tính vào k giống sóng âm. Nhánh dưới $\omega_o(k)$ không phụ thuộc k, tương tác với As mạnh hơn sóng âm.

$$\omega_A(k) \approx ka\sqrt{\frac{2\alpha}{M_1+M_2}}$$ nh¸nh ©m A (acoustic)

$$\omega_O(k) \approx \sqrt{2\alpha\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)}$$ nh¸nh quang O (optical)

TÇn sè cÊm t¹i $k = \dfrac{\pi}{2a}$



H×nh 8.8

Phonon

N¨ng l-îng cña dao ®éng tö ®iÒu hoµ tÇn sè ω lµ: En=ħω

Phæ n¨ng l-îng E_n cña dao ®éng tö ®iÒu hoµ gåm c¸c møc gi¸n ®o¹n, c¸ch ®Òu nhau $\hbar\omega$

Coi c¸c tr¹ng th¸i dao ®éng kh¸c nhau cña m¹ng tinh thÓ víi n¨ng l-îng $\hbar\omega$, xung l-îng $\hbar\vec{k}$ nh- hÖ c¸c chuẩn h¹t có năng lượng $\hbar\omega$, gọi là - phonon

Phonon lµ phÇn n¨ng l-îng nhá nhÊt mµ m¹ng hÊp thô hay ph¸t x¹ trong dao ®éng nhiÖt (l-îng tö n¨ng l-îng cña dao ®éng m¹ng).

Trạng thái dao động LT của chuỗi 2 ng.t khác loại có thể xem như 1 hệ nhiều hạt gồm 2 loại hạt chuẩn khác nhau.

Hạt chuẩn thứ nhất có NL $\hbar\omega_1(k)$ với $\omega_1(k) = \omega_A(k)$- phonon âm. Hạt chuẩn thứ hai có NL $\hbar\omega_2(k)$ với $\omega_2(k) = \omega_o(k)$- phonon quang.

$$\varepsilon_{ph} = \hbar\omega = h\nu$$

$$p_{ph} = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$

- Photon : l- î ng tö n¨ng l- î ng cña dao ®éng ®iÖn tõ

$$\varepsilon = \hbar\omega = h\nu$$

$$p = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

- Phonon, photon theo hµm ph©n bè Bose-Einstein

$$f(E) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}$$

CHƯƠNG V
LÝ THUYẾT NHIỄU LOẠN

Bµi to¸n: t×m $\psi(\vec{r})$ vµ E ë tr¹ng th¸i dõng cña h¹t vi m«.
Gi¶i ph-¬ng tr×nh Schrodinger dõng

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad (1)$$

Do $V(\vec{r})$ phøc t¹p $\rightarrow$ kh«ng thÓ gi¶i chÝnh x¸c (1).
NÕu

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1 \qquad (2)$$

Trong đó: $\hat{H}_0$ mà ta có thể gi¶i chÝnh x¸c ψ_0 , E_0 . Còn $\hat{H}_1$ là toán tử nào đó và λ là 1 hg số đủ nhỏ để có thể bỏ qua các số hạng chứa luỹ thừa bậc cao $\Rightarrow$ $\lambda\hat{H}_1$ nhiÔu lo¹n nhá so víi
$\Rightarrow$ áp dụng lý thuyÕt nhiÔu lo¹n ®Ó gi¶i E vµ $\psi(\vec{r})$

I. Sù xª dÞch của c¸c møc n¨ng l-îng gi¸n ®o¹n

Tr-êng hîp $\hat{H}_0$ cã phæ $E_n^{(0)}$ gi¸n ®o¹n

$$\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)} \tag{3}$$

Có thể khiển khai HS $\psi(\vec{r})$ ph¶i t×m d-íi d¹ng:

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n^{(0)} \tag{4}$$

$\rightarrow$ t×m c_n tøc lµ t×m ψ.

$\rightarrow$Thay (4) $\rightarrow$ (1); dïng (2), nh©n tr¸i $\psi_m^{(0)*}$ råi lÊy $\int ...dr$ ®-îc

$$(E - E_m^{(0)})c_m = \lambda \sum_n \left\langle m \middle| \hat{H}_1 \middle| n \right\rangle c_n \tag{5}$$

trong ®ã

$$\left\langle m \middle| \hat{H}_1 \middle| n \right\rangle = \left\langle \psi_m^0 \middle| \hat{H}_1 \middle| \psi_n^0 \right\rangle = \left\langle \psi_m^0 \middle| \hat{H}_1 \psi_n^0 \right\rangle \tag{6}$$

T×m c_n vµ E d-íi d¹ng chuçi luü thõa

$$c_n = c_n^{(0)} + \lambda c_n^{(1)} + \lambda^2 c_n^{(2)} + \cdots \qquad (7)$$

$$E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \cdots \qquad (8)$$

Thay vµo (5), s¾p xÕp l¹i ta cã

$$(E^{(0)} - E_m^{(0)})c_m^{(0)} = 0 \qquad (9a)$$

$$E^{(1)}c_m^{(0)} + (E^{(0)} - E_m^{(0)})c_m^{(1)} = \sum_n \left\langle m \middle| \hat{H}_1 \middle| n \right\rangle c_n^{(0)} \qquad (9b)$$

$$E^{(2)}c_m^{(0)} + E^{(1)}c_m^{(1)} + (E^{(0)} - E_m^{(0)})c_m^{(2)} = \sum_n \left\langle m \middle| \hat{H}_1 \middle| n \right\rangle c_n^{(1)} \qquad (9c)$$

+ Gi¶ sö $E_l^{(0)}$ kh«ng suy biÕn $\rightarrow$ cã 1 $\psi_l^{(0)}$ t-¬ng øng.

• T×m d¹ng ψ cã tÝnh chÊt: khi $\lambda \to 0$ (kh«ng cã nhiÔu lo¹n)th× $\psi \to \psi_l^{(0)}$ cã nghÜa lµ

$$c_m^{(0)} = \delta_{ml} \qquad \text{(=1 khi m=l)} \qquad (10)$$

-Tõ (9a), khi m=l $\to$ $$E^{(0)} = E_l^{(0)} \qquad (11)$$

Tøc lµ, trong gÇn ®óng bËc kh«ng- kh«ng cã nhiÔu lo¹n:

$$E = E^{(0)} = E_l^{(0)}$$

$$c_m^{(0)} = 1 \to \psi = \psi_n^{(0)}$$

-Tõ (9b), thay $c_m^{(0)} = \delta_{ml}$, $E^{(0)} = E_l^{(0)}$ ta cã:

$$E^{(1)}\delta_{lm} + (E_l^{(0)} - E_m^{(0)})c_m^{(1)} = \left\langle m \middle| \hat{H}_1 \middle| l \right\rangle \qquad (12)$$

-víi l = m th× (12) trë thµnh

$$E^{(1)} = \left\langle l \middle| \hat{H}_1 \middle| l \right\rangle$$

®Æt vµo (8) ta cã:

$$E_l = E_l^{(0)} + \Delta E_l \qquad (13)$$

$$\Delta E_l = \lambda \left\langle l \middle| \hat{H}_1 \middle| l \right\rangle \qquad (14)$$

Trong phÐp gÇn ®óng cÊp 1 theo λ: møc $E_l^{(0)}$ bÞ xª dÞch tõ $E_l^{(0)}$ ®Õn E_l do nhiÔu lo¹n $\lambda \hat{H}_1$

- Víi l $\neq$ m th× (12) trë thµnh

$$(E_l^{(0)} - E_m^{(0)}) c_m^{(1)} = \left\langle m \middle| \hat{H}_1 \middle| l \right\rangle$$

suy ra

$$c_m^{(1)} = \frac{\left\langle m \middle| \hat{H}_1 \middle| l \right\rangle}{E_l^{(0)} - E_m^{(0)}} \qquad (15)$$

Hµm sãng trong phép gđ bậc 1 theo λ

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n^{(0)} = c_n^{(0)} \psi_n^{(0)} + c_n^{(1)} \psi_n^{(0)}$$

$$\psi_l = \psi_l^{(0)} + \lambda \sum_{l \neq m} \frac{\int \psi_m^{(0)^*} \hat{H}_1 \psi_l^{(0)} d\vec{r}}{E_l^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_l^{(0)}$$

TiÕp tôc, dïng (15) thay vµo (9c) tÝnh $c_m^{(2)}$®îc $E^{(2)}$ trong gÇn ®óng cÊp 2 theo λ, khi l=m ta thu được :

$$E^{(2)} = E_l^{(2)} = \sum_{n \neq l} \frac{\left\langle l \middle| \hat{H}_1 \middle| n \right\rangle \left\langle n \middle| \hat{H}_1 \middle| l \right\rangle}{E_l^{(0)} - E_n^{(0)}} \qquad (16)$$

$\Rightarrow$(15) vµ (16) chØ ¸p dông ®-îc khi $E_l^{(0)} \neq E_m^{(0)}$ víi mäi m$\neq$ l tøc $E_l^{(0)}$ kh«ng suy biÕn.

+ Tr-êng hîp $E_l^{(0)}$ suy biÕn:

Víi 1 gi¸ trÞ $E_l^{(0)}$ cña $\hat{H}_0$ cã s hµm sãng $\psi_m^{(0)}$ víi m=$l_1, l_2, \ldots l_s$ (s$\geq$2). Lóc nµy cã thÓ cã s hÖ sè $c_m^{(0)}$ víi m= $l_1, l_2, \ldots l_s$

víi m thuéc $l_1, l_2, \ldots l_s$ th× $c_m^{(0)} \neq 0$ (17)

víi m kh«ng thuéc $l_1, l_2, \ldots l_s$ th× c^0_m =0.

Tõ (9b) cã s ph-¬ng tr×nh ®Ó x¸c ®Þnh c¸c hÖ sè c $_m^{(0)}$ lµ:

$$\sum_{m \in \{l_1, l_2 \ldots l_s\}} \left\langle l \middle| \hat{H}_1 \middle| m \right\rangle c_m^{(0)} = E^{(1)} c_l^{(0)} \qquad (18)$$

$$\Rightarrow \det\left(\left\langle l \middle| \hat{H}_1 \middle| m \right\rangle - \delta_{lm} E^{(1)} \right) = 0 \qquad (19)$$

$\rightarrow$ s nghiÖm $E^{(1)}$, x¸c ®Þnh sù xª dÞch cña s møc suy biÕn $E_l^{(0)}$ cã gi¸ trÞ kh¸c nhau $\Rightarrow$ nhiÔu lo¹n $\lambda\hat{H}_1$ lµm mÊt/gi¶m suy biÕn mét phÇn.

• Tãm l¹i: nhiÔu lo¹n $\lambda \hat{H}_1$ ®· g©y ra:

$\Rightarrow$ xª dþch møc n¨ng l-îng. Trong gđ bậc 1 đó là

$$E_l^{(0)} \rightarrow E_l = E_l^{(0)} + \Delta E_l$$

$$(E_l^{(0)} \neq E_m^{(0)}) \qquad \Delta E_l = \lambda \left\langle l \middle| \hat{H}_1 \middle| l \right\rangle = \lambda E^{(1)}$$

$$\psi_l^{(0)} \rightarrow \psi_l = \psi_l^{(0)} + \lambda \sum \frac{\left\langle m \middle| \hat{H}_1 \middle| l \right\rangle}{E_l^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_l^{(0)}$$

$\Rightarrow$ mÊt suy biÕn/gi¶m suy biÕn 1 phÇn (khi $E_l^{(0)}$ suy biÕn)

$$E_l^{(0)} \rightarrow E_l = E_l^{(0)} + \lambda E_1$$

E_1 cã s gi¸ trþ kh¸c nhau- tách thành s mức

øng s hµm sãng $\longleftrightarrow$ s mức NL có gi¸ trþ $E_{l\alpha} = E_l^0 + \lambda E_{l\alpha}^1$

II. Phæ n¨ng l- î ng cña ®iÖn tö **gần tự do** - Sù phô thuéc n¨ng l- î ng vµo vÐct¬ sãng k

Hamiltonian

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r}) \qquad (20)$$

Trong đó thế tuần hoàn $V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r})$ (21)

Với mọi $\vec{R}$ cã ®iÓm ®Çu, cuèi ë 2 nót bÊt kú m¹ng B.

$V(\vec{r})$ lµ nhiÔu lo¹n nhá $\rightarrow$ sö dông lý thuyÕt nhiÔu lo¹n. Ở dưới đây, ltnl thường gọi là phép gần đúng điện tử gần tự do.

a) V í i ®iÖn tö tù do: trong phÐp gÇn ®óng bËc kh«ng- kh«ng bþ nhiÔu lo¹n ≡ ®iÖn tö tù do : $V(\vec{r}) = 0$

$$\hat{\mathrm{H}} = \hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m} \qquad (22)$$

mµ hàm riêng $\psi_k^{(0)}(\vec r) = e^{i\vec k\vec r}$ (23)

lµ sãng ph¼ng ®¬n s¾c diÔn t¶ tr¹ng th¸i ®iÖn tö cã xung l- îng $\vec p = \hbar\vec k$

vµ n¨ng l- îng xác định với mọi véc tơ sóng $\vec k$

$$E^{(0)}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (24)$$

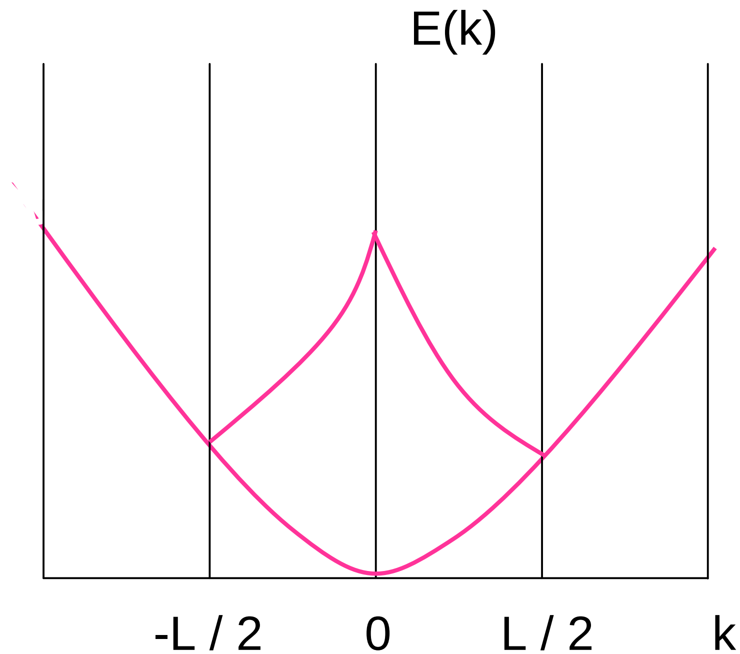
b) Xét sự thay đổi phổ NL của é tự do trong trường tinh thể V(**r**)
Xét các sóng phẳng với véc tơ sóng $\vec k_\nu = \vec k_0 + \vec K_\nu\ , \quad \nu = 1,2,...$

Trong đó $\mathbf{k_0}$ nằm trong vùng 1.B, các **k**ν là các véc tơ mạng đảo. Đây là các trạng thái khác nhau với NLkhácnhau,nhưng cïng CXL $\hbar\mathbf{k}_0$. §-a vµo c¸c ký hiÖu mới $\vec p = \hbar\vec k$

$$E_\nu^0(\vec k_0) = E^0(\vec k_0 + \vec K_\nu) = \frac{\hbar^2(\vec k_0 + \vec K_\nu)^2}{2m} \qquad (25)$$

$$\psi_{\vec k_0\nu}^0(\vec r) = \psi_{\vec k_0 + \vec K_\nu}^0(\vec r) = e^{i(\vec k_0 + \vec K_\nu)\vec r} \qquad (26)$$

Nghĩa là, một HS $\psi_k^{(0)}$ vµ một NL $E_k^{(0)}$ với $\vec{k}$ bÊt kú bây giờ đã được thay bằng nhiều vùng NL $E_{k_0\nu}^0$ và nhiều HS $\psi_{k_0\nu}^0$ cùng CXL $\hbar\vec{k}_0$ với $\vec{k}_0$ n»m trong 1.B



H×nh 9.1.

c)

c) Thiết lập t/c tổng quát của phæ NL E(k) cña é trong trêng tuần hoàn. Sự xuất hiện vïng cÊm.

Xuất phát PTSchrodinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2+V(\vec{r})\right]\psi_{\vec{k}}\left(\vec{r}\right)=E(\vec{k})\psi_{\vec{k}}\left(\vec{r}\right) \qquad (27)$$

Gỉa thiết $V(\vec{r})$ yÕu: bá qua c¸c sè h¹ng bËc cao theo V(r) so với các số hạng bậc thấp.

Nhớ là khi V(**r**) = 0, é chuyển động tự do, HS có dạng sóng phẳng với NL

$$\psi_k(\vec{r}) \approx \psi_k^{(0)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \qquad (28)$$

$$E(\vec{k}) \approx E^{(0)}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (29)$$

Trong trêng tuÇn hoµn tinh thÓ, theo định lý Bloch HS $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ phải có dạng

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_k(\vec{r})$$

trong ®ã $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ lµ hµm tuÇn hoµn, do ®ã cã thÓ triÓn khai thành chuỗi Fourier như sau:

$$u_k(\vec{r}) = \sum_{K} e^{i\vec{K}\vec{r}} \varphi_k(\vec{K})$$

víi $\vec{K}$: vect¬ m¹ng ®¶o

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} e^{i(\vec{k}+\vec{K})\vec{r}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{K}) \qquad (30)$$

T×m $\varphi_{\vec{k}}(\vec{K})$ theo $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$

$$\int_{\upsilon} e^{-i(\vec{k}+\vec{L})\vec{r}} \psi_k(\vec{r}) d\vec{r} = \int_{\upsilon} e^{-i(\vec{k}+\vec{L})\vec{r}} \sum_{\vec{K}} e^{i(\vec{k}+\vec{K})\vec{r}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{K}) d\vec{r}$$

« c¬ së

$$= \upsilon . \varphi_{\vec{k}}(\vec{L})$$

Suy ra

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{L}) = \frac{1}{\upsilon}\int_{\upsilon} e^{-i(\vec{k}+\vec{L})\vec{r}}\psi_k(\vec{r})d\vec{r} \qquad (31)$$

Gi¶i (27), biÕn ®æi (27) vÒ d¹ng hÖ c¸c ph-¬ng tr×nh ®¹i sè víi

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{K})$$

$$\int_{\upsilon} e^{-i(\vec{k}+\vec{L})\vec{r}} * PT(27)d\vec{r}$$

sè h¹ng ®éng n¨ng

$$\int_{\upsilon} e^{-i(\vec{k}+\vec{L})\vec{r}}\sum_{\vec{K}}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)e^{i(\vec{k}+\vec{K})\vec{r}}\varphi_k(\vec{K})d\vec{r} =$$

$$= \int_{\upsilon} e^{-i(\vec{k}+\vec{L})\vec{r}}\sum_{\vec{K}}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}+\vec{K})^2\right]e^{i(\vec{k}+\vec{K})\vec{r}}\varphi_k(\vec{K})d\vec{r}$$

$$= \int_{\upsilon} e^{-i(\vec{k}+\vec{L})\vec{r}}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(k+L)^2\right]e^{i(\vec{k}+\vec{L})\vec{r}}\varphi_k(\vec{L})d\vec{r} = E^0(k+L)\varphi_{\vec{k}}(\vec{L})$$

sè h¹ng thÕ n¨ng

$$\int_{\upsilon} e^{-i(\vec{k}+\vec{L})\vec{r}} \sum_{\vec{K}} V(\vec{r}) e^{i(\vec{k}+\vec{K})\vec{r}} \varphi_k(\vec{K}) d\vec{r} =$$

$$= \sum_{\vec{K}} \int_{\upsilon} e^{-i(\vec{k}+\vec{L})\vec{r}} e^{i(\vec{k}+\vec{K})\vec{r}} V(\vec{r}) \varphi_k(\vec{K}) d\vec{r}$$

$$= \sum_{\vec{K}} \int_{\upsilon} e^{-i(\vec{L}-\vec{K})\vec{r}} V(r) d\vec{r}\, \varphi_k(\vec{K}) = \sum_{\vec{K}} \tilde{V}(\vec{L}-\vec{K}) \varphi_k(\vec{K})$$

sè h¹ng n¨ng l-îng toµn phÇn

$$\int_{\upsilon} e^{-i(\vec{k}+\vec{L})\vec{r}} \sum_{\vec{K}} E(\vec{k}) e^{i(\vec{k}+\vec{K})\vec{r}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{K}) d\vec{r} = E(\vec{k}) \varphi_k(\vec{L})$$

cuèi cïng ph-¬ng tr×nh ®¹i sè cho $\varphi_{\vec{k}}(\vec{K})$

$$[E(\vec{k}) - E^0(\vec{k}+\vec{L})] \varphi_{\vec{k}}(\vec{L}) = \sum_{\vec{K}} \tilde{V}(\vec{L}-\vec{K}) \varphi_{\vec{k}}(\vec{K}) \qquad (32)$$

vii

$$\tilde{V}(\vec{K}) = \frac{1}{v}\int_{\upsilon} e^{-i\vec{K}\vec{r}} V(\vec{r})d\vec{r} \qquad (33)$$

Gi¶i hÖ (32) ®Ó t×m $E(\vec{k})$. Khi V(r)= 0, PT (32) trở thành:

$$[E^{(0)}(k) - E^{(0)}(k+L)]\ \varphi_k(L) = 0$$

Từ đây, và (30) suy ra : $\varphi_k(0) = 1$ và $\varphi k(L\neq0) = 0$

Khi V(r) là nhiễu loạn bé, các hệ số $\varphi_k(0)$ sẽ khác 1 chút ít, còn $\varphi_k(L\neq0)$ là các đại lượng nhỏ ≠0.

NL của é sẽ là: $E(k) = E^{(0)}(k) + E^{(1)}(k) + E^{(2)}(k) + \ldots$

Với $E^{(n)}(k)$ là bổ chính cỡ V^n. Tuy nhiên, khi k= - K/2 thì $\varphi_k(K\neq0)$ và $E^{(2)}(k)$ mất ý nghĩa bổ chính, nên ko dùng ltnloạn được- phải xét một cách riêng biệt. Giả sử K = L, là 1 véc tơ mạng đảo cho trước. Xét các véctơ **k** thoả mãn đk $E^{(0)}(k) - E^{(0)}(k+L) = 0$ (33b)

Khi đó trong PT(32) chỉ có 2 hệ số $\varphi_k(0)$ và $\varphi_k(L)$ là cho đóng góp đáng kể, còn tất cả các hệ số khác với K ≠0, L đều có thể bỏ qua, và ta chỉ cần xét 2 PT:

L x¸c ®Þnh: $$[E(\vec{k}) - E^0(\vec{k}+\vec{L}) - \tilde{V}(0)]\varphi_{\vec{k}}(\vec{L}) - \tilde{V}(\vec{L})\,\varphi_{\vec{k}}(0) = 0$$

L=0: $$[E(\vec{k}) - E^0(\vec{k}) - \tilde{V}(0)]\varphi_{\vec{k}}(0) - \tilde{V}(-\vec{L})\,\varphi_{\vec{k}}(\vec{L}) = 0 \qquad (34)$$

Vì $V(\vec{r})$ thùc $\rightarrow$ $\tilde{V}(-\vec{L}) = \tilde{V}(\vec{L})^*$

(34) cã E(k) $\neq$ 0 khi

$$[E(\vec{k}) - E^0(\vec{k}+\vec{L}) - \tilde{V}(0)][E(\vec{k}) - E^0(\vec{k}) - \tilde{V}(0)] - |\tilde{V}(\vec{L})|^2 = 0 \qquad (35)$$

Có 2 hàm E±(**k**) thoả mãn đk này:

$$E_\pm(\mathbf{k}) = E^{(0)}(\mathbf{k}) + \tilde{E}_\pm(\mathbf{k}) \qquad (36)$$

$$\tilde{E}_\pm(\vec{k}) = \frac{E^0(\vec{k}) + E^0(\vec{k}+\vec{L})}{2} + \tilde{V}(0) \pm \left\{ \left[\frac{E^0(\vec{k}) - E^0(\vec{k}+\vec{L})}{2} \right]^2 + \left| \tilde{V}(\vec{L}) \right|^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \qquad (37)$$

Tóm lại, phổ NL của é do t/d của trường V(r) yếu bị thay đổi so với é tự do. Với **k** ko thoả mãn (33b): phổ NL chỉ bị dịch một lượng nhỏ E±(**k**) = E$^{(0)}$ (**k**) + V(0). Với **k** thoả mãn (33b): phổ NL xác định theo (36). Vùng NL ở trên E_+(**k**) và vùng NL ở dưới E_-(**k**).Sự xuất hiên 2 vùng NL này tương tự sự tách mức NL dưới t/d của nhiễu loạn. Hiệu số giữa 2 giá trị NL là:

$$\Delta E(\vec{k}) = E_+(\vec{k}) - E_-(\vec{k}) = \{[E^0(\vec{k}) - E^0(\vec{k}+\vec{L})]^2 + 4|\tilde{V}(L)|^2\}^{1/2}$$

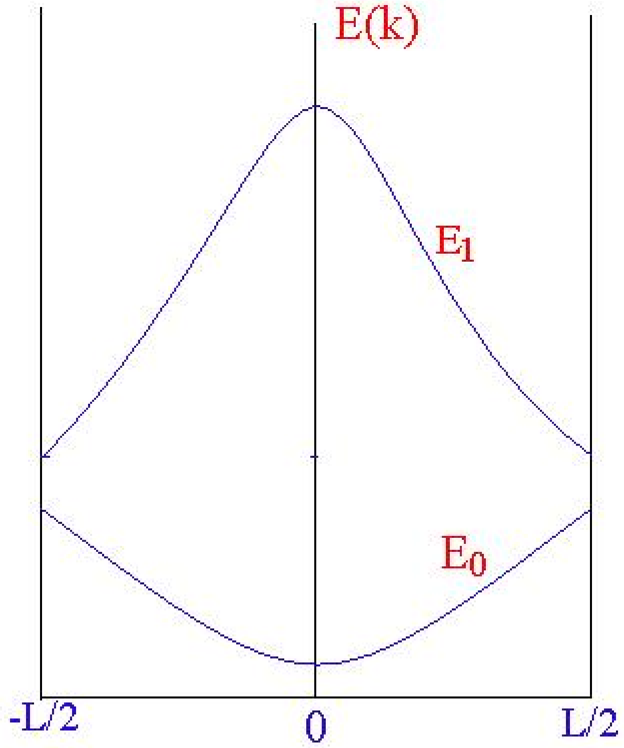
- xÐt t¹i biªn vïng 1.B (k=-L/2)

$$\left.\begin{aligned} E_{+}^{\min} &= E^{0}(L/2)+\tilde{V}(0)+\tilde{V}(L) \\ E_{-}^{\max} &= E^{0}(L/2)+\tilde{V}(0)-\tilde{V}(L) \end{aligned}\right\} \quad \Delta E(L/2)=2\left|\tilde{V}(L)\right|$$

$\downarrow$

vïng cÊm – khe cÊm n¨ng l- îng

Không thể có trạng thái của é mà NL nằm trong vùng cấm. ΔE là bề rộng vùng cấm, nói chung khác nhau với các vùng NL .



®i tõ k = L / 2 → 0

- KÕt luËn:

a) Phæ n¨ng l-îng kh«ng nhiÔu lo¹n lµ gi¸n ®o¹n gåm c¸c møc $E^0(k)$.

NhiÔu lo¹n $V(\vec{r}+\vec{R}) = V(\vec{r}) \rightarrow$ xª dÞch møc $E^0(k)$ / tách mức NL- xuÊt hiÖn vïng cÊm n¨ng l-îng – ®iÖn tö kh«ng thÓ cã tr¹ng th¸i mµ n¨ng l-îng n»m trong vïng cÊm cã ®é réng: $\Delta E = 2/\tilde{V}(L)$

b) NÕu phæ NL lµ liªn tôc, th× tÝnh xª dÞch NL ko cã kÕt qu¶.

NhiÔu lo¹n yÕu g©y ra sù t¸n x¹ c¸c h¹t vi m«, n¨ng l-îng h¹t kh«ng thay ®æi, chØ cã xung l-îng $\vec{p}$ ®æi h-íng - ®é lín $|\vec{p}|$ kh«ng ®æi.

TiÕt diÖn vi ph©n hiÖu dông cña qu¸ tr×nh t¸n x¹ lµ:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| 4\pi^2 m\hbar \tilde{V}(\vec{p}_f - \vec{p}_i) \right|^2$$

VÊn ®Ò trao ®æi – Bµi tËp

1. §äc thªm sù t¸n x¹ cña h¹t vi m« d-íi t¸c dông cña nhiÒu lo¹n yÕu.
2. Phæ n¨ng l-îng cña ®iÖn tö trong tinh thÓ.

III.t-¬ng t¸c cña bøc x¹ ®iÖn tõ víi ®iÖn tö

XÐt mét hÖ gåm ®iÖn tö cã ®iÖn tÝch e vµ khèi l-îng m chuyÓn ®éng trong tr-êng thÕ $V(\vec{r})$. Khi ch-a cã bøc x¹ ®iÖn tõ th× hµm sãng $\Psi^{(0)}(\vec{r},t)$ tho¶ m·n ph-¬ng tr×nh Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi^{(0)}(\vec{r},t)}{\partial t}=\hat{H}_0\psi^{(0)}(\vec{r},t) \qquad (1)$$

víi Hamiltonian

$$\hat{H}_0=\frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m}+V(\vec{r}). \qquad (2)$$

Hµm sãng tr¹ng th¸i dõng (víi n¨ng l-îng x¸c ®Þnh) cã d¹ng

$$\psi_n^{(0)}(\vec{r},t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi_n^{(0)}(\vec{r}), \qquad (3)$$

trong ®ã $\psi_n^{(0)}(\vec{r})$ lµ hµm riªng cña $\hat{H}_0$

$$\hat{H}_0\psi_n^{(0)}(\vec{r})=E_n\psi_n^{(0)}(\vec{r}). \qquad (4)$$

Gi¶ sö r»ng ta ®· biÕt c¸c hµm riªng $\psi_n^{(0)}(\vec{r})$ vµ c¸c gi¸ trÞ riªng E_n .

Khi cã trêng bøc x¹ víi thÕ vÐct¬ $\vec{A}(\vec{r},t)$ t¸c dông lªn hÖ th× Hamiltonian trë thµnh

$$\hat{H}(t)=\frac{\left[\hat{\vec{P}}-\frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r},t)\right]^2}{2m}+V(\vec{r}) \qquad (5)$$

(bá qua t¬ng t¸c gi÷a tõ trêng víi moment tõ spin).

ThÕ vÐct¬ tho¶ m·n ®iÒu kiÖn ngang

$$\vec{\nabla}\vec{A}(\vec{r},t)=0\,, \qquad (6)$$

do ®ã

$$\hat{\vec{P}}\vec{A}(\vec{r},t)=\vec{A}(\vec{r},t)\hat{\vec{P}}\,. \qquad (7)$$

Thùc vËy, t¸c dông to¸n tö trong vÕ tr¸i hÖ thøc (7) lªn hµm $f\left(\vec{r}\right)$ bÊt kú, ta cã

$$\left[\hat{\vec{P}}\vec{A}(\vec{r},t)-\vec{A}(\vec{r},t)\hat{\vec{P}}\right]f\left(\vec{r}\right)=-i\hbar\left\{\vec{\nabla}\left[\vec{A}(\vec{r},t)\,f\left(\vec{r}\right)\right]-\vec{A}(\vec{r},t)\vec{\nabla}f\left(\vec{r}\right)\right\}$$

$$=-i\hbar\left\{\left[\vec{\nabla}\vec{A}(\vec{r},t)\,f\left(\vec{r}\right)+\vec{A}(\vec{r},t)\vec{\nabla}f\left(\vec{r}\right)-\vec{A}(\vec{r},t)\vec{\nabla}f\left(\vec{r}\right)\right]\right\}=0\,.$$

Tõ ®ã suy ra r»ng chÝnh to¸n tö nµy ph¶i b»ng kh«ng.

Sö dông hÖ thøc (7) ta viÕt l¹i Hamiltonian (5) díi d¹ng

$$H(t) = \frac{\hat{\vec{P}}^{2}}{2m} - \frac{e}{mc}\vec{A}(\vec{r},t)\hat{\vec{P}} + \frac{e^{2}}{2mc^{2}}\vec{A}^{2}(\vec{r}) + V(\vec{r}), \qquad (8)$$

nghÜa lµ

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_{0} + \hat{H}_{\text{int}}(t), \qquad (9)$$

$$H_{\text{int}}(t) = -\frac{e}{mc}\vec{A}(\vec{r},t)\hat{\vec{P}} + \frac{e^{2}}{2mc^{2}}\vec{A}^{2}(\vec{r},t) \qquad (10)$$

$H_{in}(t)$ ®îc gäi lµ Hamiltonian t¬ng t¸c.

Bá qua sè h¹ng cÊp 2 theo h»ng sè nhá e, ta dïng biÓu thøc gÇn ®óng

$$H_{\text{int}}(t) \approx -\frac{e}{mc}\vec{A}(\vec{r},t)\,\hat{\vec{P}} \qquad (11)$$

Ký hiÖu hµm sãng cña hÖ chþu t¸c dông cña bøc x¹ ®iÖn tõ lµ $\psi(\vec{r},t)$. Ta cã ph-¬ng tr×nh

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left[\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}(t)\right]\psi(\vec{r},t). \qquad (12)$$

Cã thÓ khai triÓn $\psi(\vec{r},t)$ nh- sau

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_n C_n(t)\,\psi_n^{(0)}(\vec{r},t) \qquad (13)$$

Thay vµo ph-¬ng tr×nh(12)

$$i\hbar\sum\left\{\frac{dC_n(t)}{dt}\psi_n^{(0)}(\vec{r},t)+C_n(t)\frac{\partial\psi_n^{(0)}(\vec{r},t)}{\partial t}\right\}$$

$$=\sum_n C_n(t)\left\{\hat{H}_0\psi_n^{(0)}(\vec{r},t)+\hat{H}_{\text{int}}(t)\psi_n^{(0)}(\vec{r},t)\right\}$$

vµ sö dông ph-¬ng tr×nh (1) ®èi víi $\psi_n^{(0)}(\vec{r},t)$, ta thu ®-îc

$$\sum_n i\hbar\frac{dC_n(t)}{dt}\psi_n^{(0)}(\vec{r},t)=\sum_n C_n(t)\hat{H}_{\text{int}}(t)\psi_n^{(0)}(\vec{r},t) \qquad (14)$$

Nh©n c¶ hai vÕ víi $\psi_m^{(0)}(\vec{r},t)^*$ råi lÊy tÝch ph©n theo $\vec{r}$, sö dông tÝnh chÊt trùc giao chuÈn ho¸ cña c¸c hµm sãng $\psi_n^{(0)}(\vec{r},t)$

$$\int \psi_m^{(0)}(\vec{r},t)^* \psi_n^{(0)}(\vec{r},t) d\vec{r} = \delta_{mn} \ ,$$

ta suy ra hÖ thøc

$$\sum_n i\hbar \frac{dC_n(t)}{dt} \delta_{nm} = \sum_n C_n(t) \int \psi_m^{(0)}(\vec{r},t)^* \hat{H}_{\text{int}} \psi_n^{(0)}(\vec{r},t) d\vec{r} \ ,$$

nghÜa lµ thu ®îc hÖ ph¬ng tr×nh vi ph©n ®èi víi c¸c hµm $C_n(t)$

$$i\hbar \frac{dC_m(t)}{dt} = \sum_n \int \psi_m^{(0)}(\vec{r})^* \hat{H}_{\text{int}}(t) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) d\vec{r} \, e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t} C_n(t).$$

Ký hiÖu

$$\int \psi_m^{(0)}(\vec{r},t)^* \hat{H}_{\text{int}}(t)\,\psi_n^{(0)}(\vec{r},t)\,d\vec{r} = \left\langle \psi_m^{(0)} \middle| \hat{H}_{\text{int}}(t) \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle,$$

ta viÕt l¹i hÖ ph¬ng tr×nh nµy díi d¹ng

$$i\hbar \frac{dC_m(t)}{dt} = \sum_n \left\langle \psi_m^{(0)} \middle| \hat{H}_{\text{int}}(t) \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle . e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t} C_n(t). \qquad (15)$$

Ph¬ng tr×nh nµy cã thÓ viÕt díi d¹ng ph¬ng tr×nh tÝch ph©n t¬ng ®¬ng nh sau

$$C_m(T) = C_m(0) - \frac{i}{\hbar} \sum_n \int_0^T \left\langle \psi_m^{(0)} \middle| \hat{H}_{\text{int}}(t) \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle . e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t} C_n(t)\,dt. \qquad (16)$$

Ta gi¶ sö r»ng ë thêi ®iÓm ®Çu t=0 hÖ ë tr¹ng th¸i dõng víi hµm sãng $\psi_i^{(0)}(\vec{r})$, nghÜa lµ

$$C_m(0)=\delta_{im}\,. \tag{17}$$

Ta h·y t×m lêi gi¶i C_m(T) cña ph-¬ng tr×nh tÝch ph©n (16) víi ®iÒu kiÖn ban ®Çu (17) b»ng ph-¬ng ph¸p gÇn ®óng liªn tiÕp, coi yÕu tè ma trËn cña $\hat{H}_{\mathrm{int}}(t)$ lµ ®¹i l-îng nhá. Trong phÐp gÇn ®óng cÊp kh«ng ta cã

$$C_m(t)\approx C_m(0)=\delta_{im}\,.$$

Thay biÓu thøc cÊp kh«ng nµy vµo vÕ ph¶i ph-¬ng tr×nh (16), ta thu ®-îc $C_f(T)$ víi $f \neq i$ trong phÐp gÇn ®óng cÊp 1.

$$C_f(T) \approx -\frac{i}{\hbar}\int_0^T \left\langle \psi_f^{(0)} \middle| \hat{H}_{\text{int}}(t) \middle| \psi_i^{(0)} \right\rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)t}\, dt, \quad f \neq i \qquad (18)$$

Ta biÕt r»ng $\left|C_f(T)\right|^2$ lµ x¸c suÊt ®Ó h¹t ë trong tr¹ng th¸i $\psi_f^{(0)}(t)$ t¹i thêi ®iÓm T, mµ ë thêi ®iÓm ban ®Çu t=0 th× h¹t l¹i ë trong tr¹ng th¸i $\psi_i^{(0)}(\vec{r})$. VËy $\left|C_f(T)\right|^2$ lµ x¸c suÊt ®Ó h¹t chuyÓn tõ tr¹ng th¸i $\psi_i^{(0)}(\vec{r})$ sang tr¹ng th¸i $\psi_f^{(0)}(\vec{r})$ trong kho¶ng thêi gian T.

Chia cho T vµ lÊy giíi h¹n $T \to \infty$ ta ®-îc x¸c suÊt trung b×nh ®Ó h¹t chuyÓn tõ tr¹ng th¸i $\varphi_i^{(0)}(\vec{r})$ sang tr¹ng th¸i $\psi_f^{(0)}(\vec{r})$ trong mét ®¬n vÞ thêi gian. Nh©n víi sè tr¹ng th¸i $dn(E)$ mµ n¨ng l-îng cã gi¸ trÞ trong kho¶ng tõ E ®Õn $E+dE$,

$$dn(E) = \rho(E)\,dE, \qquad (19)$$

trong ®ã $\rho(E)$ lµ mËt ®é tr¹ng th¸i, råi lÊy tich ph©n theo E, ta ®-îc x¸c suÊt trung b×nh ®Ó trong mét ®¬n vÞ thêi gian hÖ chuyÓn tõ tr¹ng th¸i ban ®Çu sang mét tr¹ng th¸i cuèi cã n¨ng l-îng n»m trong kho¶ng mµ ta lÊy tÝch ph©n theo E:

$$W_{i\to f} = \int \rho(E) \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \left|C_f(T)\right|^2 dE\,. \qquad (20)$$

H·y t×m x¸c suÊt $W_{i\rightarrow f}$ trong tr-êng hîp bøc x¹ ®iÖn tõ lµ sãng ph¼ng ®¬n s¾c cã d¹ng

$$\vec{A}(\vec{r},t)=\vec{A}_0 e^{-i\left(\omega t-\vec{k}\vec{r}\right)}+\vec{A}_0^{*} e^{i\left(\omega t-\vec{k}\vec{r}\right)}. \qquad (21)$$

¸p dông c«ng thøc (18) ®Ó tÝnh C_f (T) vµ dïng biÓu thøc (11) cña $\hat{H}_{\mathrm{int}}(t)$, ta thu ®-îc

$$C_f(T)=\frac{i}{\hbar}\left\{\left\langle \psi_f^{(0)}\right| e^{i\vec{k}\vec{r}}\,\frac{e}{mc}\,\vec{A}_0\hat{\vec{P}}\left|\psi_i^{(0)}\right\rangle \int_0^T e^{\frac{i}{\hbar}\left(E_f-E_i-\hbar\omega\right)t}dt\right.$$

$$\left.+\left\langle \psi_f^{(0)}\right| e^{-i\vec{k}\vec{r}}\,\frac{e}{mc}\,\vec{A}_0^{*}\hat{\vec{P}}\left|\psi_i^{(0)}\right\rangle \int_0^T e^{\frac{i}{\hbar}\left(E_f+\hbar\omega-E_i\right)t}dt\right\} \qquad (22)$$

H·y dïng c«ng thøc nµy cña $C_f\,(T)$ ®Ó tÝnh ®¹i l-îng

$$\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\left|C_f\left(T\right)\right|^2 .$$

B×nh ph-¬ng m«®un sè h¹ng thø nhÊt trong vÕ ph¶i c«ng thøc (22) cho ®ãng gãp tû lÖ víi

$$\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2} e^{-\frac{i}{\hbar}\left(E_f-E_i-\hbar\omega\right)t}dt.\lim_{T\to\infty}\int_{-T/2}^{T/2} e^{\frac{i}{\hbar}\left(E_f-E_i-\hbar\omega\right)t}dt$$

$$=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2} e^{-\frac{i}{\hbar}\left(E_f-E_i-\hbar\omega\right)t}dt\,2\pi\hbar\,\delta\left(E_f-E_i-\hbar\omega\right)$$

$$=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2}dt.2\pi\hbar\,\delta\left(E_f-E_i-\hbar\omega\right)=2\pi\hbar\,\delta\left(E_f-E_i-\hbar\omega\right).$$

T-¬ng tù nh- vËy, cã thÓ thö l¹i r»ng b×nh ph-¬ng m«®un sè h¹ng thø hai trong vÕ ph¶i c«ng thøc (22) cho ®ãng gãp tû lÖ víi

$$2\pi\hbar\,\delta\left(E_f+\hbar\omega-E_i\right),$$

Cßn c¸c sè h¹ng giao thoa th× triÖt tiªu, v×

$$\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2}e^{\frac{i}{\hbar}\left(E_f-E_i-\hbar\omega\right)t}dt.\lim_{T\to\infty}\int_{-T/2}^{T/2}e^{\frac{i}{\hbar}\left(E_f+\hbar\omega-E_i\right)t}dt$$

$$=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2}e^{\frac{i}{\hbar}\left(E_f-E_i-\hbar\omega\right)t}dt.2\pi\hbar\,\delta\left(E_f+\hbar\omega-E_i\right)$$

$$=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2}e^{-2i\omega t}dt=0$$

VËy ta thu ®- îc

$$\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\left|C_f(T)\right|^2=\frac{1}{\hbar}\left\{2\pi\delta\left(E_f-E_i-\hbar\omega\right)\left|\left\langle\psi_f^{(0)}\left|e^{i\vec{k}\vec{r}}\frac{e}{mc}\vec{A}_0\hat{\vec{P}}\right|\psi_i^{(0)}\right\rangle\right|^2\right.$$

$$\left.+2\pi\delta\left(E_f+\hbar\omega-E_i\right)\left|\left\langle\psi_f^{(0)}\left|e^{-i\vec{k}\vec{r}}\frac{e}{mc}\vec{A}_0^*\hat{\vec{P}}\right|\psi_i^{(0)}\right\rangle\right|^2\right\}. \qquad (23)$$

Sè h¹ng thø nhÊt trong vÕ ph¶i c«ng thøc (23) chØ cho ®ãng gãp nÕu n¨ng l- îng c¸c tr¹ng th¸i ®Çu vµ cuèi tho¶ m·n ®Þnh luËt b¶o toµn

$$E_f=E_i+\hbar\omega;$$

sè h¹ng nµy x¸c ®Þnh x¸c suÊt hÊp thô.

Sè h¹ng thø hai trong vÕ ph¶i c«ng thøc (23) chØ cho ®ãng gãp nÕu n¨ng l- îng c¸c tr¹ng th¸i ®Çu vµ cuèi tho¶ m·n ®Þnh luËt b¶o toµn

$$E_f+\hbar\omega=E_i\ ;$$

sè h¹ng nµy x¸c ®Þnh x¸c suÊt bøc x¹.

Tãm l¹i ta thu ®-îc c¸c c«ng thøc sau ®©y x¸c ®Þnh x¸c suÊt hÊp thô $W_{ht}(i\to f)$ vµ x¸c suÊt bøc x¹ $W_{bx}(i\to f)$:

$$W_{ht}(i\to f)=\frac{2\pi}{\hbar}\rho(E_f)\left|\frac{e\vec{A}_0}{mc}\left\langle\psi_f^{(0)}\right|e^{i\vec{k}\vec{r}}\hat{\vec{P}}\left|\psi_i^{(0)}\right\rangle\right|^2,\ E_f=E_i+\hbar\omega, \qquad (24)$$

$$W_{bx}(i\to f)=\frac{2\pi}{\hbar}\rho(E_f)\left|\frac{e\vec{A}_0^*}{mc}\left\langle\psi_j^{(0)}\right|e^{-i\vec{k}\vec{r}}\hat{\vec{P}}\left|\psi_i^{(0)}\right\rangle\right|^2,\ E_f+\hbar\omega=E_i. \qquad (25)$$

VÕ ph¶i c¸c c«ng thøc (24) vµ (25) ®Òu tû lÖ víi $\left|\vec{A}_0\right|^2$, nghÜa lµ tû lÖ víi c-êng ®é bøc x¹ ®iÖn tõ cæ ®iÓn ®· g©y ra sù hÊp thô hoÆc sù bøc x¹.

X¸c suÊt bøc x¹ (25) triÖt tiªu nÕu kh«ng cã trêng ®iÖn tõ kÝch thÝch sù bøc x¹. Do ®ã c«ng thøc (25) x¸c ®Þnh x¸c suÊt bøc x¹ cìng bøc. Muèn thu ®îc x¸c suÊt bøc x¹ tù ph¸t ta ph¶i ¸p dông lý thuyÕt lîng tö trêng ®iÖn tõ, nghÜa lµ ph¶i nghiªn cøu vÊn ®Ò trong khu«n khæ §iÖn ®éng lùc häc lîng tö. C¸c c«ng thøc (24) vµ (25) thêng ®îc gäi lµ

c¸c quy t¾c vµng (Golden rules).

Víi c¸c møc n¨ng lîng gi¸n ®o¹n th× mËt ®é tr¹ng th¸i $\rho(E_f)$ b»ng ®¬n vÞ. Khi ®ã tõ c¸c c«ng thøc (24) vµ (25) suy ra ngay r»ng

$$W_{ht}(i \to f) = W_{bx}(f \to i), \qquad (26)$$

nghÜa lµ x¸c suÊt hÊp thô vµ x¸c suÊt bøc x¹ cìng bøc gi÷a cïng mét cÆp trang th¸i cã gi¸ trÞ b»ng nhau.

§Ó x¸c ®Þnh x¸c suÊt hÊp thô hoÆc bøc x¹ cìng bøc ta ph¶i tÝnh c¸c yÕu tè ma trËn

$$\left\langle \psi_f^{(0)} \middle| e^{\pm i\vec{k}\vec{r}}\hat{\vec{P}} \middle| \psi_i^{(0)} \right\rangle = \int e^{\pm i\vec{k}\vec{r}} \psi_f^{(0)}(\vec{r})\hat{\vec{P}}\psi_i^{(0)}(\vec{r})d\vec{r}\,. \qquad (27)$$

Th«ng th-êng tÝch $\vec{k}\vec{r}$ rÊt nhá so víi ®¬n vÞ nªn ta cã thÓ bá qua $\vec{k}\vec{r}$ trong thõa sè $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ vµ thay yÕu tè ma trËn (27) b»ng biÓu thøc

$$\left\langle \psi_f^{(0)} \middle| \hat{\vec{P}} \middle| \psi_i^{(0)} \right\rangle = \int \psi_f^{(0)}(\vec{r})^* \, \hat{\vec{P}} \psi_i^{(0)}(\vec{r}) d\vec{r} \,. \qquad (28)$$

Ta th-êng gäi phÐp thay thÕ ®ã lµ phÐp gÇn ®óng l-ìng cùc ®iÖn v× lý do sau ®©y.

Theo ph-¬ng tr×nh chuyÓn ®éng l-îng tö Heisenberg ta cã

$$\hat{\vec{P}} = m\dot{\vec{r}} = \frac{i}{\hbar} m\left[\hat{H}_0, \vec{r}\,\right]. \qquad (29)$$

Trong c«ng thøc cña x¸c suÊt bøc x¹ vµ hÊp thô th× yÕu tè ma trËn (28) ®-îc nh©n víi e. Dïng hÖ thøc (29), ta biÕn ®æi tÝch cña e víi yÕu tè ma trËn (28) nh- sau

$$e\left\langle \psi_f^{(0)} \middle| \vec{P} \middle| \psi_i^{(0)} \right\rangle = \frac{i}{\hbar} em \left\langle \psi_f^{(0)} \middle| \left[\hat{H}_0, \vec{r}\right] \middle| \psi_i^{(0)} \right\rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar} em \left\langle \psi_f^{(0)} \middle| \left[\hat{H}^0 \vec{r} - \vec{r} \hat{H}_0\right] \middle| \psi_i^{(0)} \right\rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar} m \left(E_f - E_i\right) \left\langle \psi_f^{(0)} \middle| e\vec{r} \middle| \psi_i^{(0)} \right\rangle .$$

VËy trong phÐp gÇn ®óng ®ang xÐt x¸c suÊt hÊp thô vµ x¸c suÊt bøc x¹ ®Òu tû lÖ víi b×nh ph-¬ng m«®un cña yÕu tè ma trËn cña vect¬ l-ìng cùc ®iÖn $e\vec{r}$. NÕu yÕu tè ma trËn (28) kh¸c kh«ng th× ta nãi r»ng qu¸ tr×nh hÊp thô hoÆc bøc x¹ lµ ®-îc phÐp, nÕu yÕu tè ma trËn ®ã b»ng kh«ng th× ta nãi qu¸ tr×nh hÊp thô hoÆc bøc x¹ bÞ cÊm

¸p dông quy t¾c céng m« men xung l-îng ta h·y thiÕt lËp quy t¾c cho phÐp ta x¸c ®Þnh ®-îc ngay qu¸ tr×nh hÊp thô hoÆc bøc x¹ lµ ®-îc phÐp hay bÞ cÊm nÕu ta biÕt m«men xung l-îng cña c¸c trang th¸i $\psi_i^{(0)}(\vec{r})$ vµ $\psi_f^{(0)}(\vec{r})$ mµ kh«ng cÇn ph¶i tÝnh c¸c tÝch ph©n. C¸c quy t¾c ®ã gäi lµ c¸c quy t¾c chän läc.

H·y xÐt tr-êng hîp kh«ng cã liªn kÕt spin-quü ®¹o, vai trß cña spin cã thÓ bá qua. Gi¶ sö ta biÕt r»ng c¸c tr¹ng th¸i $\psi_i^{(0)}(\vec{r})$ vµ $\psi_f^{(0)}(\vec{r})$ cã m«men xung l-îng quü ®¹o I vµ I'.

To¸n tö $\vec{P}$ lµ mét vect¬ cã ba thµnh phÇn vµ t¹o thµnh mét biÓu diÔn tèi gi¶n cña nhãm quay víi m«men xung l-îng b»ng 1, nghÜa lµ cã tÝnh chÊt biÕn ®æi gièng nh- hµm sãng cña tr¹ng th¸i víi m« men xung l-îng quü ®¹o b»ng 1.

Gi¶ sö $l \neq 0$. Theo quy t¾c céng m«men th× ®¹i l-îng

$$\hat{\vec{P}}\psi_i^{(0)}(\vec{r})$$

cã thÓ t¸ch lµm ba sè h¹ng cã tÝnh chÊt biÕn ®æi gièng nh-

nh÷ng hµm sãng cña c¸c tr¹ng th¸i víi m«men xung l-îng quü ®¹o b»ng l-1, l vµ l+1. V× hai hµm sãng cña hai tr¹ng th¸i víi m«men xung l-îng quü ®¹o kh¸c nhau ph¶i trùc giao víi nhau, nghÜa lµ tÝch v« h-íng cña chóng ph¶i b»ng kh«ng, cho nªn yÕu tè ma trËn (28) chØ cã thÓ kh¸c kh«ng nÕu l' cã mét trong ba gi¸ trÞ l-1, l hoÆc l+1. TÝnh chÊt nµy lµ sù thÓ hiÖn cña ®Þnh

luËt b¶o toµn m«men xung l-îng quü ®¹o.

Tr-êng hîp $l' = l$ bÞ lo¹i ®i v× r»ng khi ®ã $\psi_i^{(0)}(\vec{r})$ vµ $\psi_f^{(0)}(\vec{r})$

hoÆc lµ cïng ch½n, hoÆc lµ cïng lÎ, mµ $\hat{\vec{P}}$ lµ lÎ ®èi víi phÐp nghÞch ®¶o kh«ng gian $\vec{r} \longrightarrow \vec{r}$, cho nªn tÝch ph©n theo $\vec{r}$ triÖt tiªu. VËy qu¸ tr×nh hÊp thô hoÆc bøc x¹ chØ ®-îc phÐp nÕu

$$l' = l \pm 1 .$$

Ta th-êng viÕt quy t¾c chän läc nµy d-íi d¹ng

$$\Delta l = \pm 1 . \qquad (30)$$

Trong tr-êng hîp cã sù liªn kÕt spin-quü ®¹o th× c¸c tr¹ng th¸i $\psi_i^{(0)}(\vec{r})$ vµ $\psi_f^{(0)}(\vec{r})$ cã m«men xung l-îng toµn phÇn *j* vµ *j'* x¸c ®Þnh. §¹i l-îng

$$\hat{\vec{P}}\psi_i^{(0)}(\vec{r})$$

Cã thÓ t¸ch thµnh ba sè h¹ng cã tÝnh chÊt biÕn ®æi gièng nh- hµm sãng cña c¸c tr¹ng th¸I víi c¸c m«men xung l-îng toµn phÇn *j*-1, *j* vµ *j*+1 vµ tÝnh ch½n lÎ ng-îc víi tÝnh ch½n lÎ cña $\psi_i^{(0)}(\vec{r})$.

Muèn cho yÕu tè ma trËn (28) kh¸c kh«ng th× j' ph¶i cã mét trong ba gi¸ trÞ j-1, j hoÆc j+1, cßn tÝnh ch½n lÎ cña $\psi_f^{(0)}(\vec{r})$ ph¶i ng-îc víi tÝnh ch½n lÎ cña $\psi_i^{(0)}(\vec{r})$. VËy ta cã quy t¾c chän läc sau ®©y

j' = j, j ± 1 vµ tÝnh ch½n lÎ thay ®æi, nghÜa lµ (31)

Δ j = 0, ± 1 vµ tÝnh ch½n lÎ thay ®æi.

C¸c lËp luËn trªn còng cã thÓ ¸p dông cho tr-êng hîp c¸c tr¹ng th¸i ®-îc diÔn t¶ bëi hµm sãng cña hÖ nhiÒu ®iÖn tö. Khi ®ã j vµ j′ cã thÓ cã c¸c gi¸ trÞ nguyªn. Trong tr-êng hîp nµy qu¸ tr×nh hÊp thô vµ ph¸t x¹ lµ bÞ cÊm nÕu j = j′ = 0. Ta viÕt quy t¾c nµy nh- sau

$$0 \not\to 0 . \qquad (32)$$

CHƯƠNG 6

hÖ nhiÒu h¹t ®ång nhÊt

I. Nguyên lý bất khả phân biệt các hạt đồng nhất

H¹t ®ång nhÊt: cã b¶n chÊt gièng nhau: cïng mét giá trÞ khèi lîng m, ®iÖn tÝch q, spin s ....

II. Thèng kª Bose-Einstein, thèng kª Fermi-Dirac

- Hµm sãng cña hÖ h¹t ®ång nhÊt

$$\psi\left(\sigma_1\vec{r}_1,\ldots,\sigma_\alpha\vec{r}_\alpha,\ldots,\sigma_\beta\vec{r}_\beta,\ldots,\sigma_N\vec{r}_N;t\right)= \qquad (1)$$

$$=e^{i\eta}\psi\left(\sigma_1\vec{r}_1,\ldots,\sigma_\beta\vec{r}_\beta,\ldots,\sigma_\alpha\vec{r}_\alpha,\ldots,\sigma_N\vec{r}_N;t\right)$$

$\vec{r}_i\ ,\sigma_i$ lµ täa ®é, chØ sè spin cña h¹t i.

$$e^{i\eta}=\pm 1$$

Nguyên lý bất khả phân biệt các hạt đồng nhất

Trong CHLT, Hamiltonian của hệ các hạt đồng nhất bất biến với phép hoán vị 2 hạt bất kỳ. Do vậy,
Nếu ψ(1,2,…,k,j,…N,t) là hàm sóng của hệ hạt đồng nhất thì ψ(1,2,…,j,k…N,t) cũng là hàm sóng của hệ hạt đồng nhất. Chúng cùng diễn tả một trạng thái khả dĩ của hệ các hạt đồng nhất.

Tất cả các hàm sóng được tạo bởi kiểu hoán vị nói trên đều bình đẳng với nhau. Vì thế , không thể biết chính xác sự phân bố trong không gian của từng hạt riêng biệt mà chỉ có thể biết thông tin về toàn bộ hệ mà thôi.

Cần hiểu là, trong thế giới vi mô, các hạt đồng nhất là một tổng thể khách quan mà ta không thể nói gì về trạng thái của từng hạt riêng biệt.

Nguyên lí bất khả phân biệt các hạt đồng nhất: *Các trạng thái vật lí của hệ nhiều hạt đồng nhất phải là các trạng thái bất biến đối với bất kỳ phép hoán vị nào giữa các hạt.*

+$e^{i\eta}$ =1: ψ(1,2)= ψ(2,1) ®èi xøng v í i phÐp ho¸n vÞ 2 h¹t
hạt boson, theothèng kª Bose -Einstein
hạt có spin nguyªn (photon, π- meson, K-meson ...)
+$e^{i\eta}$ =-1:ψ(1,2)=-ψ(2,1) ph¶n ®èi xøng v í i phÐp ho¸n vÞ 2 h¹t
hạt fermion, theo thèng kª Fermi-Dirac
hạt có spin bán nguyªn(electron,proton,neutron,neutrino...)

- Nguyªn lý lo¹i trõ Pauli

Hamiltonian cña hÖ h¹t (bá qua t-¬ng t¸c gi÷a c¸c h¹t)

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^{N} \hat{H}^{(\alpha)} \qquad (2)$$

$$\hat{H}^{(\alpha)}\psi_{\nu_\alpha}^{(\alpha)}(\sigma_\alpha \vec{r}_\alpha) = E_{\nu_\alpha}^{(\alpha)}\psi_{\nu_\alpha}^{(\alpha)}(\sigma_\alpha \vec{r}_\alpha) \qquad (3)$$

chØ sè ν_α : tÊt c¶ c¸c sè l-îng tö : n, l, m, m_s

$\psi^{(\alpha)}_{\nu_\alpha}(\sigma_\alpha \vec{r}_\alpha)$, $E^{(\alpha)}_{\nu_\alpha}$ lµ hµm sãng, n¨ng l- îng cña h¹t α.

Hµm sãng tÝch $\psi^{(\alpha)}_{\nu_\alpha}(\sigma_\alpha \vec{r}_\alpha)$

$$\psi_{\nu_1 \dots \nu_N}(\sigma_1 \vec{r}_1, \dots, \sigma_\beta \vec{r}_\beta, \dots, \sigma_\alpha \vec{r}_\alpha, \dots, \sigma_N \vec{r}_N; t) = \psi^{(1)}_{\nu_1}(\sigma_1 \vec{r}_1) \dots \psi^{(N)}_{\nu_N}(\sigma_N \vec{r}_N) \qquad (4)$$

lµ hµm riªng cña

$$\hat{H}\psi_{\nu_1 \dots \nu_N}(\sigma_1 \vec{r}_1, \dots, \sigma_N \vec{r}_N) = E_{\nu_1 \dots \nu_N}\, \psi_{\nu_1 \dots \nu_N}(\sigma_1 \vec{r}_1, \dots, \sigma_N \vec{r}_N) \qquad (5)$$

Víi trÞ riªng lµ n¨ng l- îng toµn phÇn cña mäi h¹t

$$E_{\nu_1 \dots \nu_N} = \sum_\alpha E^{(\alpha)}_{\nu_\alpha} \qquad (6)$$

- Hµm sãng $\psi_{\nu_1\ldots\nu_N}(\sigma_1\vec{r}_1,\ldots,\sigma_N\vec{r}_N)$ ph¶i tho¶ m·n tÝnh chÊt ®èi xøng (hÖ cã s nguyªn) / ph¶n ®èi xøng (s b¸n nguyªn) víi phÐp ho¸n vÞ hai h¹t ®ång nhÊt.
- Víi hÖ N h¹t ®ång nhÊt, s b¸n nguyªn(fermion), hµm sãng thoả mãn ĐK phản đối xứng phải cã d¹ng

$$\psi_{\nu_1\ldots\nu_N}(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{pmatrix} \psi_{\nu_1}(\sigma_1\vec{r}_1) & \psi_{\nu_1}(\sigma_2\vec{r}_2) & \cdots & \psi_{\nu_1}(\sigma_N\vec{r}_N) \\ \psi_{\nu_2}(\sigma_1\vec{r}_1) & \psi_{\nu_2}(\sigma_2\vec{r}_2) & \cdots & \psi_{\nu_2}(\sigma_N\vec{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\nu_N}(\sigma_1\vec{r}_1) & \psi_{\nu_N}(\sigma_2\vec{r}_2) & \cdots & \psi_{\nu_N}(\sigma_N\vec{r}_N) \end{pmatrix} \quad (7)$$

- NÕu $\psi_{\nu\alpha}$ vµ $\psi_{\nu\beta}$ cã ν_α trùngν_β, định thức có 2 hàng giống nhau, lập tức

$$\psi_{\nu_1\ldots\nu_N}(\sigma_1\vec{r}_1,\ldots,\sigma_N\vec{r}_N)=0$$

Nguyªn lý lo¹i trõ Pauli:

Trong hệ *nhiều fermion đồng nhất, không thể có hơn 1 hạt cùng ở 1 trạng thái*- mçi tr¹ng th¸i c*ủa hệ (*víi c¸c sè l-îng tö n, l, m, vµ m_s ®· cho) ch*ỉ* cã thÓ ho*ặc bị bỏ trống hoặc bị chiếm bởi 1 fermion mà thôi.*

III. Tr¹ng th¸i cña hÖ c¸c ®iÖn tö trong nguyªn tö

– Nguyªn t¾c ph©n bè ®iÖn tö trong nguyªn tö:

a/ NL.Pauli:

- Trên1 trạng thái, tối đa bị chiếm bởi 1 điện tử.
- LÇn l-ît lÊp ®Çy c¸c tr¹ng th¸i cã n¨ng l-îng thÊp $\rightarrow$ cao.

+ Viết cấu hình $(nl)^x$: x là số e trên mức $E_{nl.}$ – phân lớpl

Kí hiệu: n : lượng tử chính bằng số

l : số lượng tử quỹ đạo bằng chữ

l = 0, 1, 2 , 3 , 4 , 5 , 6

$\Rightarrow$ s, p , d , f , g , h

TD: H: $(1s)^1$, B: $(1s)^2$ $(2s)^2$ $(2p)^1$, Na: $(1s)^2$ $(2s)^2(2p)^6(3s)^1$

- Sè cùc ®¹i ®iÖn tö trªn lớp n là: $2\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=2n^2$ (8)
- Sè cùc ®¹i ®iÖn tö trªn phân lớp l lµ : 2(2l+1)

b/ Nguyên tắc tối ưu NL.(Hệ tự tổ chức sao cho có lợi nhất về NL

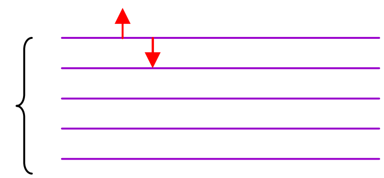
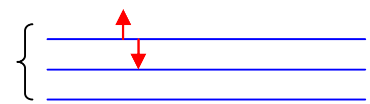
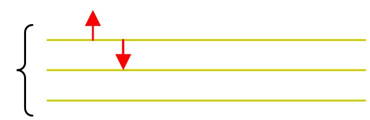
- Tính toán LT cho thấy: các mức NL tăng dần theo tổng n+l. Nếu 2 mức có tổng n+l như nhau thì mức nào có n lớn hơn sẽ có NL cao hơn.

$E_{1s} < E_{2s} < E_{2p} < E_{3s} < E_{3p} < E_{4s} < E_{3d} < E_{4p} < E_{5s} < E_{4d} < E_{5p} < E_{6s} < E_{4f} < E_{5d} < E_{6p} < E_{7s}$.........

TD: Fe(26): $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^6 4s^2$

Ngoài ra còn phải chú ý phân bố e quanh hạt nhân.

Møc n¨ng l-îng vµ ®é suy biÕn

Møc n¨ng l-îng nguyªn tö E_{nl}	§é suy biÕn g = (2l + 1)	Sè ®iÖn tö cùc ®¹i 2(2l+1)	Ph©n bè c¸c møc n¨ng l-îng víi suy biÕn g
E_{32} -3d	5	10	3d 
E_{31} -3p	3	6	3p 
E_{30} -3s	1	2	3s 
E_{21} -2p	3	6	2p 
E_{20} -2s	1	2	2s 
E_{10} -1s	1	2	1s 

- Chỉ có các e ở lớp ngoài cùng(về không gian) mới quyết định các t/c HHọc của nguyên tố. C¸c e lớp bên trong không tham gia trực tiếp vào phản ứng HH. Mật độ phân bố e quanh hạt nhân đã biết là: ⟶

$$w_{nl}(r) = r^2.R^2_{nl}(r)$$

<u>Không phải e có NL cao hơn luôn ở xa hạt nhân hơn.</u>

TD: $E_{6s} < E_{4f}$ thì E_{6s} bị chiếm trước. Nhưng từ hàm R_{4f} ,R_{6s} tínhphân bố é thì phân lớp 6s nằm ngoài 4f.

La(57): tất cả các mức từ 6s trở xuống đều bị lấp đầy hoàn toàn. Mức 6s có 2 e.

Ce (58): e tiếp theo sẽ chiếm mức 4f.

Phân lớp 4f có 14 chỗ nên tất cả 15 nguyên tố lố này đều có 2e lớp 6s ngoài cùng, có t/c hh giống nhau- họ La, ng.tố đất hiếm.

- C¸c nguyªn tè d-¬ng ®iÖn, ©m ®iÖn

nhËn ®iÖn tö → ion ©m (phi kim lo¹i)

cho ®iÖn tö → ion d-¬ng (kim lo¹i)

- Ngoài $(nl)^x$, khi nghiªn cøu quang phæ, còn phải quan tâm các số Ltử L, S, J cña toµn hÖ. Mỗi trạng thái dừng của ng.tử(term) được kí hiệu:

$^{2S+1}[L]j$ với j = l + s

TD: H: $1s^1$ thì $^2S_{1/2}$ (l=0; J= 0+1/2 =1/2; 2*1/2 +1 =2)

He:$1s^2$ thì $^1S_0$ (l=0; J= 0+1/2-1/2 =0; 2*0 +1 =1)

Với mọi khí trơ, có 1 term duy nhất $^2[S]_0$.

2[P]3/2

Với mọi KL kiềm, có 1 term duy nhất $^2[S]_{1/2}$. Vì chỉ khác khí trơ ở 1 e lớp ns ngoài cùng.

Các trường hợp khác: 1 CHĐT ứng nhiều term.

TD: B: $1s^2$ $2s^2$ $2p^1$. Ta thấy L=1,S=1/2. j= 1/2 hoặc 3/2.

Có 2 term: $^2[P]_{1/2}$ và $^2[P]_{3/2}$ với cùng 1 năng lượng. Khi có nhiễu loạn(do tương tác spin- quỹ đạo chẳng hạn) mức NL này sẽ tách thành 2 , tạo thành cấu trúc tinh tế.

VÊn ®Ò trao ®æi – Bµi tËp

1. §iÒn vµo b¶ng

L-îng tö sè chÝnh n	sè ®iÖn tö cùc ®¹i trªn møc E_n	CÊu h×nh ®iÖn tö
1	$2(1^2) = 2$	$1s^2$
2	$2(2^2) = 8$	$2s^2\ 2p^6$
3	$2(3^2) = 18$	$3s^2 3p^6 3d^{10}$
4	$2(4^2) = 32$	$4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14}$

2. ViÕt cÊu h×nh ®iÖn tö cña Fe (Z=26), Fe^{2+}, Fe^{3+} vµ cho nhËn xÐt.

$$Cu(Z=29) : 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^{10}\ 4s^1$$

CHƯƠNG 7
sù dÉn ®iÖn trong chÊt r¾n

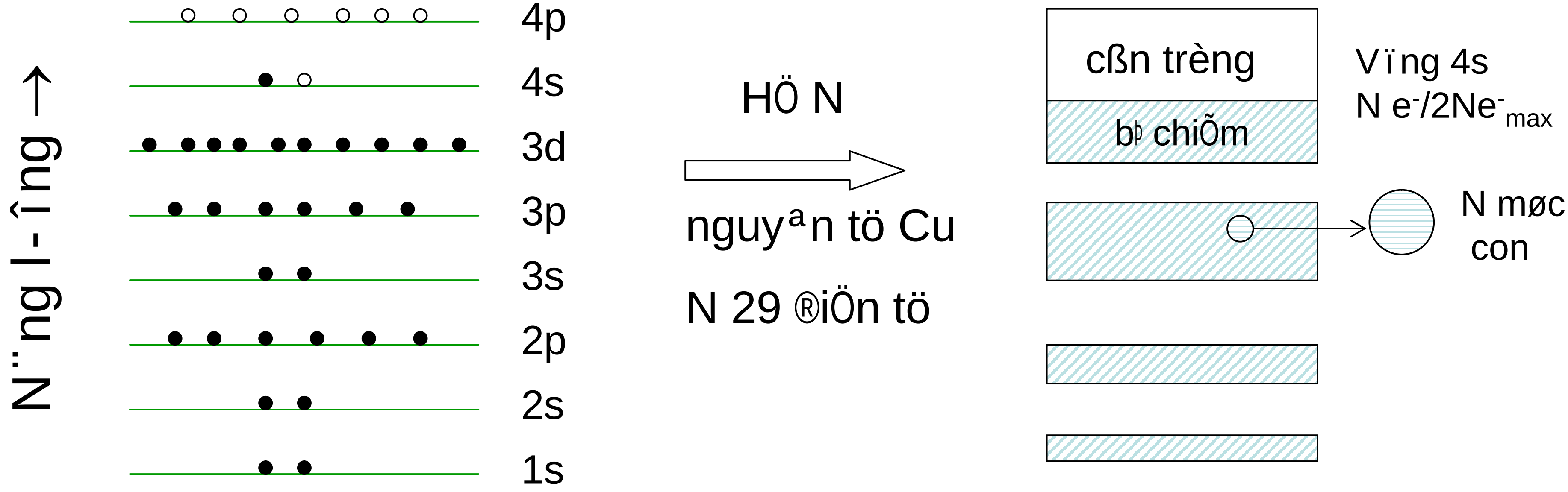
I. TÝnh dÉn ®iÖn

	®¬n vÞ	Cu	Si
• Lo¹i vËt dÉn		Kim lo¹i	B¸n dÉn
• MËt ®é h¹t t¶i ®iÖn,n	m^{-3}	9.10^{28}	1.10^{16}
• §iÖn trë suÊt, ρ	Ωm	2.10^{-8}	3.10^{3}
• HÖ sè nhiÖt ®iÖn trë, α	K^{-1}	4.10^{-3}	-70.10^{-3}

C¸i gÝ ®»ng sau Cu → kim lo¹i; Si → b¸n dÉn;

Kim c-¬ng → c¸ch ®iÖn ???

II. C¸c møc n¨ng lîng trong vËt r¾n



● bÞ chiÕm

○ cßn trèng

H×nh 12.1

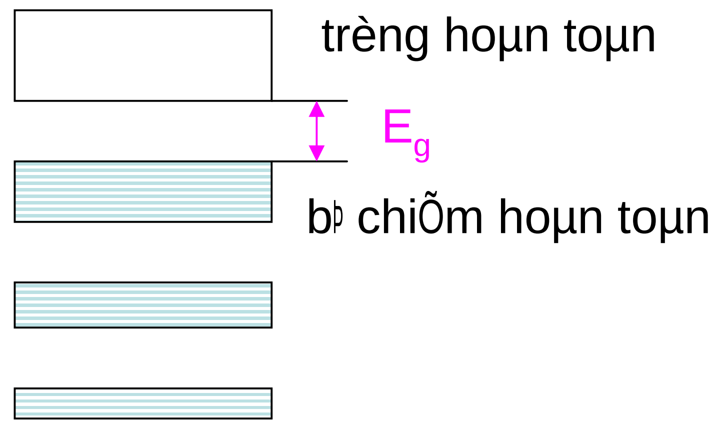
1 nguyªn tö Cu c« lËp,

29 ®iÖn tö

Tinh thÓ Cu cã

N nguyªn tö

III. ChÊt c¸ch ®iÖn



- Møc bÞ chiÕm cao nhÊt ≡ ®Ønh vïng
- E_g(kim c-¬ng) = 5,4 EV = 140 n¨ng l-îng chuyÓn

  ®éng nhiÖt ë T =300°K
- Cã ®iÖn tr-êng:

®iÖn tö chuyÓn $E_n \not\xrightarrow[\text{Pauli}]{} E_m$ trong 1 vïng

vïng bÞ chiÕm $\not\xrightarrow[kT<<E_g]{}$ vïng trèng

} kh«ng dÉn ®iÖn

IV. Kim lo¹i – 4.1. XÐt ®Þnh tÝnh

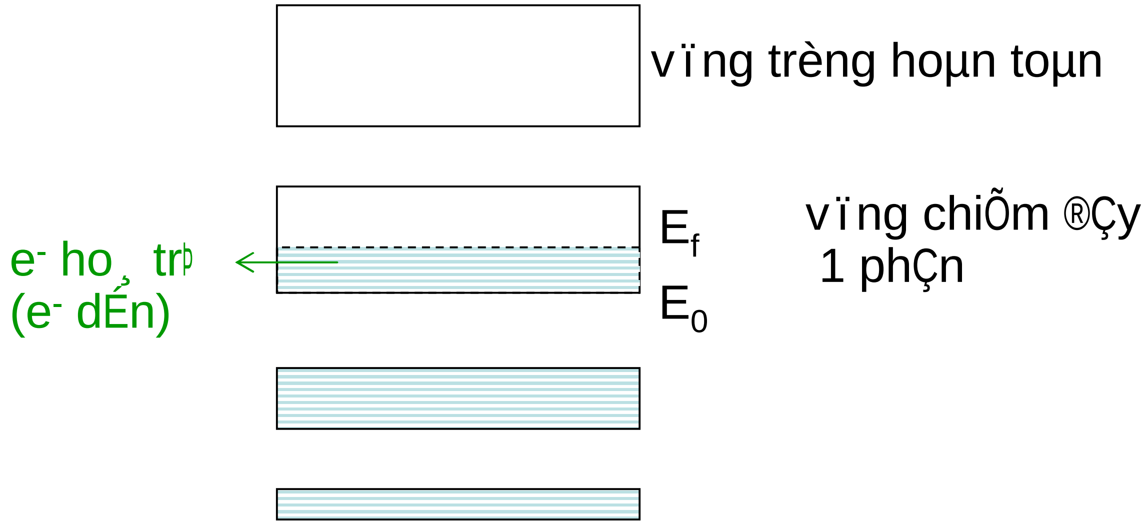
- T = 0K

Møc bÞ chiÕm cao nhÊt E_f ë kho¶ng gi÷a mét vïng → vïng n¨ng l-îng bÞ chiÕm 1 phÇn.

E_f: møc Fermi

E_f (Cu)=7,0 eV;

v_f(Cu)=1,6.10^6 m/s.



H×nh 12.3

- T > 0:

®iÖn tö ë vïng n»m d-íi: kh«ng ¶nh h-ëng g×

®iÖn tö ë gÇn E_f → E cao h¬n cßn trèng

- Cã ®iÖn tr-êng: e$^-$ d·n → Ð ch.dêi cã h-íng ⇒ t¹o dßng ®iÖn

§iÖn trë suÊt

$$\rho = \frac{m}{ne^2\tau} \qquad (1)$$

Víi m: khèi l-îng ®iÖn tö

-e : ®iÖn tÝch ®iÖn tö

n : mËt ®é h¹t t¶i ®iÖn ≡ sè ®iÖn tö dÉn / ®¬n vÞ thÓ tÝch

τ : thêi gian håi phôc

4.2. Kim lo¹i – xÐt ®Þnh l-îng

- Sè c¸c tr¹ng th¸i l-îng tö ®-îc phÐp – MËt ®é tr¹ng th¸i n(E). Sè c¸c tr¹ng th¸i (trong mét ®¬n vÞ thÓ tÝch) cã n¨ng l-îng n»m trong kho¶ng E $\rightarrow$ E+dE lµ:

$$n(E).dE$$

n(E) lµ mËt ®é tr¹ng th¸i

$$n(E) = \frac{8\sqrt{2}\,\pi m^{3/2}}{h^3} E^{1/2} \qquad (2)$$

- Sù chiÕm ®Çy c¸c tr¹ng th¸i ë T = 0K. MËt ®é tr¹ng th¸i bþ chiÕm $n_0(E)$

$$n_0(E) = n(E).p(E) \qquad (3)$$

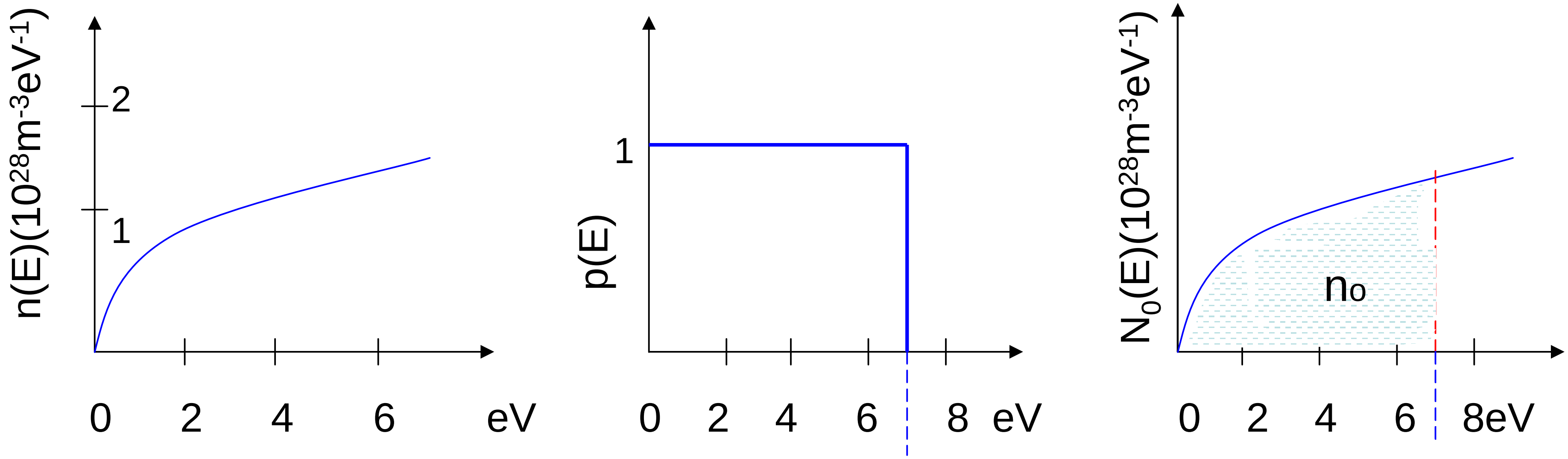
p(E) lµ hµm x¸c suÊt: víi $E \leq E_F$: p(E) = 1 bþ chiÕm

$E \geq E_F$: p(E) = 0 trèng

p(E) cßn gäi lµ x¸c suÊt møc E bþ chiÕm ®Çy

- MËt ®é ®iÖn tö dÉn

$$n = \int_0^{E_F} n(E)dE \qquad (4)$$



H×nh 12. 4

- N¨ng l- îng E_F

$$n = \frac{8\sqrt{2}\,\pi m^{3/2}}{h^3}\int_0^{E_F} E^{1/2}dE = \left(\frac{8\sqrt{2}\pi m^{3/2}}{h_3}\right)\left(\frac{2E_F^{3/2}}{3}\right)$$

Suy ra

$$E_F = \left(\frac{3}{16\sqrt{2}\pi} \right)^{2/3} \cdot \frac{h^2}{m} n^{2/3} \qquad (5)$$

- Sù chiÕm ®Çy c¸c tr¹ng th¸i ë T > 0

- Hµm x¸c suÊt khi T > 0:

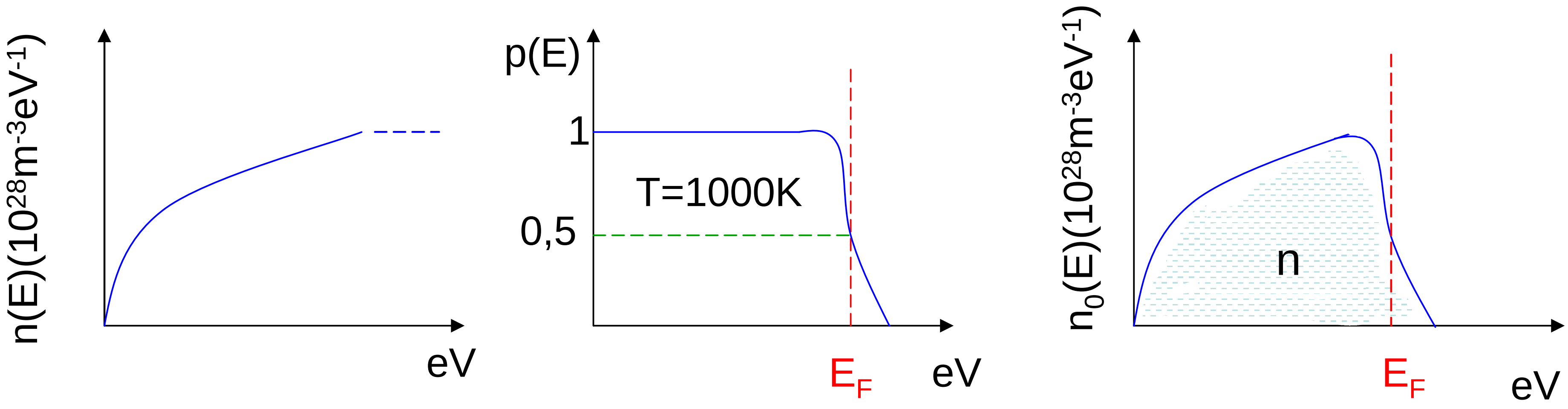
$$p(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} \qquad (6)$$

- Khi T $\rightarrow$ 0: víi E > E_F th× p(E) = 0

  E < E_F th× p(E) = 1

- Khi T > 0: E = E_F th× p(E_F) = 1/2 = 50%

T=800K $\begin{cases} E - E_F = 0,1\ eV \rightarrow p(E_F) = 0,19 = 19\% \text{ (x¸c suÊt bÞ chiÕm)} \\ E - E_F = -\ 0,1\ eV \rightarrow p(E_F) = 0,81 = 81\% \end{cases}$



H×nh 12. 5

V. ChÊt b¸n dÉn

5.1. B¸n dÉn thuÇn (s¹ch)

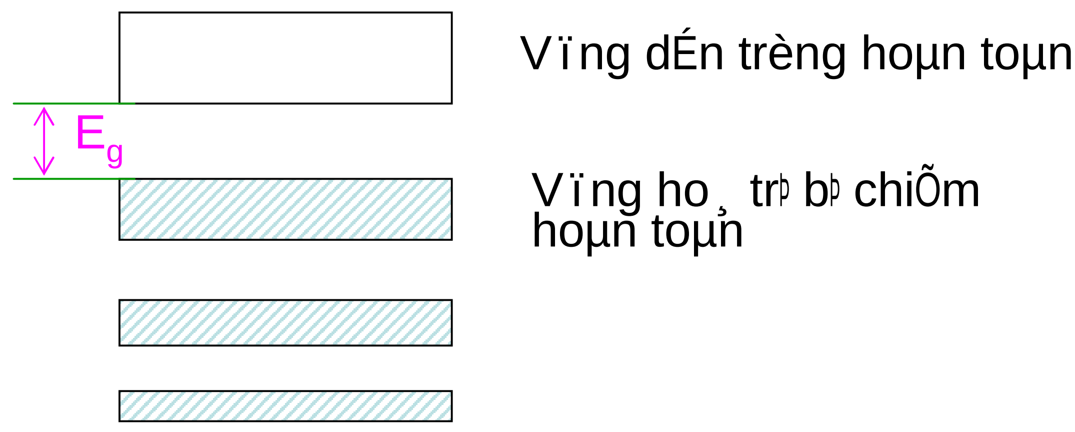
- Møc bÞ chiÕm cao nhÊt

≡ ®Ønh vïng (T=0)

E_g(BD) < E_g(C§)

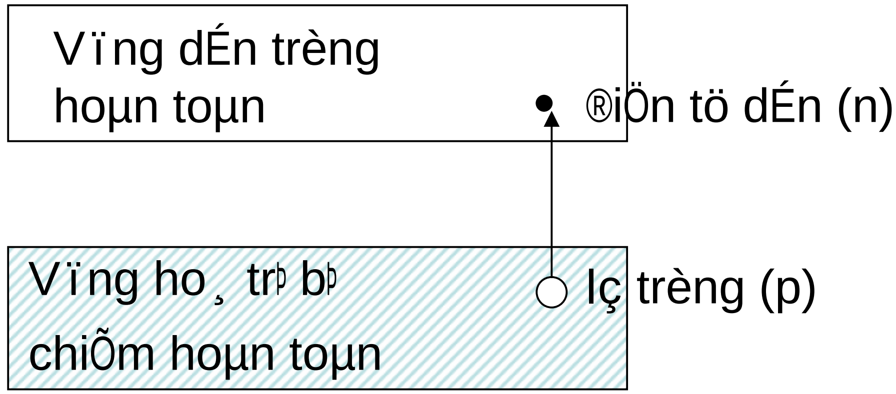
E_g(Si) = 1,1 eV

E_g(Ge) = 0,67 eV



H×nh 12.6

- T ≈ 300K: ®iÖn tö chuyÓn vïng ho¸ trþ → vïng dÉn



H×nh 12. 7

- Hai lo¹i h¹t mang ®iÖn:

®iÖn tö víi q < 0, nång ®é n, khi cã ®iÖn tr-êng → cùc (+)

lç trèng víi q > 0, nång ®é q, khi cã ®iÖn tr-êng → cùc (-)

$$n = p = n_i \quad (7)$$

- MËt ®é dßng ®iÖn: $j = nqv_n + pqv_p$ (8)

v_n , v_p : vËn tèc tr«i cña ®iÖn tö, lç trèng trong ®iÖn tr-êng

$q = 1,6.10^{-19}$C

- §é dÉn ®iÖn $\sigma = J / E$

$$\sigma = nq\mu_n + pq\mu_p = n_i q(\mu_n + \mu_p) \qquad (9)$$

μ_n, μ_p : ®é linh ®éng cña ®iÖn tö vµ lç trèng μ = v/E

- §iÖn trë suÊt

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{n_i q(\mu_n + \mu_p)} \qquad (10)$$

$$\rho(Si) > \rho(Cu) \quad do \quad n(Cu) > n(Si)$$

- HÖ sè nhiÖt ®iÖn trë

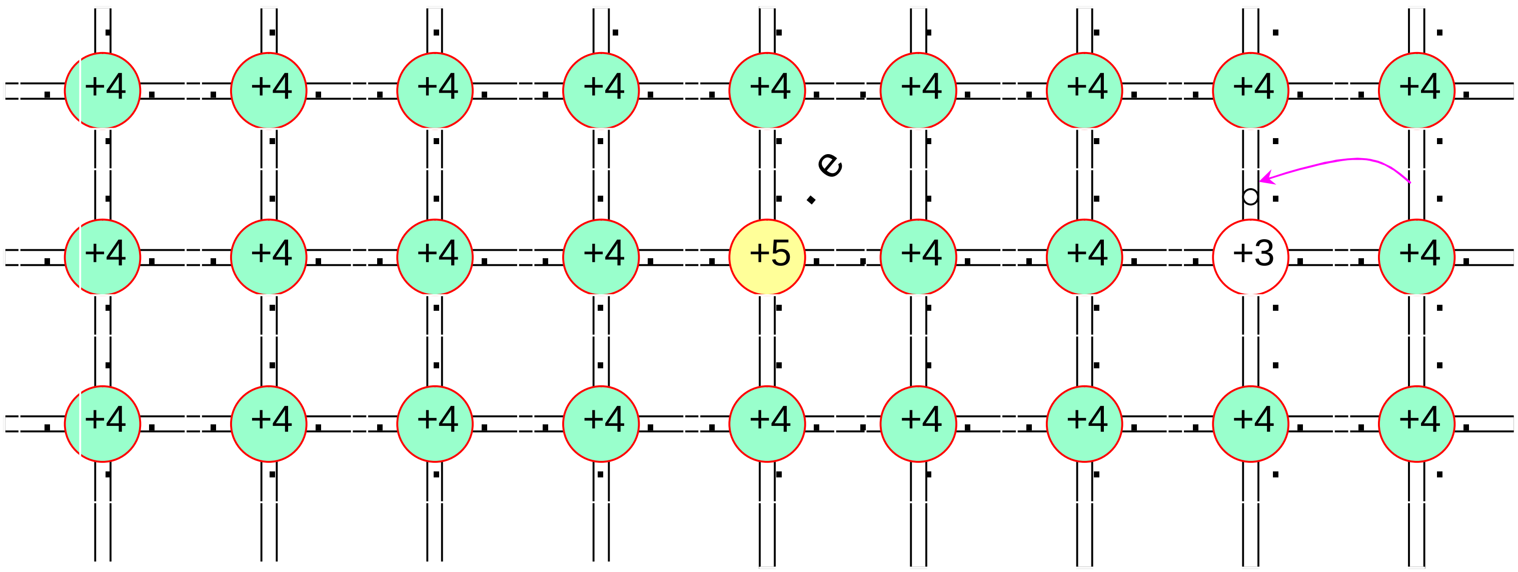
$$\alpha = \frac{1}{\rho}\frac{d\rho}{dT} \qquad (11)$$

víi b¸n dÉn : dρ/dT < 0 $\rightarrow$ α t¨ng khi T t¨ng

víi kim lo¹i : dρ/dT > 0 $\rightarrow$ α gi¶m khi T t¨ng

5.2. B¸n dÉn t¹p chÊt

* B¸n dÉn lo¹i n vµ p



(a) (b) (c)

Hình 12. 8

(a) M¹ng Si: lâi +4e, . ®iÖn tö ho¸ trÞ 4

(b) 1 nguyªn tö P (ho¸ trÞ 5) thay thÕ 1 nguyªn tö Si $\rightarrow$ lâi +5e vµ 1e thõa liªn kÕt láng lÎo víi lâi $\rightarrow$ e dÉn.

P lµ nguyªn tö cho (®«no) $\rightarrow$ b¸n dÉn lo¹i n

h¹t t¶i ®iÖn chñ yÕu: electron $q < 0$

h¹t t¶i ®iÖn thø yÕu: lç trèng $q > 0$

(c) Nguyªn tö Al (ho¸ trÞ 3) thay thÕ 1 nguyªn tö Si $\rightarrow$ lâi +3 vµ thiÕu 1 ®iÖn tö.

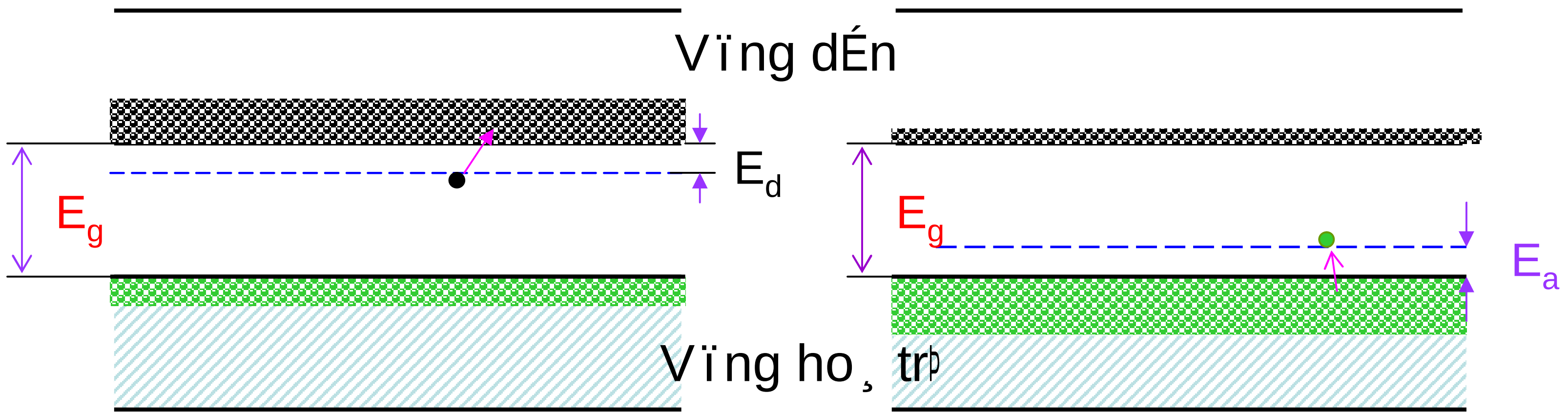
Al lµ nguyªn tö nhËn (axeptor) $\rightarrow$ b¸n dÉn lo¹i p

h¹t t¶i ®iÖn chñ yÕu: lç trèng $q > 0$

h¹t t¶i ®iÖn thø yÕu: electron $q < 0$ ë vïng dÉn

Chó ý: c¸c ion lâi P^{+1} vµ Al^{-1} kh«ng tham gia vµo dÉn ®iÖn, nã cè ®Þnh ë nót m¹ng.

- S¬ ®å vïng n¨ng lîng



B¸n dÉn lo¹i n B¸n dÉn lo¹i p

H×nh 12. 9

Vïng cÊm xuÊt hiÖn møc E_d díi ®¸y vïng dÉn, E_d << E_g (n – b¸n dÉn)

E_a trªn ®Ønh vïng ho¸ trÞ, E_a << E_g (p – b¸n dÉn)

ThÝ dô: E_a (B trong Si) ≈ 0,045 eV ~ 5% E_g

E_d (P trong Si) ≈ 0,044 eV ~ 5% Eg

Theo quan điểm vùng năng lượng:
Với n-bán dẫn, có 2 quá trình sinh ra hạt tải :
1. é từ vùng hóa trị nhảy lên vùng dẫn tạo ra é tự do nồng độ n_i ở vùng dẫn và lỗ trống nồng độ p_i ở vùng hóa trị ($p_i = n_i$).
2. é của nguyên tử tạp chất từ mức đono nhảy lên vùng dẫn,tạo ra é tự do nồng độ n trong vùng dẫn, còn nguyên tử tạp chất trở thành iondương,định xứ, ko tham gia vào quá trình dẫn điện.Do $E_d << E_g$ nên $n >> n_i$. Kết quả là nồng độ điện tử là $n + n_i$ lớn hơn lỗ trống p_i rất nhiều.

VÊn ®Ò trao ®æi – Bµi tËp

1. S¬ ®å vïng n¨ng l-îng: kim lo¹i – b¸n dÉn – c¸ch ®iÖn; n-b¸n dÉn vµ p-b¸n dÉn.
2. Gi¶i thÝch tÝnh chÊt ®iÖn cña c¸c vËt liÖu trªn c¬ së vïng n¨ng l-îng.
3. ThÕ nµo lµ møc n¨ng l-îng Fermi E_F ?
4. C¸c lo¹i h¹t t¶i ®iÖn trong b¸n dÉn: s¹ch, t¹p chÊt n, t¹p chÊt p ?
5. Ph©n biÖt c¸c kh¸i niÖm n, $n_0(E)$, p(E).
6. T¹i sao α b¸n dÉn t¨ng khi nhiÖt ®é t¨ng vµ víi kim lo¹i th× ng-îc l¹i ?