

# BÀI GIẢNG VẬT LÝ ĐẠI CƯỜNG

Tác giả: PGS. TS Đỗ Ngọc Uẩn

Viện Vật lý kỹ thuật

Trường ĐH Bách khoa Hà nội

# Chương 6

## CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

# 1. TÍNH SÓNG HẠT CỦA VẬT CHẤT TRONG THỂ GIỚI VI MÔ

## 1.1. Tính sóng hạt của ánh sáng

Tính sóng: Giao thoa, nhiễu xạ, phân cực;  $\lambda$ ,  $\nu$ .

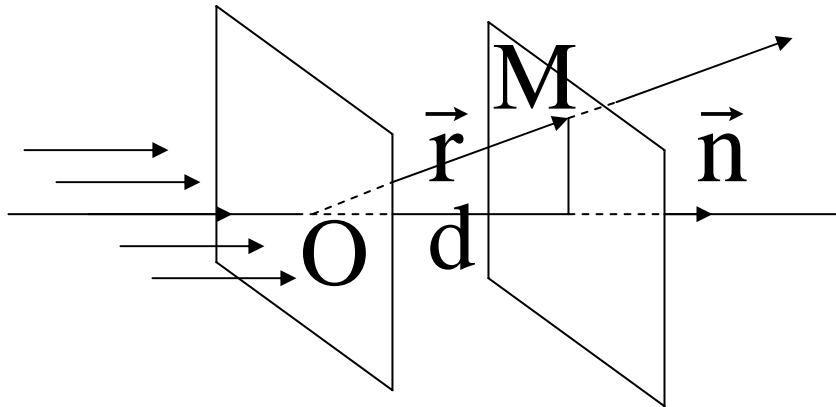
Tính hạt: Quang điện, Compton;  $\varepsilon$ ,  $p$ .

Liên hệ giữa hai tính sóng hạt:

Năng lượng:  $\varepsilon = h\nu$       Động lượng:  $p = \frac{h}{\lambda}$

Hàm sóng

Chiếu chùm ánh sáng song song, các mặt sóng cũng là mặt phẳng song song



Tại O dao động sáng:  $x_0 = A \cos 2\pi \nu t$

Tại điểm cắt mặt chứa M ánh sáng đi được d, và:

$$x_M = A \cos 2\pi \nu (t - d/c) = A \cos 2\pi (\nu t - d/\lambda)$$

$$d = r \cos \alpha = \vec{r} \cdot \vec{n} \quad x = A \cos 2\pi \left( \nu t - \frac{\vec{r} \cdot \vec{n}}{\lambda} \right)$$

Đây là sóng phẳng chạy, dạng phức:

$$\psi = \psi_0 e^{-2\pi i \left( \nu t - \frac{\vec{r} \cdot \vec{n}}{\lambda} \right)} \quad \text{hay} \quad \psi = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar} (\epsilon t - \vec{p} \cdot \vec{r})}$$

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \vec{p} = \hbar \vec{k} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$\psi = \psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$$

## 1.2. GIẢ THIẾT ĐỜIBRŌI (de Broglie)

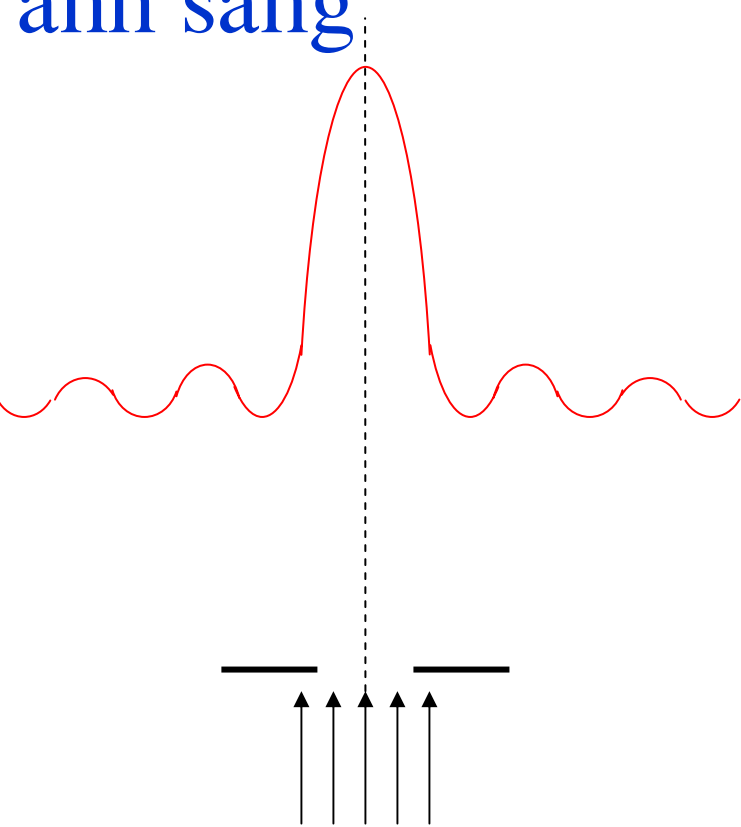
Một vi hạt tự do tùy ý có năng lượng xác định, động lượng xác định tương ứng với một sóng phẳng đơn sắc;

- a. **Năng lượng** của vi hạt liên hệ với tần số dao động của sóng tương ứng  $\varepsilon=h\nu$  hay  $\varepsilon = \hbar\omega$
- b. **Động lượng**  $\vec{p}$  của vi hạt liên hệ với bước sóng  $\lambda$  theo:  $p = \frac{h}{\lambda}$  hay  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

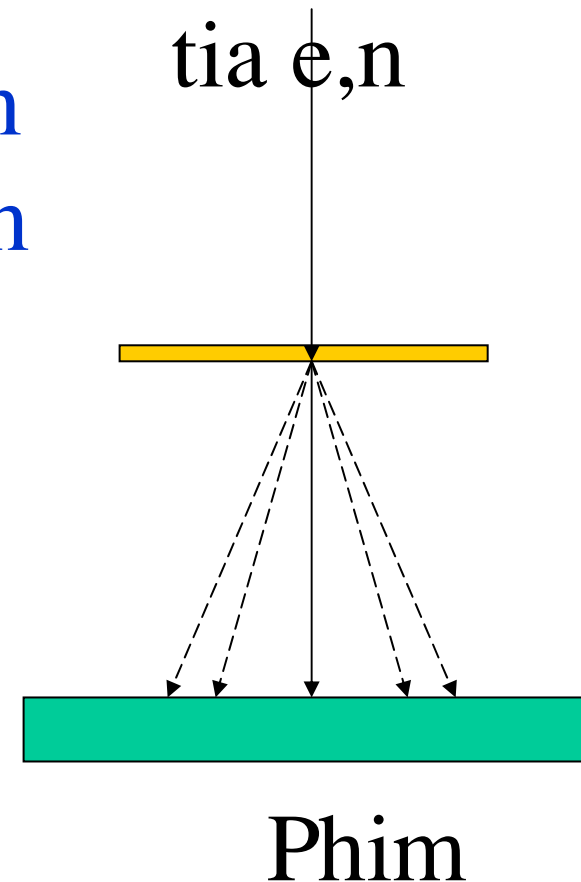
Tính sóng hạt là hai mặt đối lập biểu hiện sự mâu thuẫn bên trong của đối tượng vật chất

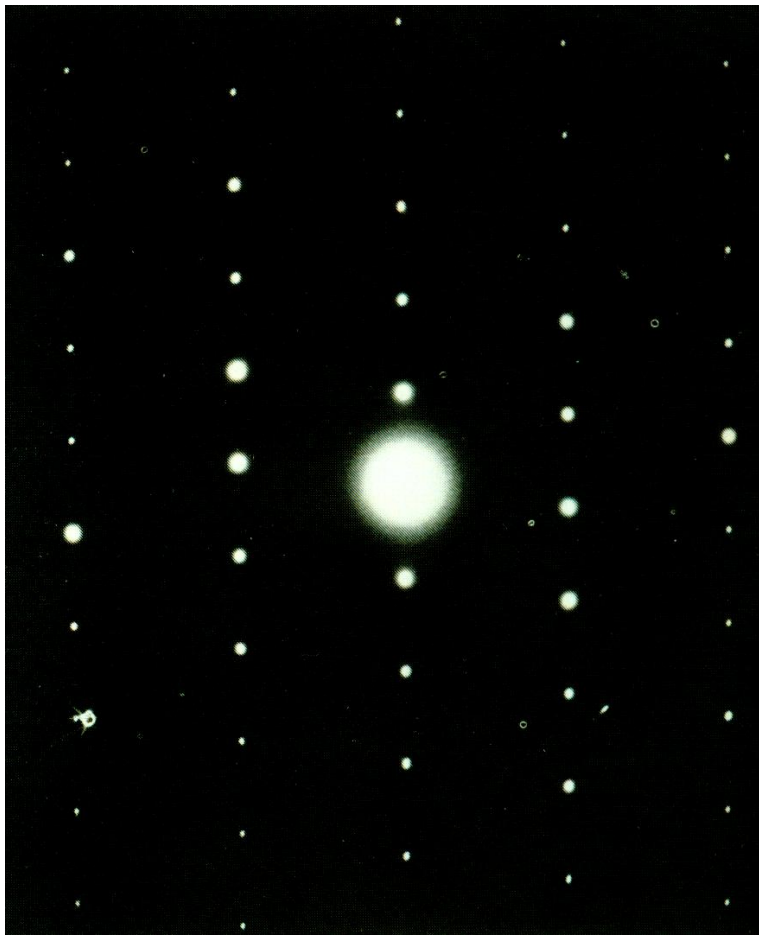
# 1.3. THỰC NGHIỆM CHỨNG MINH LƯỢNG TÍNH SÓNG HẠT CỦA VI HẠT

a. Nhiều xạ điện tử: Chiếu chùm tia điện tử qua khe hẹp, ảnh nhiễu xạ giống như đối với sóng ánh sáng

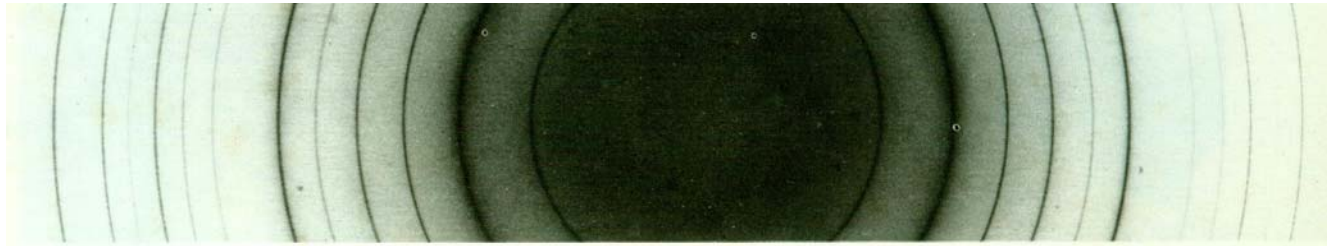


Nhiều xạ điện tử, neutron trên tinh thể





Nhiều xạ điện tử  
truyền qua trên  
tinh thể Si



Nhiều xạ truyền qua trên Bromid Thallium

# 2. HỆ THỨC BẤT ĐỊNH HAIĐENBÉC (Heisenberg)

## 2.1. Hệ thức bất định

Toạ độ của điện tử trong khe:

$$0 \leq x \leq b \Rightarrow \Delta x = b$$

Hình chiếu của động lượng  
lên trục x:  $0 \leq p_x \leq p \sin \varphi$

ứng với hạt rơi vào cực đại giữa

$$\Delta p_x \approx p \sin \varphi_1 \quad \sin \varphi_1 = \lambda / b$$

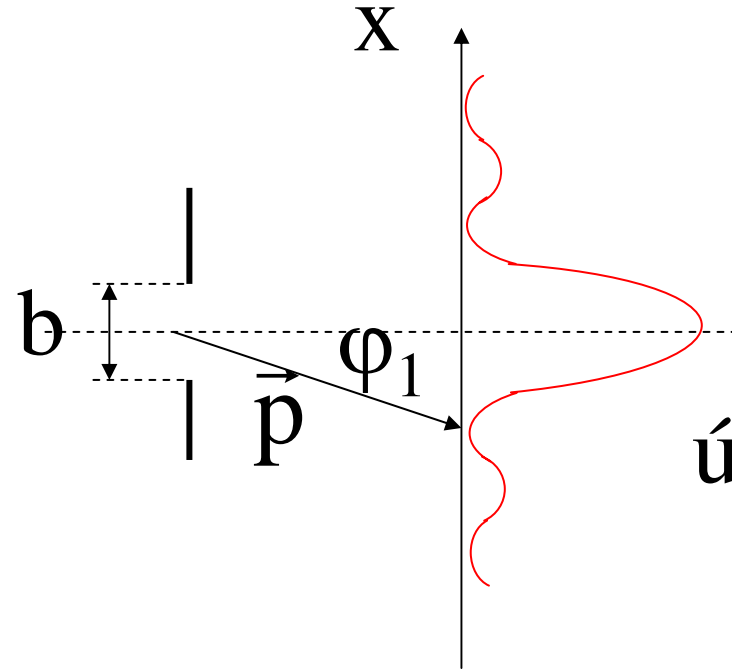
$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx p \lambda$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx h$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \approx h$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \approx h$$

**Ý nghĩa:** Vị trí và động lượng của vi hạt không xác định đồng thời





**Ví dụ:** Trong phạm vi nguyên tử  $\Delta x \sim 10^{-10} \text{m}$

Vận tốc điện tử có:

$$\Delta v_x = \frac{\Delta p_x}{m_e} \approx \frac{h}{m_e \Delta x} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-10}} \approx 7 \cdot 10^6 \text{ m/s}$$

$m_e \sim 10^{-31}$  vi hạt  $\rightarrow$  Vận tốc không xác định  $\rightarrow$   
không có quỹ đạo xác định

$m \sim 10^{-15} \text{kg}$ ,  $\Delta x \sim 10^{-8} \text{m}$  hạt lớn (Vĩ hạt): Vận tốc  
xác định  $\rightarrow$  Quỹ đạo xác định:

$$\Delta v_x \approx \frac{h}{m \cdot \Delta x} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{10^{-15} \cdot 10^{-8}} \approx 6,6 \cdot 10^{-11} \text{ m/s}$$

Hệ thức bất định đối với năng lượng  $\Delta W \cdot \Delta t \approx h$

$$\Delta W \approx h / \Delta t$$

Trạng thái có năng lượng bất định là trạng thái không bền, Trạng thái có năng lượng xác định là trạng thái bền

## 2.2 Ý NGHĨA TRIẾT HỌC CỦA HỆ THỨC BẤT ĐỊNH HEISENBERG:

**Duy tâm:** Hệ thức bất định phụ thuộc vào chủ quan của người quan sát: Xác định được quỹ đạo thì không xác định được năng lượng. Nhận thức của con người là giới hạn

**Duy vật:** Không thể áp đặt quy luật vận động vật chất trong cơ học cổ điển cho vi hạt. Cơ học cổ điển có giới hạn, nhận thức của con người không giới hạn, không thể nhận thức thế giới vi mô

bằng các khái niệm cổ điển.

Không thể xác định chính xác vị trí của vi hạt mà chỉ đoán nhận được khả năng tồn tại vi hạt ở một trạng thái nào đó.

Quy luật vận động của vi hạt tuân theo nguyên lý thống kê

### 3. HÀM SỐNG VÀ Ý NGHĨA THỐNG KÊ CỦA NÓ

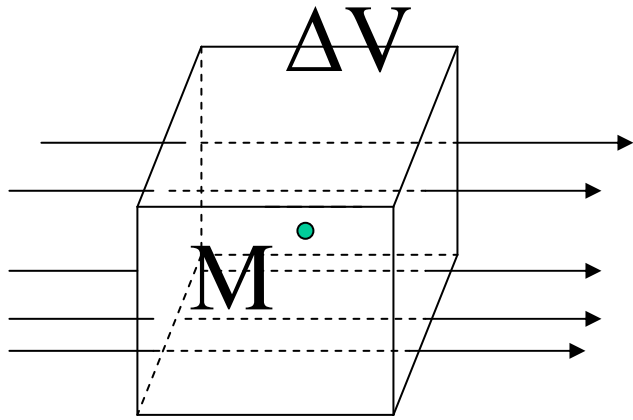
3.1. Hàm sóng: Chuyển động của vi hạt tự do (không chịu tác dụng lực bên ngoài) được mô tả bởi hàm sóng Đơ Bơri

$$\psi = \psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}$$

$$\psi_0^2 = |\psi|^2 = \psi\psi^*$$

$\psi^*$  Liên hợp phức của  $\psi$

## 3.2. Ý NGHĨA THỐNG KÊ CỦA HÀM SỐNG



sóng ánh sáng chiếu lên  $M$

cường độ sáng  $I \sim \psi_0^2$

$|\psi|^2$  càng lớn  $M$  càng sáng

-> số photon càng nhiều

$|\psi|^2$  tỷ lệ với khả năng có mặt của vi hạt trong  $\Delta V$

$|\psi|^2$  đặc trưng cho khả năng tìm thấy vi hạt trong

đơn vị thể tích quanh  $M$  gọi là mật độ xác suất

Xác suất tìm thấy hạt trong  $dV$  là  $|\psi|^2 dV$

Xác suất tìm thấy hạt

trong thể tích  $V$  là

$$\iiint_V |\psi|^2 dV$$

Trong toàn không gian  $\iiint_{T_{kg}} |\psi|^2 dV = 1$

Đây là **điều kiện chuẩn hoá** của hàm sóng  
Hàm sóng không mô tả một sóng cụ thể nào đó  
như sóng cơ hay sóng điện từ mà nó chỉ cho  
phép tính **mật độ xác suất tìm thấy vi hạt ở một  
trạng thái nào đó**

-> **Hàm sóng  $\psi$  mang tính thống kê**

Trong vật lý phân tử: Hệ nhiều hạt mới có tính  
thống kê (theo qui luật thống kê)

Trong cơ học lượng tử **qui luật thống kê** có quan  
hệ với ngay cả **một vi hạt riêng biệt**

### 3.3. ĐIỀU KIỆN CỦA HÀM SỐNG

- a. Hàm sóng **giới nội** = Điều kiện chuẩn hoá
- b. Hàm sóng phải **đơn trị**: mỗi trạng thái chỉ có 1 xác suất tìm hạt (theo lí thuyết xác suất)
- c. Hàm sóng phải **liên tục** vì mật độ xác suất không thể nhảy vọt.
- d. **Đạo hàm bậc nhất** của hàm sóng phải **liên tục**: rút ra điều kiện của phương trình hàm sóng

# 4. PHƯƠNG TRÌNH CƠ BẢN CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

Trong cơ học cổ điển có f/t cơ bản:  $\mathbf{ma}=\mathbf{F}$

Trong cơ học LT phải

tìm được hàm sóng  
của vi hạt

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

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t} \cdot \psi(\vec{r})$$

$\epsilon$  là năng lượng của vi hạt.

$\psi(\vec{r})$  là phần phụ thuộc vào không gian đáp ứng phương trình Schrödinger:

$$\Delta\psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} [\epsilon - U(\vec{r})]\psi(\vec{r}) = 0$$

Vai trò phương trình Schrodinger trong CHLT  
giống như f/t cơ bản trong cơ học cổ điển

$\Delta$  Toán tử Laplatz, trong toạ độ Đêcác:

$$\Delta\psi(\vec{r}) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(\vec{r})$$

$U(\vec{r})$  thế năng

Trong

không gian

một chiều:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right]\psi(x) = \varepsilon\psi(x)$$

Toán tử động lượng

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \text{Toán tử}$$

động năng

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$



Toán tử động năng:

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

Toán tử  
Haminton  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}$

Phương trình Schrodinger: Tác động toán tử Haminton lên hàm sóng cho giá trị riêng của năng lượng vi hạt  $\hat{H}\psi = \epsilon\psi$

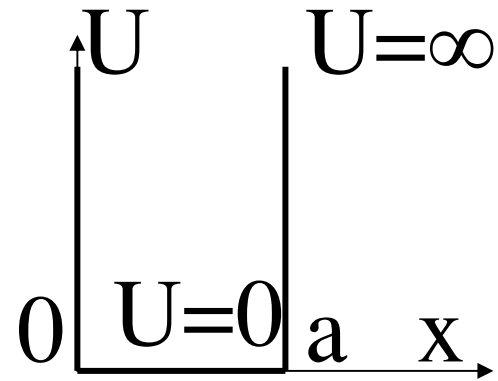
- Trong cơ học lượng tử các đại lượng vật lý đều là các **toán tử**, khi toán tử tác động lên hàm sóng cho giá trị riêng của đại lượng vật lý đó:

$$\hat{p}\psi = \hat{p}\psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} = \hbar\vec{k} \cdot \psi$$

$\vec{p} = \hbar\vec{k}$  giá trị riêng của động lượng

# 5. ỨNG DỤNG

## 5.1. Vi hạt trong giếng thế



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

Trong giếng thế  $U(x)=0$

Phương trình  
Schrodinger:

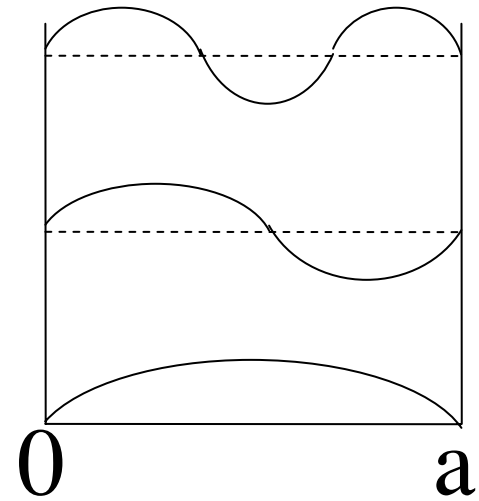
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = \varepsilon \psi(x)$$

Toán tử động năng tác động lên hàm sóng của vi hạt cho giá trị riêng của động năng vi hạt

Dạng hàm sóng:  $\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$

Điều kiện biên cố định  $\psi(0) = \psi(a) = 0$

$$\psi(x) = A \sin kx \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad a = n \frac{\lambda}{2} \quad k = \frac{n\pi}{a}$$



$\lambda$  là bước sóng Đơ broi của vi hạt

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\int_0^a A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx = 1 \quad A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

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

Mỗi trạng thái vi hạt ứng với một hàm sóng  $\psi_n(x)$

Thay  $\psi_n(x)$  vào phương trình Schrodinger

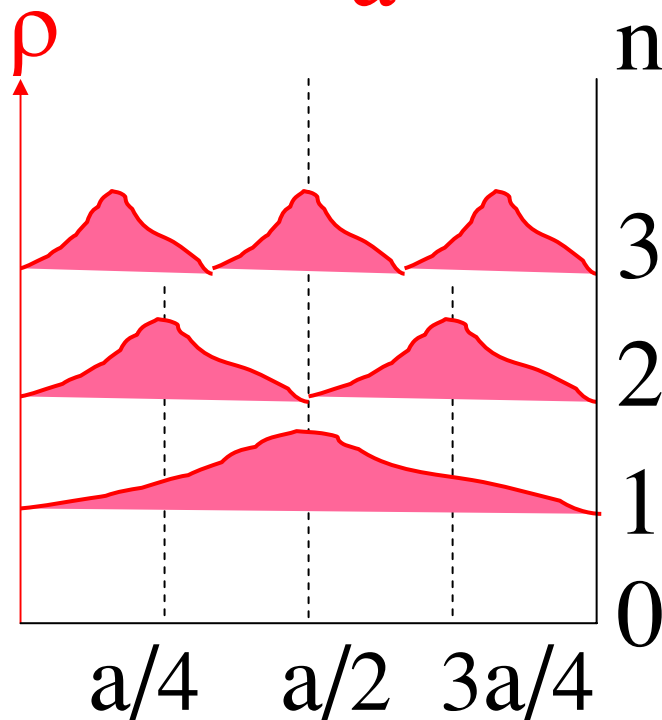
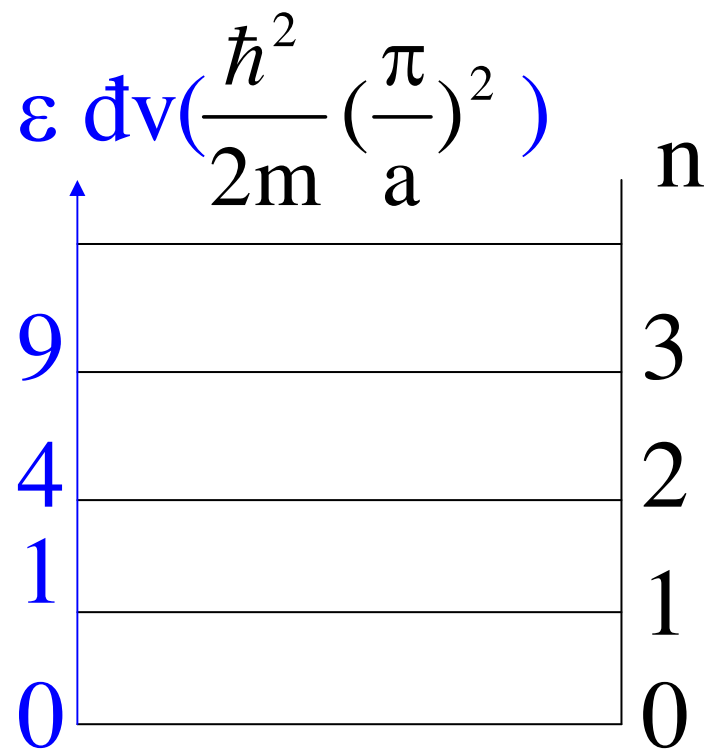
$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \psi_n(x) = \varepsilon \psi_n(x)$$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{a} \right)^2$$

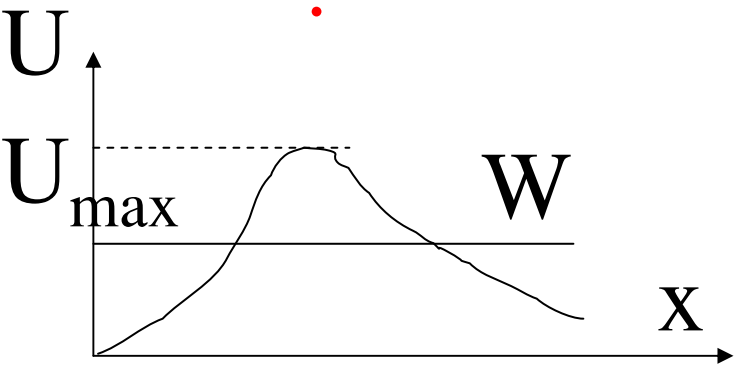
$\varepsilon \sim n^2$  Năng lượng vi hạt biến thiên gián đoạn: Năng lượng bị lượng tử hoá

Mật độ xác suất tồn tại vi hạt

$$\rho = \psi\psi^* = \frac{2}{a} \sin^2 \left( \frac{n\pi}{a} x \right)$$

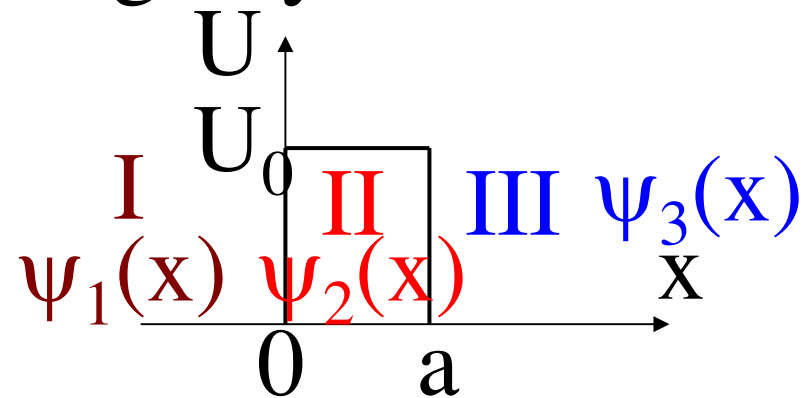


## 5.2. HIỆU ỨNG ĐƯỜNG HẦM



Đối với cơ cổ điển nếu năng lượng hạt  $W < U$  thì hạt không vượt qua được hàng rào thế

Đối với cơ học LT vi hạt có khả năng xuyên qua hàng rào thế cao hơn năng lượng của nó: Hiệu ứng xuyên hầm



$$U = \begin{cases} 0 & x \leq 0 \text{ miền I} \\ U_0 & 0 < x < a \text{ miền II} \\ 0 & x \geq a \text{ miền III} \end{cases}$$

# Phương trình Schrodinger cho ba vùng

miền I  $\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0$  với  $k_1^2 = \frac{2mW}{\hbar^2}$

miền II  $\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 = 0$  với  $k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - W)$

miền III  $\frac{d^2\psi_3}{dx^2} + k_1^2\psi_3 = 0$  với  $k_1^2 = \frac{2mW}{\hbar^2}$

**Nghiệm của các phương trình:**

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x}$$

$$\psi_3(x) = A_3 e^{ik_1(x-a)} + B_3 e^{-ik_1(x-a)}$$

Hệ số truyền qua  
/xuyên hầm

$$D = \frac{\Psi_3 \Psi_3^*}{\Psi_1 \Psi_1^*} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$$

Theo tính chất liên tục của hàm sóng và đạo hàm bậc nhất của hàm sóng.

Tại các bờ:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$\psi'_1(0) = \psi'_2(0)$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a)$$

$$\psi'_2(a) = \psi'_3(a)$$

Các hệ thức:

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2$$

$$ik_1(A_1 - B_1) = -k_2(A_2 + B_2)$$

$$A_2 e^{-k_2 a} + B_2 e^{k_2 a} = A_3$$

$$-k_2(A_2 e^{-k_2 a} + B_2 e^{k_2 a}) = ik_1 A_3$$

$B_3 = 0$ , không có sóng phản xạ từ vô cùng

Từ 2 phương trình cuối xác định  $A_2, B_2$  qua  $A_3$

$$A_2 = \frac{1 - in}{2} A_3 e^{k_2 a}$$

$$B_2 = \frac{1 + in}{2} A_3 e^{-k_2 a}$$

Coi  $W \ll U_0$  hoặc  
bề rộng của hàng  
rào lớn  $k_2 a \gg 1$

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

$$A_1 = \frac{(1 - in)(1 + \frac{i}{n})}{4n} A_3 e^{k_2 a}$$

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

$$\frac{16n^2}{(1 + n^2)} \sim 1 \quad (U_0 \sim 10W)$$

$$D = e^{-2k_2 a} = e^{-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - W)}}$$



Mặc dù  $W < U_0$  vẫn có hạt xuyên qua hàng rào thế

Với điện tử  $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ ,  $U_0 - W = 1,28 \cdot 10^{-31} \text{ J}$

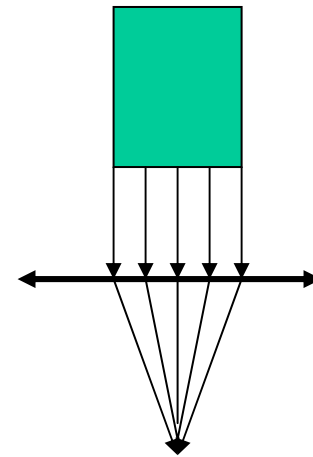
a(m)	$10^{-10}$	$1,5 \cdot 10^{-10}$	$2 \cdot 10^{-10}$	$5 \cdot 10^{-10}$
D	0,1	0,03	0,008	$5 \cdot 10^{-7}$

D đáng kể khi a nhỏ: Hiệu ứng xuyên hầm chỉ xảy ra ở kích thước vi mô

=> Tính sóng của vi hạt

Phát xạ điện tử lạnh

Phân rã hạt  $\alpha$



## 5.3. DAO TỬ ĐIỀU HOÀ

Vi hạt chuyển động theo phương x trong trường thế  $U = \frac{1}{2} kx^2$  dao động ion,ngử

Thế năng  $U = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$

phương trình Schrodinger  $\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( \varepsilon - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0$

Giải ra có năng lượng  $\varepsilon_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$  n=0 có  $\varepsilon_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$   
Năng lượng “Không”: ngay cả khi T=0 vẫn có

dao động => Phù hợp với hệ thức bất định:

$\Delta x=0$  thì  $\Delta p_x$  vẫn khác 0

## 5.4. QUAY TỬ

Vi hạt chuyển động tự do trên một mặt cầu xác định

=> ứng dụng N/C phân tử 2 nguyên tử, H

$$V(r)=V(a)=\text{const} \rightarrow \text{Chọn } V(a)=0$$

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

Giải ra tìm được năng lượng  $\varepsilon_\ell = \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2ma^2}$

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$$

năng lượng quay tử cũng gián đoạn: lượng tử hoá