

Hạt trong hộp ba chiều – sự suy biến

Lý Lê

Ngày 27 tháng 7 năm 2009

Tóm tắt nội dung

Hiện tượng suy biến của các mức năng lượng là một hiện tượng khá phổ biến đối với các hệ vi mô. Chúng ta sẽ bước đầu tìm hiểu hiện tượng này thông qua việc khảo sát năng lượng của hạt chuyển động trong không gian ba chiều. Từ kết quả bài toán hạt trong hộp chữ nhật, chúng ta sẽ tính các giá trị trung bình như vị trí và động lượng của hạt.

1 Phương trình Schrödinger cho hệ một hạt trong không gian ba chiều

Phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian cho hệ một hạt, trong không gian một chiều được viết như sau

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

với E là năng lượng; \hat{H} là toán tử Hamiltonian

$$\hat{H} = \hat{T}_x + \hat{V}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (2)$$

Trong (2), toán tử \hat{T}_x là toán tử động năng; $\hat{V}(x)$ là toán tử thế năng.

Trong không gian ba chiều, động năng cũng như thế năng của hệ phụ thuộc vào cả ba thành phần tọa độ x, y, z

$$\hat{V} = V(x, y, z) \quad (3)$$

$$\hat{T} = \hat{T}_x + \hat{T}_y + \hat{T}_z = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (4)$$

Do đó, phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian cho hệ một hạt, trong không gian ba chiều có dạng

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \right] \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (5)$$

Trong (5), toán tử

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (6)$$

được gọi là **toán tử Laplacian** (∇^2 – *del bình phương*). Như vậy, phương trình Schrödinger (5) có thể được viết gọn hơn như sau

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z) \right] \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (7)$$

Nếu hệ gồm n hạt thì động năng của hệ bằng tổng động năng của các hạt trong hệ. Do đó, ta có

$$\hat{T} = \sum_{i=1}^n \hat{T}_i = -\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \quad (8)$$

Thế năng là hàm phụ thuộc vào tọa độ của các hạt trong hệ

$$V = V(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) = V(q_1, \dots, q_n) \quad (9)$$

Hàm trạng thái của hệ cũng sẽ phụ thuộc vào tọa độ của tất cả các hạt trong hệ

$$\psi = \psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) = \psi(q_1, \dots, q_n) \quad (10)$$

Như vậy, đối với hệ nhiều hạt, trong không gian ba chiều, phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian là

$$\left[\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + V(q_1, \dots, q_n) \right] \psi(q_1, \dots, q_n) = E\psi(q_1, \dots, q_n) \quad (11)$$

Ví dụ, phương trình Schrödinger cho một hệ gồm hai hạt chuyển động và tương tác với nhau, trong không gian ba chiều được viết như sau

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 + \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(q_1, q_2) \right] \psi(q_1, q_2) = E\psi(q_1, q_2)$$

Trong đó $q_1 = x_1, y_1, z_1$ và $q_2 = x_2, y_2, z_2$ là tọa độ của hạt thứ nhất và hạt thứ hai.

2 Hạt trong hộp ba chiều

$$V(x, y, z) = 0 \quad \text{bên trong vùng} \quad \begin{cases} 0 < x < a \\ 0 < y < b \\ 0 < z < c \end{cases}$$

$$V = \infty \quad \text{ở những nơi khác}$$

Hộp mà chúng ta sẽ xét đến là hộp chữ nhật với độ dài các cạnh là a , b , và c . Hệ tọa độ được chọn sao cho một trong các đỉnh của hộp nằm tại gốc tọa độ và các trục x, y, z là ba trong số 12 cạnh của hộp. Thế năng bên trong hộp là zero; ngoài hộp là vô cùng.

Với điều kiện như trên, ta kết luận rằng hàm sóng bằng zero ở bên ngoài hộp. Bên trong hộp, toán tử thế năng bằng zero, nên phương trình sóng Schrödinger không phụ thuộc thời gian sẽ là

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (12)$$

Giả sử nghiệm của phương trình (12) được viết dưới dạng tích của ba hàm $X(x)$, $Y(y)$, và $Z(z)$ chứa các biến số x, y, z độc lập; nghĩa là

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z) \quad (13)$$

Phương pháp được dùng để giải phương trình vi phân như trên được gọi là **phương pháp tách biến** (seperation of variables).

Thế (13) vào (12), nhưng để đơn giản ta viết X, Y, Z thay vì $X(x), Y(y), Z(z)$, ta được

$$\frac{\partial^2(XYZ)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(XYZ)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2(XYZ)}{\partial z^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E(XYZ) \quad (14)$$

Vì YZ không phải là hàm của x ; XZ không phải là hàm của y ; XY không phải là hàm của z nên ta có

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2(XYZ)}{\partial x^2} &= YZ \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} \\ \frac{\partial^2(XYZ)}{\partial y^2} &= XZ \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} \\ \frac{\partial^2(XYZ)}{\partial z^2} &= XY \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} \end{aligned}$$

Do đó, (14) trở thành

$$YZ \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + XZ \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + XY \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E(XYZ) \quad (15)$$

Chia phương trình (15) cho XYZ , ta được

$$\frac{1}{X} X'' + \frac{1}{Y} Y'' + \frac{1}{Z} Z'' = -\frac{2m}{\hbar^2} E \quad (16)$$

hay

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{X''(x)}{X(x)} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{Y''(y)}{Y(y)} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{Z''(z)}{Z(z)} = E \quad (17)$$

Từ đó, ta có

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{X''(x)}{X(x)} = E + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{Y''(y)}{Y(y)} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{Z''(z)}{Z(z)} \quad (18)$$

Ta thấy vế trái của phương trình (18) hoàn toàn không phụ thuộc vào các biến y và z . Trong khi đó, vế phải của (18) hoàn toàn không phụ thuộc vào biến x . Như vậy để hai vế phương trình bằng nhau thì phương trình phải bằng một hằng số. Đặt hằng số này là E_x , ta có

$$E_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{X''(x)}{X(x)} \quad (19)$$

Lập luận tương tự như trên, ta được

$$E_y = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{Y''(y)}{Y(y)} ; \quad E_z = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{Z''(z)}{Z(z)} \quad (20)$$

Kết hợp với (19) và (20), phương trình (18) trở thành

$$E = E_x + E_y + E_z \quad (21)$$

Ta viết lại các phương trình (19) và (20) như sau

$$X''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E_x X(x) = 0 \quad (22)$$

$$Y''(y) + \frac{2m}{\hbar^2} E_y Y(y) = 0 \quad (23)$$

$$Z''(z) + \frac{2m}{\hbar^2} E_z Z(z) = 0 \quad (24)$$

Tóm lại, chúng ta đã chuyển một phương trình vi phân riêng phần với ba biến thành ba phương trình vi phân chỉ chứa một biến. Ta thấy (22) chính là phương trình Schrödinger cho hạt trong hộp một chiều với thế năng trong hộp $V(x) = 0$ và chiều dài là $l = a$. Như vậy, nghiệm của (22) là

$$X(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \quad (25)$$

$$E_x = \frac{n_x^2 \hbar^2}{8ma^2} \quad (n_x = 1, 2, 3, \dots) \quad (26)$$

Tương tự, ta có

$$Y(y) = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin\left(\frac{n_y \pi y}{b}\right) \quad (27)$$

$$E_y = \frac{n_y^2 \hbar^2}{8mb^2} \quad (n_y = 1, 2, 3, \dots) \quad (28)$$

và

$$Z(z) = \sqrt{\frac{2}{c}} \sin\left(\frac{n_z \pi z}{c}\right) \quad (29)$$

$$E_z = \frac{n_z^2 h^2}{8mc^2} \quad (n_z = 1, 2, 3, \dots) \quad (30)$$

Như vậy, năng lượng của hệ

$$E = E_x + E_y + E_z = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) \quad (31)$$

Hàm sóng của hạt trong hộp chữ nhật

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z) &= X(x)Y(y)Z(z) \\ \psi(x, y, z) &= \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{b}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{c}\right) \end{aligned} \quad (32)$$

Trong đó, a, b, c là độ dài của các cạnh theo các trục x, y, z tương ứng. Hàm sóng có ba số lượng tử n_x, n_y và n_z . Chúng biến đổi một cách độc lập với nhau.

Hàm sóng có dạng

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$$

được chuẩn hóa như sau

$$\begin{aligned} \int \int \int |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz &= \int \int \int |X(x)Y(y)Z(z)|^2 dx dy dz \\ &= \int |X(x)|^2 dx \int |Y(y)|^2 dy \int |Z(z)|^2 dz \\ &= 1 \end{aligned}$$

hay

$$\int |X(x)|^2 dx = \int |Y(y)|^2 dy = \int |Z(z)|^2 dz = 1 \quad (33)$$

3 Sự suy biến

Xét hộp có dạng hình lập phương, $a = b = c$. Khi đó, các mức năng lượng được xác định bởi

$$E = \frac{h^2}{8ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (34)$$

Năng lượng thấp nhất hay năng lượng điểm không của hạt, ứng với trạng thái $n_x = n_y = n_z = 1$, là

$$E_{111} = 3 \times \frac{h^2}{8ma^2}$$

bằng ba lần năng lượng của hạt trong hộp một chiều có dùng độ dài. Các mức năng lượng tiếp theo thu được khi tăng dần các giá trị n_x, n_y, n_z . Ví dụ, khi tăng một số lượng tử lên 2, giữa nguyên hai số lượng tử còn lại là 1, ta sẽ có 3 giá trị $E_{211}, E_{121}, E_{112}$. Với bộ ba số lượng tử $(1, 1, 2)$ thì

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 6$$

Do đó

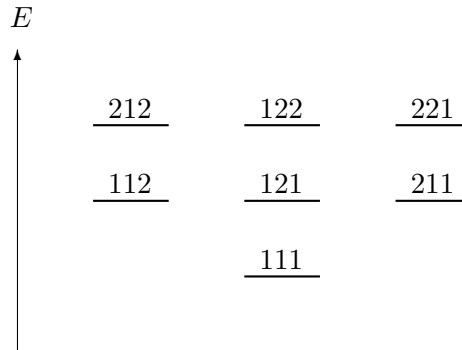
$$E_{211} = E_{121} = E_{112} = 6 \times \frac{h^2}{8ma^2}$$

Tương tự, với bộ ba số lượng tử $(1, 1, 3)$ thì

$$E_{311} = E_{131} = E_{113} = 11 \times \frac{h^2}{8ma^2}$$

$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$	$n_x n_y n_z$	E	Bậc suy biến
3	111	$3(h^2/8ma^2)$	1
6	211 121 112	$6(h^2/8ma^2)$	3
9	221 212 122	$9(h^2/8ma^2)$	3
11	311 131 113	$11(h^2/8ma^2)$	3
12	222	$12(h^2/8ma^2)$	1
14	321 312 231 213 132 123	$14(h^2/8ma^2)$	6

Bảng 1.1: Một số mức năng lượng thấp nhất của hạt trong hộp



Hình 1.1: Một số mức năng lượng thấp nhất của hạt trong hộp

Chúng ta thấy có những trạng thái mà năng lượng của hạt bằng nhau mặc dù số lượng tử khác nhau. Ví dụ, ứng với giá trị

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 6 \Rightarrow E = 6(h^2/8ma^2)$$

có đến ba trạng thái là

n_x	n_y	n_z	Trạng thái
1	1	2	ψ_{112}
1	2	1	ψ_{121}
2	1	1	ψ_{211}

Như vậy, ứng với mức năng lượng $E = 6(h^2/8ma^2)$, hạt trong hộp lập phương được mô tả bởi ba hàm sóng

$$\begin{aligned}\psi_{112} &= \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi z}{a}\right) \\ \psi_{121} &= \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi z}{a}\right) \\ \psi_{211} &= \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi z}{a}\right)\end{aligned}$$

Ba hàm sóng $\psi_{211}, \psi_{121}, \psi_{112}$ mô tả ba trạng thái khác nhau của hệ với cùng mức năng lượng. Khi hai hay nhiều hàm sóng tương ứng với những trạng thái có cùng đặc trị năng lượng thì đặc trị này được gọi là **suy biến** (degenerate). Bậc suy biến của một mức năng lượng là số trạng thái mà mức năng lượng đó có. Trong ví dụ trên ta có suy biến bậc ba: có ba trạng thái cùng mức năng lượng $E = 6(h^2/8ma^2)$.

4 Sự chồng chất các trạng thái suy biến

Xét một trạng thái suy biến bậc n , nghĩa là có n hàm sóng độc lập $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_n$ cùng mức năng lượng E . Ta có

$$\hat{H}\psi_1 = E\psi_1; \quad \hat{H}\psi_2 = E\psi_2; \quad \dots \quad \hat{H}\psi_n = E\psi_n \quad (35)$$

Theo nguyên lí chồng chất, nếu $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_n$ là những trạng thái của một hệ thì trạng thái được xác định bởi

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_n\psi_n \quad (36)$$

cũng là một trạng thái của hệ. Thật vậy, từ (36), ta có

$$\hat{H}\psi = \hat{H}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_n\psi_n) \quad (37)$$

Toán tử năng lượng \hat{H} là toán tử tuyến tính. Do đó

$$\hat{H}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_n\psi_n) = c_1\hat{H}\psi_1 + c_2\hat{H}\psi_2 + \dots + c_n\hat{H}\psi_n \quad (38)$$

Thế (35) vào (38), ta được

$$\begin{aligned}\hat{H}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_n\psi_n) &= c_1E\psi_1 + c_2E\psi_2 + \dots + c_nE\psi_n \\ &= E(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_n\psi_n)\end{aligned}$$

vì $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_n\psi_n$ nên phương trình trên trở thành

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (39)$$

Từ kết quả trên, ta thấy hàm tổ hợp tuyến tính ψ cũng là một đặc hàm của toán tử Hamiltonian với cùng đặc trị năng lượng E . Do đó, nó cũng là một trạng thái của hệ.

Nếu hệ suy biến bậc hai thì ta chỉ có một trạng thái tổ hợp tuyến tính

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$$

Khi bậc suy biến lớn hơn hai, sẽ có rất nhiều trạng thái tổ hợp tuyến tính được tạo ra. Ví dụ, với trường hợp suy biến bậc ba, ta có các trạng thái tổ hợp tuyến tính như sau

$$\begin{aligned}\psi_{12} &= c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \\ \psi_{13} &= c_1\psi_1 + c_3\psi_3 \\ \psi_{23} &= c_2\psi_2 + c_3\psi_3 \\ \psi_{123} &= c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + c_3\psi_3\end{aligned}$$

Các trạng thái này đều có cùng mức năng lượng.

5 Giá trị trung bình

Tiến hành n phép thử. Giả sử B là đại lượng ngẫu nhiên nhận các giá trị có thể b_1, b_2, \dots, b_n với số lần nhận là k_1, k_2, \dots, k_n . Giá trị trung bình của đại lượng ngẫu nhiên B trong n phép thử là

$$\bar{b} = \langle b \rangle = \frac{1}{n}(k_1b_1 + k_2b_2 + \dots + k_nb_n) = \sum_i \frac{k_i}{n}b_i = \sum_i f_i b_i \quad (40)$$

với $f_i = \frac{k_i}{n}$ là tần suất để B nhận giá trị b_i . Ví dụ, khi tiến hành khảo sát điểm thi của 9 sinh viên, ta có kết quả như sau 0,20,20,60,60,80,80,80,100. Điểm trung bình trong trường hợp này là

$$\frac{1}{n} \sum_i k_i b_i = \frac{1}{9}\{1(0) + 2(20) + 2(60) + 3(80) + 1(100)\} = 56$$

Khi n đủ lớn thì tỉ số $\frac{k_i}{n}$ chính là xác suất quan sát thấy giá trị b_i , kí hiệu là P_i , ta có

$$\langle b \rangle = \sum_i P_i b_i \quad (41)$$

và giá trị trung bình $\langle b \rangle$ được gọi là giá trị kì vọng.

Bây giờ, giả sử chúng ta muốn xác định vị trí của một hạt đang ở trạng thái $\psi(x)$. Theo Born, $|\psi(x)|^2$ là xác suất tìm thấy hạt tại vị trí x . Điều này có nghĩa là các phép đo tọa độ x không cho một kết quả duy nhất. Nếu ta

thực hiện phép đo nhiều lần thì ta sẽ thu được nhiều giá trị khác nhau. Do đó, có thể ta sẽ phải tính giá trị trung bình $\langle x \rangle$ cho những phép đo này. Tọa độ x có giá trị liên tục, và xác suất tìm thấy hạt là hàm mật độ xác suất $|\Psi|^2$ nên giá trị trung bình $\langle x \rangle$ được tính như sau

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* x \psi dx \quad (42)$$

Ở đây, chúng ta xem giá trị trung bình là giá trị kì vọng. Theo lí thuyết xác suất thống kê, giả sử X là đại lượng ngẫu nhiên liên tục có hàm mật độ xác suất $f(x)$. Kì vọng của đại lượng ngẫu nhiên X được xác định bởi

$$E_X = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) dx$$

Tổng quát, giá trị trung bình của một thuộc tính B được xác định bởi

$$\langle B \rangle = \int \psi^* B \psi dx \quad (43)$$

Khi áp dụng vào cơ học lượng tử thì thuộc tính B sẽ được thay thế bằng toán tử \hat{B} của thuộc tính đó. Như vậy (43) trở thành

$$\langle B \rangle = \int \psi^* \hat{B} \psi dx \quad (44)$$

Trong trường hợp đặc biệt, nếu ψ là một đặc hàm của \hat{B} với đặc trị β ; nghĩa là

$$\hat{B}\psi = \beta\psi$$

thì ta có

$$\langle B \rangle = \int \psi^* \hat{B} \psi dx = \int \psi^* \beta \psi dx = \beta \int \psi^* \psi dx = \beta \quad (45)$$

vì

$$\int \psi^* \psi dx = 1$$

do hàm ψ được chuẩn hóa. Như vậy, giá trị trung bình cũng chính là đặc trị. Nói cách khác, đặc trị β của toán tử \hat{B} là kết quả duy nhất ta thu được khi thực hiện phép đo thuộc tính B được mô tả bởi \hat{B} .

Ví dụ: Tìm $\langle x \rangle$ và $\langle p_x \rangle$ cho hạt trong hộp chữ nhật, ở trạng thái cơ bản.

Ta có

$$\langle x \rangle = \int_0^a \int_0^b \int_0^c \psi^*(x, y, z) \hat{x} \psi(x, y, z) dx dy dz$$

Với $\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$ và $\hat{x} = x$, ta được

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \int_0^a \int_0^b \int_0^c X^* Y^* Z^* x X Y Z dx dy dz \\ &= \int_0^a X^* x X dx \int_0^b Y^* Y dy \int_0^c Z^* Z dz \\ &= \int_0^a X^* x X dx\end{aligned}$$

vì

$$\int_0^b Y^* Y dy = \int_0^c Z^* Z dz = 1$$

Do đó

$$\langle x \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2 \left(\frac{\pi x}{a} \right) dx = \frac{a}{2}$$

Tương tự, ta có

$$\begin{aligned}\langle p_x \rangle &= \int_0^a \int_0^b \int_0^c X^* Y^* Z^* \hat{p}_x X Y Z dx dy dz \\ &= \int_0^a X^* \hat{p}_x X dx \int_0^b Y^* Y dy \int_0^c Z^* Z dz \\ &= \int_0^a X^* \hat{p}_x X dx\end{aligned}$$

với $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$, ta được

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \int_0^a X^*(x) \frac{d}{dx} X(x) dx = -i\hbar \int_0^a X(x) X'(x) dx$$

vì $X(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left(\frac{\pi x}{a} \right)$ là hàm thực nên $X^*(x) = X(x)$.

Áp dụng công thức tích phân từng phần, đặt

$$u = X(x); dv = X'(x) dx \Rightarrow du = X'(x) dx; v = X(x)$$

Ta có

$$\begin{aligned}\int_0^a X(x) X'(x) dx &= X^2(x) \Big|_0^a - \int_0^a X(x) X'(x) dx \\ \Rightarrow \int_0^a X(x) X'(x) dx &= \frac{1}{2} X^2(x) \Big|_0^a = 0\end{aligned}$$

Vì $X(0) = X(a) = 0$. Như vậy

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \int_0^a X(x) X'(x) dx = 0$$

Bài tập

1. Viết phương trình Schrödinger cho nguyên tử He gồm một hạt nhân và hai electron. Xem hạt nhân được cố định (đứng yên) tại gốc tọa độ. Cho biết công thức tính thế năng tương tác giữa các hạt mang điện là

$$V_{ij} = k \frac{q_i q_j}{r_{ij}^2}$$

Trong đó, k là hằng số; q_i, q_j là điện tích của các hạt mang điện; r_{ij} là khoảng cách giữa i và j .

2. Giải phương trình sau theo phương pháp tách biến số

$$\frac{\partial^2 U(x, y)}{\partial x^2} - \frac{\partial U(x, y)}{\partial y} = 0$$

Với

$$U(x, y) = X(x)Y(y)$$

3. Trong cơ học lượng tử thì khái niệm trạng thái và mức năng lượng là không giống nhau. Giả sử một hạt khối lượng m trong hộp lập phương với độ dài mỗi cạnh là a có các mức năng lượng $E < 20 \frac{\hbar^2}{8ma^2}$. Như vậy, có tất cả bao nhiêu trạng thái ứng và bao nhiêu mức năng lượng thỏa mãn điều kiện trên?

4. Tính các giá trị trung bình $\langle x^2 \rangle$, $\langle x \rangle^2$, $\langle p_x^2 \rangle$ và $\langle p_x \rangle^2$ cho hạt ở trạng thái cơ bản trong hộp hình chữ nhật. Từ đó tính

$$\Delta x \Delta p_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \times \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2}$$

So sánh kết quả $\Delta x \Delta p_x$ với $\frac{h}{2\pi}$.

Cho công thức tính tích phân

$$\int x \sin^2(kx) dx = \frac{x^2}{4} - \frac{x}{4k} \sin(2kx) - \frac{1}{8k^2} \cos(2kx)$$

$$\int x^2 \sin^2(kx) dx = \frac{x^3}{6} - \left(\frac{x^2}{4k} - \frac{1}{8k^3} \right) \sin(2kx) - \frac{x}{4k^2} \cos(2kx)$$