Hình thức luận
(Formalism)

1

Hình thức luận

- Mô hình toán học có cấu trúc "hoàn chỉnh", "tổng quát"
- Pt. Schrödinger có cấu trúc phương trình tuyến tính
- → Toán tử tuyến tính và hàm sóng trong không gian Hilbert
- QM: Schrödinger (wave mechanics) & Heisenbger (matrix mechanics)
- → Toán trên cơ sở liên tục (sóng) và rời rạc (matrix)
- Đại số tuyến tính (Linear algebra)

4

Hàm sóng sống trong không gian Hilbert!

Không gian Hilbert = Tập hợp các hàm sóng bình phương khả tích (trong miền xác định) $f(x)$ thoả mãn

$$\int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty$$

$f(x)$ được xem như 1 vector trong không gian Hilbert

Không gian Hilbert

Tích trong (inner product) $\langle f|g\rangle \equiv \int f(x)^* g(x) dx$

Bất đẳng thức Schwarz

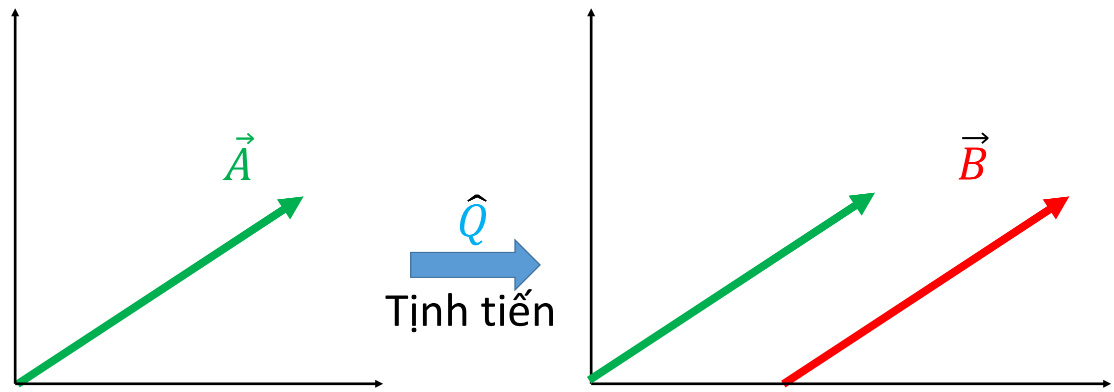
$$\left|\int_a^b f(x)^* g(x) dx\right| \le \sqrt{\int_a^b |f(x)|^2\, dx \int_a^b |g(x)|^2 dx}$$

$$\langle g|f\rangle = \langle f|g\rangle^*;$$

$$\langle f|f\rangle = \int_a^b |f(x)|^2\, dx$$

$\langle f|f\rangle$ là số thực không âm và bằng 0 chỉ khi $f(x) = 0$.

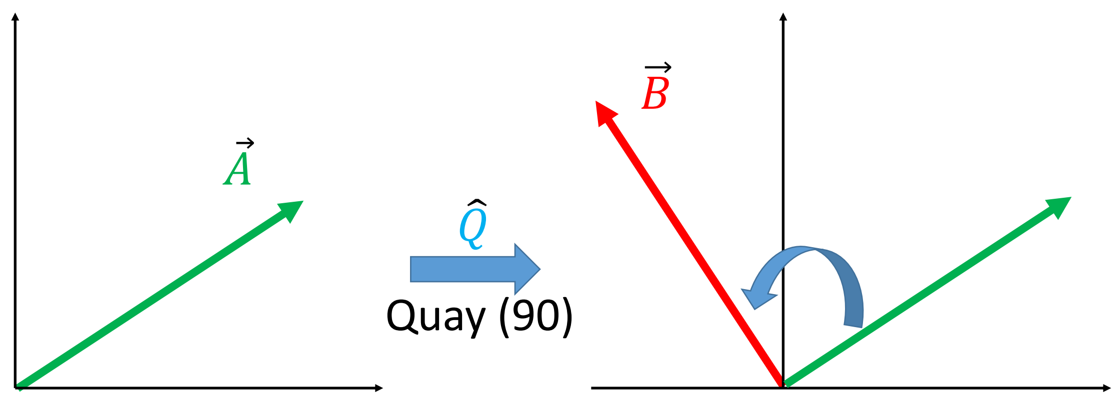
Không gian vector [nhắc lại]



$$\boxed{\vec{B} = \hat{Q}\vec{A}}$$

10

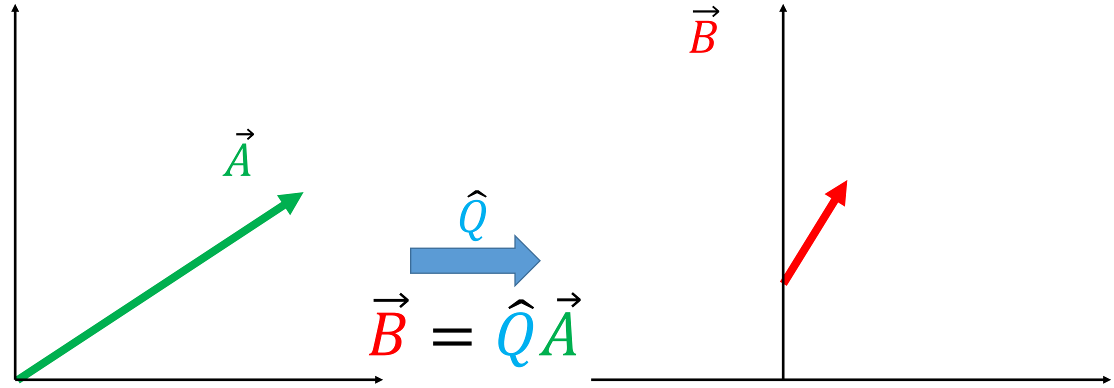
Không gian vector



$$\vec{B} = \hat{Q}\vec{A}$$

11

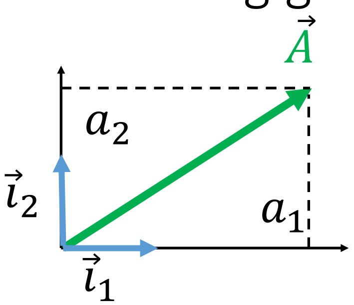
Không gian vector



$$\vec{B} = \hat{Q}\vec{A}$$

15

Không gian vector



$$\vec{\imath}_1 \cdot \vec{\imath}_1 = 1$$
$$\vec{\imath}_1 \cdot \vec{\imath}_2 = 0$$

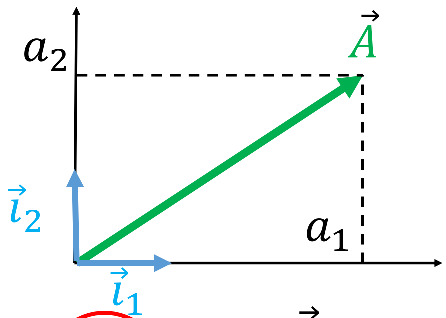
$$\rightarrow \vec{\imath}_m \cdot \vec{\imath}_n = \delta_{mn}$$

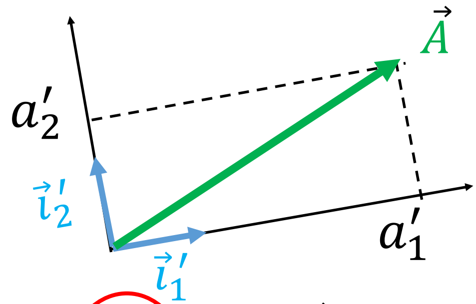
2D: $\vec{A} \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$ 3D: $\vec{A} \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$ nD: $\vec{A} \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$

$$\vec{A} = \sum_{m=1}^{n} a_m \vec{\imath}_m$$

16

Không gian vector





$a_1 = \vec{i}_1 \cdot \vec{A}$ $\quad$ $a_1' = \vec{i}_1' \cdot \vec{A}$

$a_2 = \vec{i}_2 \cdot \vec{A}$ $\quad$ $a_2' = \vec{i}_2' \cdot \vec{A}$

Cùng 1 vector $\vec{A}$, nhưng được biểu diễn trong những hệ cơ sở $\{\vec{i}_1, \vec{i}_2\}, \{\vec{i}_1', \vec{i}_2'\}, \ldots$ khác nhau.

Không gian vector

$\vec{A} \qquad \vec{B}$

$\vec{A} \xrightarrow{\hat{Q}} \vec{B} = \hat{Q}\vec{A}$

Tích vô hướng $\vec{A} \cdot \vec{B}$

$$\vec{A} \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

Không gian Hilbert

$|\alpha\rangle \qquad |\beta\rangle$

$|\beta\rangle = \hat{Q}|\alpha\rangle$

Tích trong $\langle\alpha|\beta\rangle \equiv \int \alpha(x)^* \beta(x) dx$

Ket: $|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$

Bra: $\langle\alpha| = (a_1^* \quad a_2^* \quad \ldots \quad a_n^*)$

Không gian Hilbert

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \xrightarrow{\hat{Q}} \qquad |\beta\rangle = \hat{Q}|\alpha\rangle \qquad |\beta\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

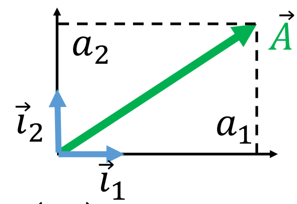
$$\overset{|\beta\rangle}{\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}} = \overset{\hat{Q}}{\begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdots & q_{1n} \\ q_{21} & q_{22} & \cdots & q_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{n1} & q_{n2} & \cdots & q_{nn} \end{pmatrix}} \overset{|\alpha\rangle}{\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}}$$

19

Không gian Hilbert

- Chuẩn hoá: $\langle f_m | f_m \rangle = 1$;
- Trực giao: $\langle f_m | f_n \rangle = 0\ , m \neq n$
- Trực giao & Chuẩn hoá ≡ Trực chuẩn: $\langle f_m | f_n \rangle = \delta_{mn}$;
- Đầy đủ: $f(x) = \sum_n c_n f_n(x)$
  (vector bất kỳ $f(x)$ đều có thể biểu diễn qua hệ các vector cơ sở $\{f_n\}$). $|f\rangle = \sum_n c_n\, |f_n\rangle$
- Hệ số $c_n = \int f_n^*(x) f(x)\, dx = \langle f_n | f \rangle$
  (xem như “toạ độ” của $|f\rangle$ trên trục của $|f_n\rangle$)

Không gian vector



$\vec{A} \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$

$\vec{\imath}_1 \cdot \vec{\imath}_1 = 1$

$\vec{\imath}_1 \cdot \vec{\imath}_2 = 0$

$\vec{\imath}_m \cdot \vec{\imath}_n = \delta_{mn}$

$\vec{A} = \sum_{m=1}^{n} a_m \vec{\imath}_m$

$a_1 = \vec{\imath}_1 \cdot \vec{A}$

$a_2 = \vec{\imath}_2 \cdot \vec{A}$

21

Đại lượng có thể quan sát Q

$$\langle\alpha|\beta\rangle \equiv \int \alpha(x)^*\beta(x)dx$$

$$\langle\hat{Q}\rangle = \int \Psi^*\hat{Q}\Psi\, dx = \langle\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle$$

$$\langle\hat{Q}\rangle \in R \Leftrightarrow \langle\hat{Q}\rangle = \langle\hat{Q}\rangle^* \leftrightarrow \langle\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle = \langle\hat{Q}\Psi|\Psi\rangle$$

Vậy: Các toán tử biểu thị đại lượng vật lý (đại lượng có thể quan sát được, đo được) có tính chất đặc biệt sau:

$$\langle f|\hat{Q}f\rangle = \langle\hat{Q}f|f\rangle \text{ với mọi } f(x)\ .$$

Các toán tử như thế gọi là toán tử Hermit.

$$\langle f|\hat{Q}g\rangle = \langle\hat{Q}f|g\rangle \text{ với mọi } f(x), g(x)$$

22

Đại lượng có thể quan sát (Đại lượng vật lý)

Đại lượng vật lý (đại lượng có thể quan sát được) được biểu diễn bởi toán tử $\hat{Q}$, được gọi là toán tử Hermit thoả điều kiện

$$\langle f|\hat{Q}f\rangle = \langle\hat{Q}f|f\rangle \text{ với mọi } f(x)$$

23

Bài tập nhỏ

- Toán tử động lượng có hermit không?
- CMR tổng của hai toán tử hermit cũng là toán tử hermit
- $\hat{Q}$ là toán tử hermit. α là số phức. Với điều kiện nào của α thì $\alpha\widehat{Q}$ hermit?
- Khi nào thì tích của 2 toán tử hermit cũng hermit?
- CMR toán tử vị trí ($\hat{x} = x$) là toán tử hermit.
- CMR toán tử Hamiltonian hermit.

24

Đại lượng có thể quan sát

Toán tử liên hiệp hermit của 1 toán tử $\hat{Q}$ là toán tử $\hat{Q}^+$ sao cho

$$\langle f|\hat{Q}g\rangle = \langle\hat{Q}^+ f|g\rangle \text{ với mọi } f \text{ và } g$$

25

Đại lượng có thể quan sát

Trạng thái xác định

- $\sigma^2 = \langle(\Delta j)^2\rangle$, với $\Delta j = j - \langle j\rangle$
- $\sigma^2 = \langle(j - \langle j\rangle)^2\rangle$
- $\sigma^2 = \langle(j - \langle j\rangle)^2\rangle = \langle j^2 - 2j\langle j\rangle + \langle j\rangle^2\rangle = \langle j^2\rangle - 2\langle j\rangle\langle j\rangle + \langle j\rangle^2 = \langle j^2\rangle - \langle j\rangle^2 = \langle j^2\rangle - \langle j\rangle^2$
- Trong cơ lượng tử, mỗi phép đo (tức là quan sát) Q tương ứng với toán tử $\hat{Q}$. Vì vậy ta thay j bằng $\hat{Q}$, $\langle j\rangle$ bằng trung bình của các lần đo Q: $\langle Q\rangle$. Gọi trung bình $\langle Q\rangle$ là q thì ta có:
- $\sigma^2 = \langle(\hat{Q} - \langle Q\rangle)^2\rangle = \langle(\hat{Q} - q)^2\rangle$
- $\langle\hat{Q}\rangle \equiv \langle Q\rangle \equiv q \equiv \int \Psi^*\hat{Q}\Psi\, dx$ (Đại lượng có thể quan sát)
- $\langle\hat{Q}\rangle = \int \Psi^*\hat{Q}\Psi\, dx = \langle\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle$ (theo định nghĩa của tích trong)

Đại lượng có thể quan sát

Trạng thái xác định

- $\langle\hat{Q}\rangle \equiv \langle Q\rangle \equiv q \equiv \int \Psi^*\hat{Q}\Psi\, dx$ (Đại lượng có thể quan sát)
- $\langle\hat{Q}\rangle = \int \Psi^*\hat{Q}\Psi\, dx = \langle\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle$ (theo định nghĩa của tích trong)
- Áp dụng những công thức trên cho toán tử $(\hat{Q} - q)^2$ thì được:

  $(\sigma^2 =)\quad \langle(\hat{Q} - q)^2\rangle = \langle\Psi|(\hat{Q} - q)^2\Psi\rangle$

  $= \langle\Psi|(\hat{Q} - q)(\hat{Q} - q)\Psi\rangle = \langle\Psi|(\hat{Q} - q)((\hat{Q} - q)\Psi)\rangle$

- Vì $(\hat{Q} - q)$ cũng là toán tử hermit nên

  $\langle\Psi|(\hat{Q} - q)((\hat{Q} - q)\Psi)\rangle = \langle(\hat{Q} - q)\Psi|(\hat{Q} - q)\Psi\rangle \quad (= \sigma^2).$

Đại lượng có thể quan sát

Trạng thái xác định

- Nếu **các lần đo** giá trị ứng với toán tử $\hat{Q}$ đều **cho cùng 1 giá trị** $\boldsymbol{q}$ thì độ lệch chuẩn $\langle(\hat{Q}-q)^2\rangle$ (độ lệch của các lần đo so với giá trị trung bình) phải bằng 0, tức là $\langle(\hat{Q}-q)\Psi|(\hat{Q}-q)\Psi\rangle = 0.$
- Đây là tích trong của hàm $(\hat{Q}-q)\Psi$ với chính nó.
- Tích trong này bằng 0 thì $(\hat{Q}-q)\Psi = 0$
- Hay $$\boldsymbol{\hat{Q}\Psi = q\Psi}$$

29

Đại lượng có thể quan sát

Trạng thái xác định

$$\hat{Q}\Psi = q\Psi$$

- PT này là phương trình trị riêng cho toán tử $\hat{Q}$. Ψ là hàm riêng của $\hat{Q}$, và q là trị riêng tương ứng. Lúc này hàm riêng Ψ cũng là trạng thái xác định vì các phép đo Q trong trạng thái này đều cho cùng giá trị q.
- Vậy, các trạng thái xác định là các hàm riêng của $\hat{Q}$.

Đại lượng vật lý (đại lượng có thể quan sát được) được biểu diễn bởi toán tử $\hat{Q}$, được gọi là toán tử Hermit thoả điều kiện

$$\langle f|\hat{Q}f\rangle = \langle\hat{Q}f|f\rangle \text{ với mọi } f(x)$$

30

Trạng thái riêng của toán tử hermit

Phổ rời rạc (năng lượng)

- **Các trị riêng (của các hàm riêng) là thực:** $\hat{Q}f = qf, \mathbf{q} \in R$
- **Các hàm riêng trực giao**
- **Các hàm riêng (của đại lượng quan sát) thì đầy đủ**

[Xin xem thêm mục 3.3.1, trang 101 sách Griffiths]

Chuẩn hoá: $\langle f_m | f_m \rangle = 1$; **Trực giao**: $\langle f_m | f_n \rangle = 0$, $m \neq n$ **Trực chuẩn**: $\langle f_m | f_n \rangle = \delta_{mn}$
Đầy đủ: $f(x) = \sum_n c_n f_n(x)$ (vector bất kỳ $f(x)$ đều có thể biểu diễn qua hệ cơ sở $\{f_n\}$)
$|f\rangle = \sum_n c_n |f_n\rangle$
$c_n = \int f_n^*(x) f(x)\, dx = \langle f_n | f \rangle$

Trạng thái riêng của toán tử hermit

Phổ rời rạc (năng lượng)

- $\{|f_n\rangle\}$:
- $\hat{H}|f_n\rangle = E_n|f_n\rangle$

Viết cách khác

- $\{|n\rangle\}$:
- $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$

$$\{|f_n\rangle\}$$

Trực chuẩn: $\langle f_m | f_n \rangle = \delta_{mn}$;
Đầy đủ: $f(x) = \sum_n c_n f_n(x)$ hoặc $|f\rangle = \sum_n c_n |f_n\rangle$
(vector bất kỳ $f(x)$ đều có thể biểu diễn qua hệ cơ sở $\{f_n\}$)
$c_n = \int f_n^*(x) f(x)\, dx = \langle f_n | f \rangle$

Không gian Hilbert – Giải thích thống kê

Ý nghĩa của "tích vô hướng" (tích trong) $\langle f|g\rangle$:

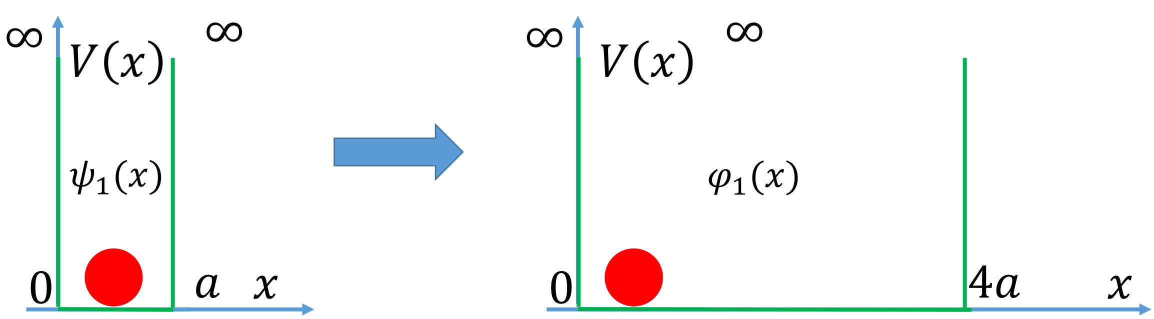
- Tương tự tích vô hướng $\vec{A}\cdot\vec{B}$ trong không gian Euclide biểu diễn hình chiếu của $\vec{B}$ lên $\vec{A}$, tích trong $\langle f|g\rangle$ cũng biểu diễn hình chiếu c vector $|g\rangle$ lên $|f\rangle$.
- Về mặt thống kê, trong trường hợp các trạng thái đã được chuẩn hoá (thoả mãn điều kiện chuẩn hoá của hàm sóng), tích trong $\langle f|g\rangle$ cho biết thông tin xác suất hạt ở trạng thái $|g\rangle$ sẽ được tìm thấy ở trạng thái $|f\rangle$ khác sau tác động nào đó (tác động của phép đo…):
- $|\langle \boldsymbol{f}|\boldsymbol{g}\rangle|^2 =$ **Xác suất tìm được hạt ở trạng thái $|\boldsymbol{f}\rangle$ mà trước đó hạt ở trạng thái $|\boldsymbol{g}\rangle$.**

33

Bài tập nhỏ

Một electron khối lượng m chuyển động trong giếng thế vuông vô hạn có bề rộng a: $V(x) = 0$, nếu $x \in (0, a)$, và ngoài đó ra thì $V(x) = \infty$.

Nếu electron tại thời điểm ban đầu ở trạng thái cơ bản, và nếu ta đột ngột làm cho giếng thế có bề rộng $4a$ (dời một cách tức thời thành bên phải từ a đến $4a$), hãy tính xác suất tìm được electron này ở: trạng thái cơ bản trong giếng thế năng mới.



35

Trạng thái riêng của toán tử hermit

Phổ liên tục: Xét toán tử động lượng [Xem 3.3.2 sách Griffiths]

(Xin xem ví dụ 3.2)

Hệ cơ sở $\{|p\rangle\}$ (hoặc $\{f_p(x)\}$) ứng với toán tử động lượng được cho bởi:

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \quad \text{hoặc} \quad \hat{p} f_p(x) = p f_p(x) \ (*)$$

với $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$, p là trị riêng của toán tử này, tức là giá trị động lượng.

Giải PT (*) (tức là $\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} f_p(x) = p f_p(x)$), được hệ các hàm riêng (hệ cơ sở)

$$|p\rangle \equiv f_p(x) = A e^{\frac{ipx}{\hbar}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

A được xác định bởi điều kiện chuẩn hoá:

$$\langle p'|p\rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f_{p'}^*(x) f_p(x)\, dx = \delta(p - p')$$

Trạng thái riêng của toán tử hermit

Phổ liên tục: Xét toán tử động lượng [Xem 3.3.2 sách Griffiths]

p liên tục nên tổng được thay bằng tích phân trong tính đầy đủ (đầy đủ: $f(x) = \sum_n c_n f_n(x)$): Một hàm sóng (vector) bất kỳ đều được biểu diễn qua hệ cơ sở $\{f_p(x)\}$

$$f(x) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} c(p)\, f_p(x) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p)\, e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp$$

với $c(p) = \langle f_p | f \rangle$.

Đặt $\Phi(p) = c(p)$. Một cách tổng quát, hàm sóng phụ thuộc thời gian → Thay $f(x)$ thành $\Psi(x,t)$ và $\Phi(p)$ thành $\Phi(p,t)$.

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p,t)\, e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p,t)\, e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp$$

Trạng thái riêng của toán tử hermit

Phổ liên tục: Xét toán tử toạ độ [Xem 3.3.3 sách Griffiths]

(Xin xem ví dụ 3.3)

Hệ cơ sở $\{|x\rangle\}$ (hoặc $\{g_y(x)\}$) ứng với toán tử toạ độ $\hat{x}$ được cho bởi:

$$\hat{x}|x\rangle = y|x\rangle \quad \text{hoặc} \quad \hat{x}g_y(x) = yg_y(x) \;\; (*)$$

$\hat{x} = x$ (toán tử này chỉ là nhân x vào vector $|x\rangle$) , y (một số cố định) là trị riêng của toán tử $\hat{x}$, tức là giá trị vị trí. Giải phương trình *, được hệ các hàm riêng (hệ cơ sở)

$$|x\rangle \equiv g_y(x) = A\delta(x-y)$$

A được xác định bởi đk chuẩn hoá:

$\langle x'|x\rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} g_{y'}^*(x) g_y(x)\, dx = |A|^2\delta(y-y')$. Chọn $A = 1$

Trạng thái riêng của toán tử hermit

Phổ liên tục: Xét toán tử toạ độ [Xem 3.3.3 sách Griffiths]

y liên tục nên tổng được thay bằng tích phân trong tính đầy đủ ($f(x) = \sum_n c_n f_n(x)$): Một hàm sóng (vector) bất kỳ đều được biểu diễn qua hệ cơ sở $\{g_y(x)\}$

$$f(x) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} c(y)\, g_y(x) dy = \int_{-\infty}^{\infty} c(y)\, \delta(x-y) dy = c(x)$$

$$c(y) = \langle g_y | f \rangle = f(y)$$

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(y,t)\, g_y(x) dy = \int_{-\infty}^{\infty} c(y,t)\, \delta(x-y) dy = c(x,t)$$

Như vậy, $c(x,t)$ chính là hàm sóng theo toạ độ và thời gian $\Psi(x,t)$!

Không gian Hilbert – Giải thích thống kê

Phổ rời rạc (năng lượng)

- $\Psi(x) = \sum_n c_n f_n(x)$
- $\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_n |c_n|^2 = 1$
- $c_n = \int f_n^*(x)\Psi(x)\,dx = \langle f_n|\Psi\rangle$
- $\hat{Q}f_n = q_n f_n \to \langle\hat{Q}\rangle = \langle\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle = \sum_n q_n|c_n|^2$
- $|c_n|^2 = |\langle f_n|\Psi\rangle|^2$ = Xác suất khi đo *Q* thu được q_n
- Nếu Q là năng lượng: $|c_n|^2$ là xác suất khi đo *E* thì thu được giá trị E_n

41

Không gian Hilbert – Giải thích thống kê

Phổ liên tục: Toán tử động lượng

$c(p) = \langle f_p|\Psi\rangle = \int f_p^*(x)\Psi(x,t)\,dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\Psi(x,t)dx$

$|c(p)|^2 dp$: Xác suất đo động lượng thì thu được p trong khoảng $p, p+dp$.

$c(p)$ là đại lượng quan trọng và được ký hiệu $\Phi(p,t)$.

42

Không gian Hilbert – Giải thích thống kê

$$\Phi(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar}\, \Psi(x,t)dx \qquad [3.54]$$

$\Phi(p,t)$ chính là phép biến đổi Fourier của hàm sóng không gian toạ độ $\Psi(x,t)$. Vì vậy **$\boldsymbol{\Phi(p,t)}$ có ý nghĩa là hàm sóng không gian động lượng. $\boldsymbol{\Phi(p,t)}$ còn được gọi là hàm sóng trong biểu diễn động lượng.**

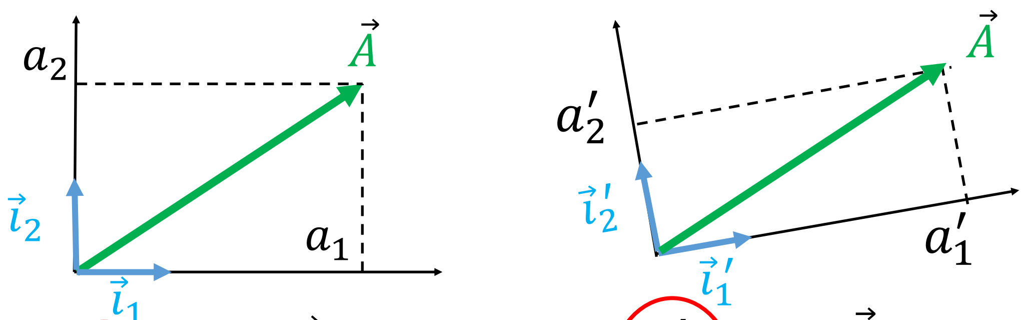
$|\Phi(p,t)|^2 dp$: xác suất để phép đo động lượng cho p trong khoảng p, $p + dp$

$\Psi(x,t)$ là phép biến đổi Fourier ngược của hàm sóng không gian động lượng:

$$\Psi\,(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar}\Phi(p,t)dp \qquad [3.55]$$

43

Ký hiệu Dirac



$$a_1 = \vec{\imath}_1 \cdot \vec{A} \qquad a'_1 = \vec{\imath}'_1 \cdot \vec{A}$$
$$a_2 = \vec{\imath}_2 \cdot \vec{A} \qquad a'_2 = \vec{\imath}'_2 \cdot \vec{A}$$

Cùng 1 vector $\vec{A}$, nhưng được biểu diễn trong những hệ cơ sở $\{\vec{\imath}_1, \vec{\imath}_2\}, \{\vec{\imath}'_1, \vec{\imath}'_2\}, \ldots$ khác nhau

48

Ký hiệu Dirac

Hệ vật lý: Trạng thái của hệ được biểu diễn bởi một vector: $|S(t)\rangle$

Vector $|S(t)\rangle$ của hệ cũng có thể được biểu diễn trong những hệ cơ sở khác nhau, tựa như vector $\vec{A}$ trong các cơ sở khác nhau.

$$a_1 = \vec{i}_1 \cdot \vec{A} \qquad\qquad a'_1 = \vec{i}'_1 \cdot \vec{A}$$
$$a_2 = \vec{i}_2 \cdot \vec{A} \qquad\qquad a'_2 = \vec{i}'_2 \cdot \vec{A}$$

49

Biểu diễn trạng thái $|S(t)\rangle$ trong các hệ cơ sở

$\{|x\rangle\}$:
$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$

$\{|p\rangle\}$:
$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$

$\{|n\rangle\}$:
$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$

$$\Psi(x,t) = \langle x|S(t)\rangle \qquad \Phi(p,t) = \langle p|S(t)\rangle \qquad c_n = \langle n|S(t)\rangle$$

$$|S(t)\rangle$$

50

Bài tập

- Xin đọc và trình bày lại một cách thật chi tiết ví dụ 3.4 (trang 108 sách của Griffiths)
- Bài tập 3.12 (sách Griffiths)
- Bài tập 3.27 (sách Griffiths)
- Bài tập 3.30 (sách Griffiths)

55

Nguyên lý bất định

- Xét hai đại lượng có thể khảo sát A và B.
- Toán tử tương ứng là $\hat{A}$ và $\hat{B}$
- Tìm $\sigma_A^2 \sigma_B^2$

56

CM Nguyên lý bất định

$$\sigma_A^2 = \langle(\hat{A} - \langle A\rangle)^2\rangle = \left\langle\Psi\middle|(\hat{A} - \langle A\rangle)^2\Psi\right\rangle$$

$$= \langle\Psi|(\hat{A} - \langle A\rangle)(\hat{A} - \langle A\rangle)\Psi\rangle \qquad \langle f|\hat{Q}g\rangle = \langle\hat{Q}f|g\rangle$$

$$= \left\langle(\hat{A} - \langle A\rangle)\Psi|(\hat{A} - \langle A\rangle)\Psi\right\rangle = \langle f|f\rangle,$$

$$f \equiv (\hat{A} - \langle A\rangle)\Psi$$

$$\sigma_B^2 = \langle(\hat{B} - \langle B\rangle)^2\rangle = \left\langle(\hat{B} - \langle B\rangle)\Psi\middle|(\hat{B} - \langle B\rangle)\Psi\right\rangle = \langle g|g\rangle$$

$$g \equiv (\hat{B} - \langle B\rangle)\Psi$$

57

CM Nguyên lý bất định

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 = \langle f|f\rangle\langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle|^2 \text{ (BĐT Schwarz)}$$

$$|z|^2 = |\mathrm{Re(z)}|^2 + |\mathrm{Im(z)}|^2 \geq |\mathrm{Im(z)}|^2 = \left[\frac{1}{2i}(z - z^*)\right]^2$$

$$z = \langle f|g\rangle$$

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left[\frac{1}{2i}(\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle)\right]^2$$

$$\sigma_B^2 = \langle(\hat{B} - \langle B\rangle)^2\rangle = \left\langle(\hat{B} - \langle B\rangle)\Psi|(\hat{B} - \langle B\rangle)\Psi\right\rangle = \langle g|g\rangle$$

$$g = (\hat{B} - \langle B\rangle)\Psi$$

58

CM Nguyên lý bất định

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 = \langle f|f\rangle\langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle|^2$$

$$|z|^2 = |\mathrm{Re(z)}|^2 + |\mathrm{Im(z)}|^2 \geq |\mathrm{Im(z)}|^2 = \left[\frac{1}{2i}(z - z^*)\right]^2$$

$$z = \langle f|g\rangle$$

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left[\frac{1}{2i}(\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle)\right]^2$$

$$\langle f|g\rangle = \langle \hat{A}\hat{B}\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle \qquad \langle g|f\rangle = \langle \hat{B}\hat{A}\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$$

$$\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle = \langle \hat{A}\hat{B}\rangle - \langle \hat{B}\hat{A}\rangle = \langle \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\rangle = \langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle$$

59

CM Nguyên lý bất định

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left[\frac{1}{2i}(\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle)\right]^2$$

$$\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle = \langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle$$

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left[\frac{1}{2i}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right]^2$$

$[x,p]=i\hbar$ $\qquad \sigma_x^2\sigma_p^2 \geq \left[\frac{1}{2i}\langle[\hat{x},\hat{p}]\rangle\right]^2 = \left[\frac{i\hbar}{2i}\right]^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2$

$$\sigma_x \ \sigma_p \ \geq \frac{\hbar}{2}$$

60

Toán tử

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \xrightarrow{\hat{Q}} |\beta\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

$$|\beta\rangle = \hat{Q}|\alpha\rangle$$

$$\overset{|\beta\rangle}{\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}} = \overset{\hat{Q}}{\begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdots & q_{1n} \\ q_{21} & q_{22} & \cdots & q_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{n1} & q_{n2} & \cdots & q_{nn} \end{pmatrix}} \overset{|\alpha\rangle}{\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}}$$

61

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \qquad |\beta\rangle = \hat{Q}|\alpha\rangle \qquad |\beta\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

$$|\alpha\rangle = \sum a_n|e_n\rangle, a_n = \langle e_n|\alpha\rangle \quad \Bigg| \quad |\beta\rangle = \sum b_n|e_n\rangle, b_n = \langle e_n|\beta\rangle$$

$$\sum b_n|e_n\rangle = \sum a_n\hat{Q}\,|e_n\rangle$$

62

$$\sum b_n|e_n\rangle = \sum a_n\widehat{Q}\ |e_n\rangle$$

$$\sum b_n\langle e_m|e_n\rangle = \sum a_n\langle e_m|\widehat{Q}\ |e_n\rangle$$

$$b_m = \sum a_n\langle e_m|\widehat{Q}\ |e_n\rangle = \sum a_n\ Q_{mn}$$

$$Q_{mn} = \langle e_m|\widehat{Q}\ |e_n\rangle$$

63