

Hình thức luận (Formalism)

Hình thức luận

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

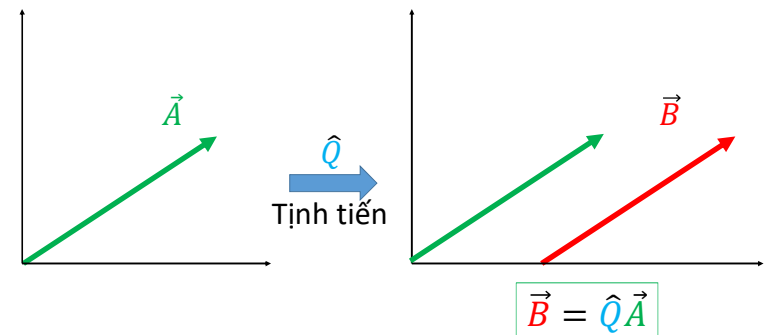
Hàm sóng sống trong không gian Hilbert!

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

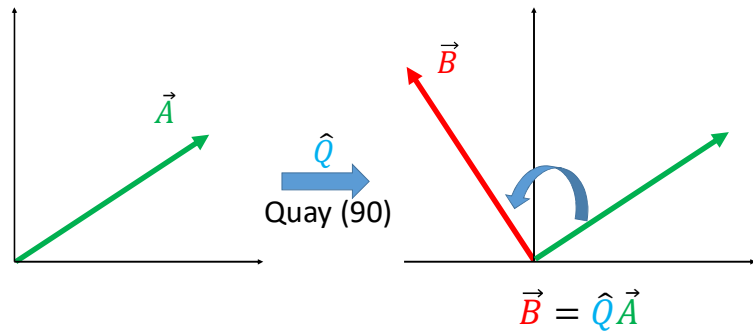
$$\int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty$$

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

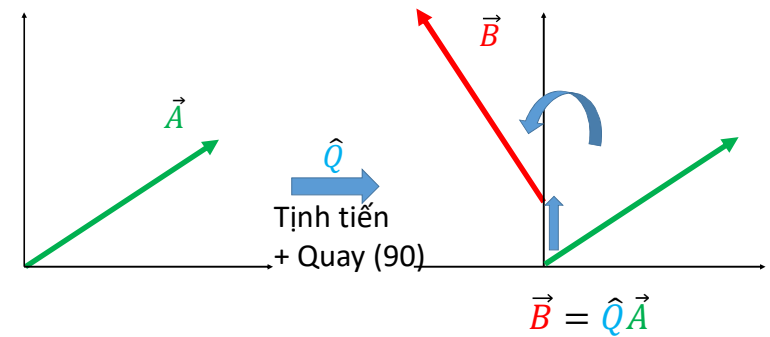
Không gian vector



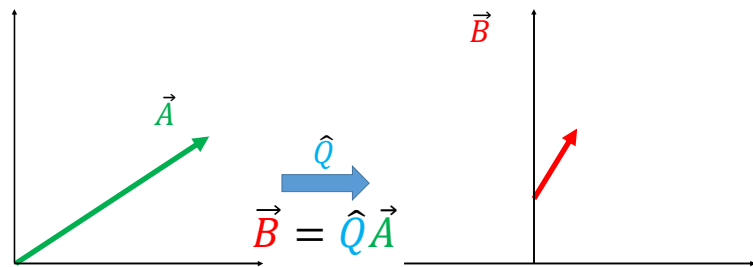
Không gian vector



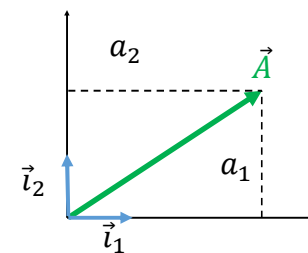
Không gian vector



Không gian vector



Không gian vector



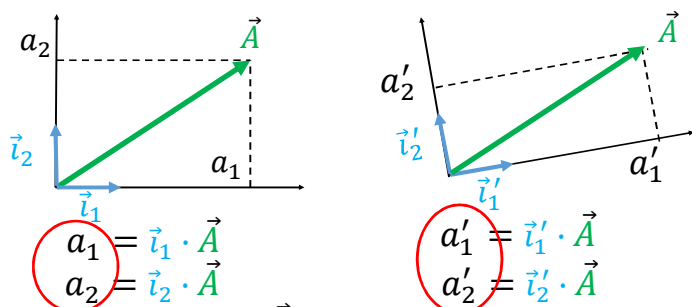
$$\vec{A} \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \vec{i}_1 \cdot \vec{i}_1 &= 1 \\ \vec{i}_1 \cdot \vec{i}_2 &= 0 \end{aligned} \quad \vec{i}_m \cdot \vec{i}_n = \delta_{mn}$$

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

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

Không gian vector



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

Không gian vector

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, như vector $\vec{A}$ trong các cơ sở khác nhau.

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

Không gian vector

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

Tích vô hướng $\vec{A} \cdot \vec{B}$

Không gian Hilbert

$$|\alpha\rangle \quad |\beta\rangle$$

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

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

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

$$\text{Bra: } \langle\alpha| = (a_1^* \quad a_2^* \quad \dots \quad a_n^*)$$

Không gian Hilbert

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

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \dots & q_{1n} \\ q_{21} & q_{22} & \dots & q_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{n1} & q_{n2} & \dots & q_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

Không gian Hilbert

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

Bất đẳng thức Schwarz

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

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

$$\langle f|f \rangle = \int_a^b |f(x)|^2 \geq 0, \in \mathbb{R}$$

Không gian Hilbert

Chuẩn hoá $\langle f|f \rangle = 1$

Trực giao $\langle f|f \rangle = 0$

Trực giao & Chuẩn hoá = Trực chuẩn $\langle f_m|f_n \rangle = \delta_{mn}$

Đầy đủ $f(x) = \sum_n c_n f_n(x)$

$$c_n = \int f_n^*(x) f(x) dx = \langle f_n|f \rangle$$

Đại lượng có thể quan sát Q

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

$$\langle \hat{Q} \rangle \in \mathbb{R} \iff \langle \hat{Q} \rangle = \langle \hat{Q} \rangle^* \iff \langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle = \langle \hat{Q} | \Psi | \Psi \rangle$$

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

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

Đại lượng có thể quan sát

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

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

Bài tập nhỏ

- Toán tử xung 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 $\alpha\hat{Q}$ 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.

Đại lượng có thể quan sát

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

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

Đại lượng có thể quan sát

Trạng thái xác định

- $\sigma^2 = \langle (\Delta j)^2 \rangle$
- $\Delta j = j - \langle j \rangle$
- Mỗi phép đo (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:
- $\sigma^2 = \langle (\hat{Q} - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle (\hat{Q} - q)^2 \rangle$
- $\langle \hat{Q} \rangle \equiv \langle Q \rangle \equiv q \equiv \int \Psi^* \hat{Q} \Psi dx$
- $\langle \hat{Q} \rangle = \int \Psi^* \hat{Q} \Psi dx = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle$

Đại lượng có thể quan sát

Trạng thái xác định

- Áp dụng những công thức trên cho toán tử $(\hat{Q} - q)^2$ thì được:
 $(\sigma^2 =) \langle (\hat{Q} - q)^2 \rangle = \langle \Psi | (\hat{Q} - q)^2 \Psi \rangle$
 $= \langle \Psi | (\hat{Q} - q)(\hat{Q} - q) \Psi \rangle = \langle \Psi | (\hat{Q} - q)((\hat{Q} - q) \Psi) \rangle$
- 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** q thì độ lệch chuẩn $\langle (\hat{Q} - q)^2 \rangle$ (“nôm na” là 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 $\hat{Q}\Psi = q\Psi$

Đại lượng có thể quan sát

Trạng thái xác định

- 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 $\hat{Q}$.**

Trạng thái riêng của toán tử hermit

Phổ rời rạc

- Các trị riêng (của các hàm riêng) là thực: $\hat{Q}f = qf, q \in \mathbb{R}$
 - 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]

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

Trạng thái riêng của toán tử hermit

Phổ liên tục: Xét toán tử toạ độ [Xem mục 3.3.2]

- Xin xem ví dụ 3.3

Không gian Hilbert – Giải thích thống kê

$$\Psi(x) = \sum_n c_n f_n(x) \quad c_n = \int f_n^*(x) \Psi(x) dx = \langle f_n | \Psi \rangle$$

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 = 1$$

$$\hat{Q} f_n = q_n f_n \rightarrow \langle \hat{Q} \rangle = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = \sum_n q_n |c_n|^2$$

$|c_n|^2$: 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

Không gian Hilbert – Giải thích thống kê

Toán tử động lượng

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

$|c(p)|^2 dp$: 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 $\Phi(p, t)$

Không gian Hilbert – Giải thích thống kê

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

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

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

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

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

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 $\sigma_A^2 \sigma_B^2$

CM Nguyên lý bất định

$$\begin{aligned}\sigma_A^2 &= \langle (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi \rangle \\ &= \langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi \rangle = \langle f | f \rangle, \\ &\quad f \equiv (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi \\ \sigma_B^2 &= \langle (\hat{B} - \langle B \rangle)^2 \rangle = \langle (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle = \langle g | g \rangle \\ &\quad g \equiv (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi\end{aligned}$$

CM Nguyên lý bất định

$$\begin{aligned}\sigma_A^2 \sigma_B^2 &= \langle f | f \rangle \langle g | g \rangle \geq |\langle f | g \rangle|^2 \text{ (BĐT Schwarz)} \\ |z|^2 &= |\text{Re}(z)|^2 + |\text{Im}(z)|^2 \geq |\text{Im}(z)|^2 = \left[\frac{1}{2i} (z - z^*) \right]^2 \\ z &= \langle f | g \rangle \\ \sigma_A^2 \sigma_B^2 &\geq \left[\frac{1}{2i} (\langle f | g \rangle - \langle g | f \rangle) \right]^2 \\ \sigma_B^2 &= \langle (\hat{B} - \langle B \rangle)^2 \rangle = \langle (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle = \langle g | g \rangle \\ &\quad g = (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi\end{aligned}$$

CM Nguyên lý bất định

$$\begin{aligned}\sigma_A^2 \sigma_B^2 &= \langle f | f \rangle \langle g | g \rangle \geq |\langle f | g \rangle|^2 \\ |z|^2 &= |\text{Re}(z)|^2 + |\text{Im}(z)|^2 \geq |\text{Im}(z)|^2 = \left[\frac{1}{2i} (z - z^*) \right]^2 \\ z &= \langle f | g \rangle \\ \sigma_A^2 \sigma_B^2 &\geq \left[\frac{1}{2i} (\langle f | g \rangle - \langle g | f \rangle) \right]^2 \\ \langle f | g \rangle &= \langle \hat{A} \hat{B} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle \quad \langle g | f \rangle = \langle \hat{B} \hat{A} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle \\ \langle f | g \rangle - \langle g | f \rangle &= \langle \hat{A} \hat{B} \rangle - \langle \hat{B} \hat{A} \rangle = \langle \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} \rangle = \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle\end{aligned}$$

CM Nguyên lý bất định

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

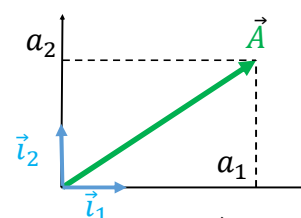
$$\langle f|g \rangle - \langle g|f \rangle = \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle$$

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

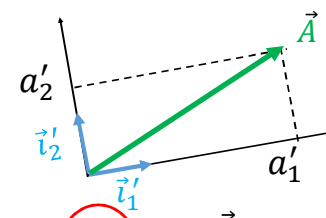
$$[x, p] = i\hbar \quad \sigma_x^2 \sigma_p^2 \geq \left[\frac{1}{2i} \langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle \right]^2 = \left[\frac{i\hbar}{2i} \right]^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2$$

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

Ký hiệu Dirac



$$\begin{aligned} a_1 &= \vec{i}_1 \cdot \vec{A} \\ a_2 &= \vec{i}_2 \cdot \vec{A} \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} a'_1 &= \vec{i}'_1 \cdot \vec{A} \\ a'_2 &= \vec{i}'_2 \cdot \vec{A} \end{aligned}$$

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

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, như vector $\vec{A}$ trong các cơ sở khác nhau.

$$\begin{aligned} a_1 &= \vec{i}_1 \cdot \vec{A} \\ a_2 &= \vec{i}_2 \cdot \vec{A} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a'_1 &= \vec{i}'_1 \cdot \vec{A} \\ a'_2 &= \vec{i}'_2 \cdot \vec{A} \end{aligned}$$

Ký hiệu Dirac

Hệ hàm riêng tạo thành hệ cơ sở

Hệ cơ sở tọa độ: hàm riêng tọa độ (vị trí) tạo thành hệ cơ sở: $|x\rangle$ là hàm riêng của toán tử $\hat{x}$ với trị riêng x

Khi đó vector $|S(t)\rangle$ được biểu diễn như thế nào?

Vector $|S(t)\rangle$ được biểu diễn bởi $\langle x|S(t)\rangle$ (là chiếu của $|S(t)\rangle$ lên cơ sở (hàm riêng) $|x\rangle$).

Ký hiệu Dirac

$\langle x|S(t)\rangle$ là hệ số trong khai triển của $|S(t)\rangle$ trong cơ sở (hàm riêng) tọa độ $|x\rangle$.

hàm sóng $\Psi(x, t) = \langle x|S(t)\rangle$

Trong không gian động lượng: hàm sóng $\Phi(p, t)$ là hệ số khai triển của vector $|S(t)\rangle$ trong cơ sở hàm riêng của toán tử động lượng.

$$\Phi(p, t) = \langle p|S(t)\rangle$$

Ký hiệu Dirac

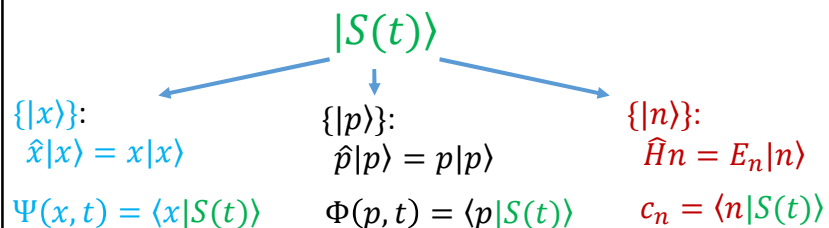
Trong hệ cơ sở của hàm riêng năng lượng:

Vector trạng thái $|S(t)\rangle$ được diễn tả qua

$$c_n = \langle n|S(t)\rangle$$

$|n\rangle$ là hàm riêng của toán tử năng lượng ($\hat{H}$)

Ký hiệu Dirac



Toán tử

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

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \dots & q_{1n} \\ q_{21} & q_{22} & \dots & q_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{n1} & q_{n2} & \dots & q_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
 |\alpha\rangle &= \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} & |\beta\rangle &= \hat{Q}|\alpha\rangle & |\beta\rangle &= \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \\
 |\alpha\rangle &= \sum a_n |e_n\rangle, a_n = \langle e_n | \alpha \rangle & & & |\beta\rangle &= \sum b_n |e_n\rangle, b_n = \langle e_n | \beta \rangle \\
 & & & & & \sum b_n |e_n\rangle = \sum a_n \hat{Q} |e_n\rangle
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \sum b_n |e_n\rangle &= \sum a_n \hat{Q} |e_n\rangle \\
 \sum b_n \langle e_m | e_n \rangle &= \sum a_n \langle e_m | \hat{Q} | e_n \rangle \\
 b_m &= \sum a_n \langle e_m | \hat{Q} | e_n \rangle = \sum a_n Q_{mn} \\
 Q_{mn} &= \langle e_m | \hat{Q} | e_n \rangle
 \end{aligned}$$