Hàm sóng và phương trình Schroedinger

Lý Lê

Ngày 4 tháng 7 năm 2009

Tóm tắt nội dung

Để có thể hiểu sâu về hóa học hoặc để có thể nghiên cứu về lý thuyết hóa học, chúng ta phải có những hiểu biết nhất định về ***Hóa học tượng tử***. Tuy nhiên, đây là một môn học khó vì bên cạnh những kiến thức về vật lý và hóa học, nó còn yêu cầu người học phải có một nền tảng toán học tốt. Cách tốt nhất để làm quen với những công thức toán trong lượng tử là bắt đầu từ hàm sóng và phương trình sóng.

1 Hàm sóng trong cơ học lượng tử

Trong cơ học cổ điển, khái niệm ***trạng thái (state)*** của một hạt nghĩa là ***sự định rõ*** vị trí và tốc độ của nó tại một thời điểm bất kì và các lực đang tác dụng lên hạt đó. Theo định luật hai Newton, nếu cho trước trạng thái của một hệ bất kì ta sẽ xác định chính xác trạng thái của nó trong tương lai. Tuy nhiên, đối với hạt vi mô thì ta không thể đồng thời xác định chính xác vị trí và tốc độ của nó[1]. Nghĩa là, dựa vào cơ học cổ điển thì không thể dự đoán được sự chuyển động của hạt vi mô trong tương lai. Do đó, chúng ta phải dựa vào cơ học lượng tử để dự đoán chính xác hơn sự chuyển động của hạt trong tương lai.

Trong cơ học lượng tử, trạng thái của một hệ được mô tả bởi ***hàm sóng*** hay ***hàm trạng thái*** Ψ. Bởi vì trạng thái của hệ, thông thường, thay đổi theo thời gian, nên Ψ cũng là một hàm theo thời gian. Đối với hệ một hạt chuyển động trong không gian một chiều, chúng ta có $\Psi = \Psi(x,t)$. Hàm sóng Ψ chứa đựng tất cả những thông tin khả dĩ của hệ nên thay vì nói *"trạng thái được mô tả bởi hàm sóng Ψ"*, chúng ta đơn giản chỉ nói "*trạng thái* Ψ". Để xác định trạng thái trong tương lai của của một hệ theo cơ học lượng tử chúng ta cũng phải biết trạng thái hiện tại và một phương trình cho chúng ta biết sự thay đổi của hàm sóng theo thời gian. Phương trình đó được đề nghị như sau:

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) \tag{1}$$

[1] nguyên lí bất định Heisenberg

trong đó ***hằng số Plank rút gọn*** $\hbar$ được xác định bởi

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \tag{2}$$

Phương trình (1) được nhà vật lí người Áo Schroedinger đưa ra vào năm 1926 và được gọi là *phương trình Schroedinger phụ thuộc thời gian* hay *phương trình sóng Schroedinger*. Trong (1), $i = \sqrt{-1}$, được gọi là số phức hay số ảo; m là khối lượng của hạt; $V(x,t)$ là hàm thế năng của hệ.

Phương trình Schroedinger phụ thuộc thời gian chứa đạo hàm bậc nhất của hàm sóng theo thời gian. Nó cho phép chúng ta xác định hàm sóng tại bất kì thời điểm nào trong tương lai, nếu ta biết được hàm trạng thái tại thời điểm t_0.

Hàm sóng chứa đựng tất cả những thông tin mà ta cần biết về một hệ mà nó mô tả. Tuy nhiên, chúng ta không thể hi vọng rằng Ψ sẽ liên hệ với vị trí chính xác của hạt giống như cơ học cổ điển mô tả. Ngay sau khi Schroedinger khám phá ra phương trình sóng, Born đưa ra *giả định*[2] rằng

$$|\Psi(x,t)|^2 dx \tag{3}$$

là *xác suất* tìm thấy hạt dọc theo trục x trong vùng từ x đến $(x+dx)$. Hàm $|\Psi(x,t)|^2$ được gọi là *mật độ xác suất* tìm thấy hạt ở những vị trí khác nhau theo trục x. Ví dụ, giả sử tại thời điểm t_0 hạt ở trong trạng thái được mô tả bởi hàm sóng $\Psi = ae^{-bx^2}$, với a và b là những hằng số thực. Mật độ xác suất tìm thấy hạt tại thời điểm t_0 dọc theo trục x là $a^2e^{-2bx^2}$.

2 Phương trình Schroedinger không phụ thuộc thời gian

Phương trình Schroedinger (1) khá là phức tạp. Tuy nhiên, đối với nhiều áp dụng của cơ học lượng tử vào hóa học, nó ít khi được sử dụng, thay vào đó, phương trình đơn giản hơn được sử dụng; đó là *phương trình Schroedinger không phụ thuộc thời gian*. Chúng ta sẽ thiết lập phương trình Schroedinger không phụ thuộc thời gian dựa vào phương trình Schroedinger phụ thuộc thời gian, cho trường hợp một hạt trong không gian một chiều.

Chúng ta bắt đầu bằng cách giới hạn thế năng V là hàm không phụ thuộc thời gian t, chỉ phụ thuộc tọa độ x. Phương trình Schroedinger phụ thuộc thời gian trong trường hợp này là

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t) \tag{4}$$

Giả sử nghiệm của (4) có thể được viết dưới dạng tích của hàm theo thời gian và hàm theo tọa độ

$$\Psi(x,t) = f(t)\psi(x) \tag{5}$$

[2]khi mới làm quen với cơ học lượng tử, ta phải chấp nhận một số giả định

Lấy đạo hàm (5) theo t

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{df(t)}{dt}\psi(x) \tag{6}$$

và đạo hàm bậc hai theo x

$$\frac{\partial\Psi^2(x,t)}{\partial x^2} = f(t)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \tag{7}$$

Thế (6) và (7) vào (4), ta được

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{df(t)}{dt}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}f(t)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)f(t) \tag{8}$$

Chia hai vế (8) cho $f(t)\psi(x)$, ta được

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{1}{f(t)}\frac{df(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) \tag{9}$$

Nhìn vào (9) ta thấy vế phải không phụ thuộc vào t; trong khi đó vế trái không phụ thuộc vào x. Như vậy phương trình không phụ thuộc vào cả x và t; nó phải bằng một hằng số. Đặt hằng số này là E

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{1}{f(t)}\frac{df(t)}{dt} = E = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) \tag{10}$$

Xét vế trái của phương trình

$$\frac{df(t)}{f(t)} = -\frac{iE}{\hbar}dt \tag{11}$$

Lấy tích phân cả hai vế phương trình theo t, ta được

$$lnf(t) = -\frac{iEt}{\hbar} + C \tag{12}$$

với C là hằng số tích phân. Từ đó, ta có

$$f(t) = e^C e^{-iEt/\hbar} = Ae^{-iEt/\hbar} \tag{13}$$

Hằng số A có thể được nhân vào hàm $\psi(x)$. Như vậy, ta được

$$f(t) = e^{-iEt/\hbar} \tag{14}$$

Tiếp theo, ta xét vế phải của phương trình (10)

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)$$

Suy ra

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{15}$$

Phương trình (15) được gọi là *phương trình Schroedinger không phụ thuộc thời gian* cho một hạt có khối lượng m di chuyển trong không gian một chiều. Nó được dùng để tìm năng lượng cũng như hàm sóng cho rất nhiều hệ khác nhau.

Ta có thể viết lại (15) như sau

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi(x) = 0 \tag{16}$$

Hằng số E có điểm gì đặc biệt? Ta thấy E xuất hiện trong biểu thức $[E - V(x)]$, nên nó cùng thứ nguyên với thế năng V. Nghĩa là, E cùng thứ nguyên với năng lượng. Thật vậy, E chính là năng lượng của hệ.

Như vậy, tồn tại các hàm sóng có dạng

$$\Psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(x) \tag{17}$$

Hàm sóng (17) là hàm phức. Bình phương trị tuyệt đối của một số phức là tích của nó với *liên hợp phức*[3] của nó. Như vậy, mật độ xác suất $|\Psi(x,t)|^2$ được tính như sau

$$|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi \tag{18}$$

trong đó dấu sao (*) kí hiệu cho liên hợp phức. Đối với hàm sóng (17), ta có

$$|\Psi(x,t)|^2 = [e^{-iEt/\hbar}\psi(x)]^* e^{-iEt/\hbar}\psi(x) = e^{iEt/\hbar}[\psi(x)]^* e^{-iEt/\hbar}\psi(x) \tag{19}$$

ở đây ta giả sử E là số thực nên $E = E^*$. Ta có

$$e^{-iEt/\hbar}e^{-iEt/\hbar} = e^0 = 1$$

Do đó, (19) trở thành:

$$|\Psi(x,t)|^2 = [\psi(x)]^*\psi(x) = |\psi(x)|^2 \tag{20}$$

Như vậy, nếu nghiệm $\Psi(x,t)$ của phương trình Schroedinger phụ thuộc thời gian là tích của hàm theo thời gian và hàm theo tọa độ

$$\Psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(x)$$

với năng lượng E là hằng số, thì mật độ xác suất là $|\psi(x)|^2$ và không đổi theo thời gian. Những trạng thái như thế này được gọi là ***trạng thái tĩnh*** (stationary state). Hàm $\psi(x)$ cũng được gọi là hàm sóng, mặc dù hàm sóng đầy đủ của một trạng thái tĩnh là $e^{-iEt/\hbar}\psi(x)$. Trạng thái tĩnh trong trường

[3] Liên hợp phức của $i = -i$.

hợp này được hiểu là mật độ xác suất $|\Psi(x,t)|^2$ không thay đổi theo thời gian, chứ không phải hạt không thay đổi.

Phương trình Schroedinger (15) chứa hai ẩn số là năng lượng được phép E và hàm sóng ψ. Để giải phương trình chứa hai ẩn, chúng ta cần áp đặt thêm một số điều kiện (được gọi là *điều kiện biên - boundary conditions*) lên ψ bên cạnh yêu cầu nó thỏa mãn (15); điều kiện biên xác định năng lượng cho phép E của hệ nên chỉ những giá trị xác định của E thì ψ mới phù hợp với điều kiện biên.

3 Sự chuẩn hóa hàm sóng

3.1 Xác suất

Sự chuẩn hóa hàm sóng có liên quan đến xác suất tìm thấy hạt trong không gian. Vì vậy, trước hết ta sẽ giới thiệu sơ lược về của xác suất.

Có nhiều khái niệm đưa ra để định nghĩa xác suất. Ở đây, chúng ta định nghĩa xác suất theo lối thống kê: Thực hiện phép thử n lần. Giả sử biến cố A xuất hiện m lần. Khi đó, m được gọi là tần số của biến cố A và tỉ số $\dfrac{m}{n}$ được gọi là tần số xuất hiện biến cố A trong loạt phép thử. Cho số phép thử tăng lên vô hạn, tần số xuất hiện biến cố A dần về một số xác định gọi là xác suất của biến cố A

$$P_A = \lim_{n\to\infty} \frac{m}{n}$$

Ví dụ, sau 1000 lần đi qua ngã tư, có 200 lần gặp đèn đỏ. Khi đó, xác suất để gặp đèn đỏ là $\dfrac{200}{1000} = \dfrac{1}{5}$.

Trong trường hợp nếu phép thử có nhiều biến cố xuất hiện thì phép tính xác suất sẽ phức tạp hơn. Ví dụ, trong một hộp chứa 10 viên bi, trong đó có 4 viên màu xanh và 6 viên màu đỏ. Lần lượt lấy ra 2 viên bi, không hoàn lại. Trong trường hợp này, xác suất để hai viên bi đó đều màu đỏ được tính như sau.

Ta thấy xác suất để lần lấy thứ nhất được viên bi màu đỏ là $\dfrac{6}{10}$. Vì lấy không hoàn lại, nên sau lần lấy thứ nhất, số viên bi còn lại trong hộp là 9, trong đó còn lại 5 viên màu đỏ, giả sử lần lấy thứ nhất ta được viên màu đỏ. Do đó, xác suất để lần lấy thứ hai cũng viên bi màu đỏ sẽ là $\dfrac{5}{9}$. Như vậy, tổng cộng ta có $5 \cdot 6 = 30$ lần sẽ thu được viên bi màu đỏ trong tổng số $9 \cdot 10 = 90$ lần thử. Kết quả xác suất để thu được hai viên bi đều màu đỏ là

$$P = \frac{6}{10} \cdot \frac{5}{9} = \frac{30}{90} = \frac{1}{3}$$

Xác suất trong cơ học lượng tử thường liên quan đến một biến liên tục, đó là tọa độ x. Không có nhiều ý nghĩa nếu chúng ta nói rằng xác suất của một hạt được tìm thấy tại một điểm cụ thể nào đó, chẳng hạn tại $x = 0,500$.

Thay vào đó, ta sẽ nói xác suất tìm thấy hạt trong một khoảng nhỏ trên trục x từ x đến $x + dx$. Xác suất sẽ tỉ lệ thuận với giá trị dx và sẽ thay đổi theo những vùng khác nhau trên trục x. Vì vậy, xác suất tìm thấy hạt từ x đến $x + dx$ sẽ là một hàm biến thiên theo x, ví dụ $g(x)$. Hàm $g(x)$ được gọi là mật độ xác suất, vì nó là xác suất trên một đơn vị chiều dài. Bởi vì xác suất phải là một số thực, không âm nên $g(x)$ cũng phải là hàm thực và không âm tại mọi điểm.

Hàm sóng Ψ có thể nhận giá trị âm và cũng có thể là hàm phức nên không phải là hàm mật độ xác suất. Theo cơ học lượng tử, hàm $|\Psi|^2$ là hàm mật độ xác suất.

3.2 Sự chuẩn hóa hàm sóng

Xác suất tìm thấy hạt trong vùng $a \leq x \leq b$ được tính bằng cách lấy tích phân $|\Psi|^2$ theo biến x từ $a \to b$

$$\int_a^b |\Psi|^2 dx \tag{21}$$

Bởi vì xác suất tìm thấy một hạt trong toàn bộ không gian là bằng đơn vị nên chúng ta có yêu cầu

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = 1 \tag{22}$$

Khi hàm Ψ thỏa mãn điều kiện trên thì được gọi là ***chuẩn hóa***. Nếu hàm Ψ không chuẩn hóa nhưng thỏa mãn yêu cầu sau

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = \lambda^2 \tag{23}$$

với λ^2 là số không âm tùy ý, thì khi đó hàm Φ được xác định bởi

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{\lambda^2}}\Psi = \pm\frac{1}{\lambda}\Psi \tag{24}$$

là hàm chuẩn hóa. Thật vậy

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Phi|^2 dx = \frac{1}{\lambda^2}\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = \frac{1}{\lambda^2} \times \lambda^2 = 1$$

Như vậy, để $\Psi(x,t)$ có thể là hàm sóng, trước hết nó phải khả tích bình phương; nghĩa là $\Big|\Psi(x,t)\Big|^2$ phải có tích phân. Hơn nữa, tích phân của nó phải xác định. Vì vậy, $\Psi(x,t)$ phải dần về zero khi $x \to \pm\infty$. Tương tự, đạo hàm $\dfrac{\partial\Psi}{\partial x}$ phải dần về zero khi khi $x \to \pm\infty$.

Ngoài yêu cầu khả tích bình phương, hàm sóng cần phải đơn trị và liên tục. Xác suất tìm thấy hạt tại một điểm cụ thể không thể có hai giá trị khác nhau nên $\Psi^*\Psi$ phải đơn trị. Để $\Psi^*\Psi$ chắc chắn đơn trị, ta yêu cầu Ψ đơn trị. Bên cạnh yêu cầu hàm sóng phải liên tục, ta thường có thêm yêu cầu là các đạo hàm riêng phần của nó $\partial\Psi/\partial x, \partial\Psi/\partial y, \ldots$ cũng liên tục. Một hàm thỏa mãn những điều kiện như trên được gọi là hàm ***hoàn hảo*** (tiếng Anh *well-behaved*).

4 Nguyên lí chồng chất trạng thái

Phương trình Schroedinger là một phương trình vi phân tuyến tính. Vì vậy, nếu ψ_1 và ψ_2 là hai nghiệm của phương trình Schroedinger, thì $c_1\psi_1$, $c_2\psi_2$ (với c_1, c_2 là những hằng số) và ψ được xác định bởi

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \tag{25}$$

cũng là nghiệm của phương trình Schroedinger. Nguyên lí này còn được gọi là *nguyên lí chồng chất*. Áp dụng của nguyên lí chồng chất trong cơ học lượng tử được tóm tắt như sau:

Nếu Ψ_1 và Ψ_2 là những hàm sóng ứng với hai trạng thái của hệ thì trạng thái Ψ được mô tả bởi

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 \tag{26}$$

cũng là một trạng thái của hệ. Dĩ nhiên, chúng ta có thể mở rộng số trạng thái nhiều hơn hai.

Nếu Ψ là hàm sóng của một trạng thái thì $k\Psi$, với k là hằng số, cũng là một hàm sóng của trạng thái đó. Ví dụ, từ phương trình (24), ta thấy hai hàm sóng $\frac{1}{\lambda}\Psi$ và $-\frac{1}{\lambda}\Psi$ tương đương nhau, chúng đều mô tả một trạng thái của hệ. Tuy nhiên, theo thói quen, ta thường chỉ chọn $\frac{1}{\lambda}\Psi$.

5 Số phức

5.1 Dạng đại số của số phức

Nếu $i = \sqrt{-1}$, ta có thể biểu diễn một ***số phức*** hay ***số ảo*** z dưới dạng biểu thức $z = x + iy$, với x và y là những số thực. Số thực x được gọi là *phần thực*; số thực y được gọi là *phần ảo* của số phức z. Phần thực của số phức $z = x + iy$ được ký hiệu là *Re(z)*. Phần ảo của số phức $z = x + iy$ được ký hiệu là *Im(z)*. Hai số phức được gọi là bằng nhau nếu chúng có phần thực và phần ảo tương ứng bằng nhau.

Ví dụ: Tìm phần thực và phần ảo của số phức

$$z = (3 + 5i) + (2 - 3i)$$

Hướng dẫn:

$$z = (3+5i) + (2-3i) = (3+2) + (5i-3i) = (5+2i)$$

$$\text{Vậy} \qquad Re(z) = 5 \qquad \text{và} \qquad Im(z) = 2$$

Cho $z = x + iy$, thì số phức $z^* = x - iy$ được gọi là *số phức liên hợp* hay *liên hợp phức* của số phức $z = x + iy$

Ví dụ: Tìm liên hợp phức của số phức $z = (2+3i)(4-2i)$

Hướng dẫn:

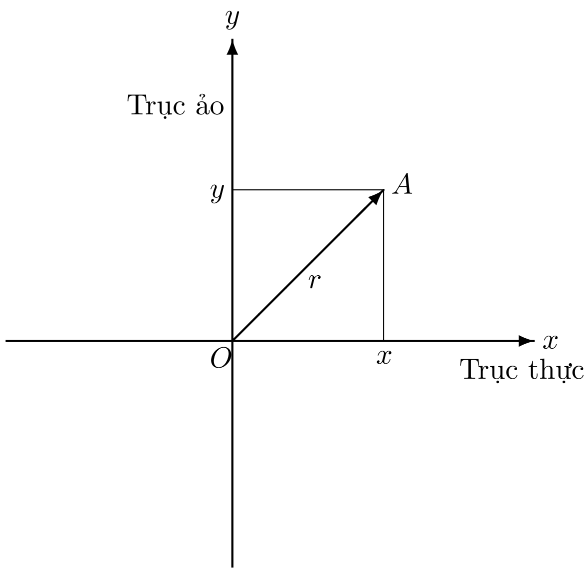
$$z = (2+3i)(4-2i) = (8-4i+12i-6i^2) = (8+8i+6) = (14+8i)$$

Như vậy

$$z^* = 14 - 8i$$

5.2 Dạng lượng giác của số phức

Một cách biểu diễn khác của số phức z là dựa vào mặt phẳng ảo (phức) xOy. Cho số phức $z = x + iy$ và $\overrightarrow{OA}$ là vectơ biểu diễn hình học của z trên mặt phẳng xOy. Độ dài $r = |\overrightarrow{OA}|$ của vectơ $\overrightarrow{OA}$ được gọi là ***trị tuyệt đối*** (absolute value) hay ***modulus*** của số phức z, ký hiệu là $|z|$. Góc θ được tạo bởi $\overrightarrow{OA}$ và trục x được gọi là ***phase*** hay ***agurment*** của z.



Ta có:

$$|z| = r = \sqrt{x^2 + y^2} \qquad x = r\cos\theta$$

$$y = r\sin\theta \qquad \tan\theta = \frac{y}{x}$$

Như vậy, ta có thể viết

$$z = x + iy = \sqrt{x^2 + y^2}(\frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} + \frac{iy}{\sqrt{x^2 + y^2}}) \tag{27}$$

hay

$$z = r(\cos\theta + i\sin\theta) = r\cos\theta + ir\sin\theta \tag{28}$$

Đây là dạng lượng giác của số phức.

Ví dụ: Tìm dạng lượng giác của số phức $z = -1 + i\sqrt{3}$

Hướng dẫn: Ta có $x = -1$; $y = \sqrt{3}$ và $r = \sqrt{(-1)^2 + 3} = 2$. Như vậy:

$$\cos\theta = \frac{x}{r} = \frac{-1}{2}$$

$$\sin\theta = \frac{b}{r} = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

Vậy

$$\theta = \frac{2\pi}{3}$$

Dạng lượng giác

$$z = r\cos\theta + ir\sin\theta = 2(\cos\frac{2\pi}{3} + i\sin\frac{2\pi}{3}) \tag{29}$$

Hai số phức dạng lượng giác được gọi là bằng nhau khi $r_1 = r_2$ và $\theta_1 = \theta_2 + 2k\pi$. Khi nhân hai số phức dạng lượng giác, trị tuyệt đối nhân với nhau còn góc thì cộng lại

$$z_1 z_2 = r_1 r_2[\cos(\theta_1 + \theta_2) + i\sin(\theta_1 + \theta_2)] \tag{30}$$

5.3 Dạng mũ của số phức

Dạng mũ của số phức có thể được thiết lập như sau. Đặt $f(\theta)$ là hàm thỏa điều kiện

$$f(\theta) = (\cos\theta + i\sin\theta)e^{-i\theta} \tag{31}$$

Lấy đạo hàm (31) theo θ, ta có

$$\frac{d}{d\theta}f(\theta) = (\cos\theta + i\sin\theta)\frac{d}{d\theta}e^{-i\theta} + e^{-i\theta}\frac{d}{d\theta}(cos\theta + isin\theta) \tag{32}$$

Áp dụng

$$(\sin x)' = \cos x; \qquad (\cos x)' = -\sin x; \qquad (e^{ax})' = ae^{ax}$$

Ta suy ra

$$f'(\theta) = (\cos\theta + i\sin\theta)(-i)e^{-i\theta} + e^{-i\theta}(-\sin\theta + i\cos\theta) \tag{33}$$

Sau khi đơn giản (33), ta có

$$f'(\theta) = 0$$

Như vậy $f(\theta)$ phải là hàm không thay đổi theo θ. Bởi vì $f(0)$ được xác định, nên ta luôn có $f(\theta) = f(0)$. Hay

$$(\cos\theta + i\sin\theta)e^{-i\theta} = (\cos 0 + i\sin 0)e^{-i0} = e^0 = 1 \tag{34}$$

Nhân hai vế (34) với $e^{i\theta}$, ta có

$$(\cos\theta + i\sin\theta)e^{-i\theta}e^{i\theta} = e^{i\theta} \tag{35}$$

vì $e^{-i\theta}e^{i\theta} = e^0 = 1$, nên (35) trở thành

$$(\cos\theta + i\sin\theta) = e^{i\theta} \tag{36}$$

hay

$$z = r(\cos\theta + i\sin\theta) = re^{i\theta} \tag{37}$$

Đây chính là dạng mũ của số phức. Khi đó, liên hợp phức của z là

$$z^* = x - iy = re^{-i\theta} \tag{38}$$

Nếu z là số thực thì phần ảo của nó phải là zero. Vậy nên z chỉ là số thực khi và chỉ khi $z = z^*$. Lấy tích của z với liên hợp phức của nó $z = z^*$, ta được

$$zz^* = (x+iy)(x-iy) = (x^2 - i^2y^2) = x^2 + y^2 = r^2 = |z|^2 \tag{39}$$

Khi thực hiện các phép toán đối với số phức, để đơn giản chúng ta nên dùng dạng mũ. Muốn tìm dạng mũ từ dạng đại số ta chuyển dạng đại số sang dạng lượng giác trước.

Ví dụ: Tìm dạng mũ của $z = -\sqrt{3} + i$

Hướng dẫn: Ta có dạng lượng giác

$$z = 2(\cos\frac{5\pi}{6} + i\sin\frac{5\pi}{6})$$

Vậy dạng mũ là

$$z = 2e^{i5\pi/6}$$

Bài tập

1. Một hộp chứa 100 viên bi, trong đó có 60 viên nặng 14 gam và 40 viên nặng 15 gam. Tính xác suất để sau hai lần bốc liên tiếp (không hoàn lại) ta được hai viên bi có khối lượng tổng cộng là (a) 28 gam; (b) 30 gam; (c) 29 gam.

2. Cho $c = \frac{\sqrt{3}}{2}e^{2ix}$. Tính $|c|^2$.

3. Tìm dạng lượng giác của (a) $z = e^{2+i\theta}$; (b) $z = e^{a+i\pi/2}$.

4. Tìm trị tuyệt đối và phase của: (a) i; (b) $ae^{i\pi/3}$; (c) $1 - 2i$.

5. Cho hàm phức $z = ae^{im\varphi}$. Với a và m là những hằng số thực.

   a) Tính $|z|^2$.

   b) Viết phương trình dạng lượng giác của z.

6. Cho biết hàm sau đây đã chuẩn hóa

$$f(x) = \left(\frac{b}{\pi}\right)^{1/4} e^{-bx^2/2}$$

Trong đó b là hằng số thực. Áp dụng điều kiện chuẩn hóa, tính tích phân

$$\int_0^\infty e^{-bx^2} dx$$

7. Nếu ψ_1, ψ_2 và $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ là những nghiệm của một phương trình Schroedinger thì chúng sẽ *chuẩn hóa* và *trực giao với nhau*; nghĩa là

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*\psi_1 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^*\psi_2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\psi dx = 1$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*\psi_2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^*\psi_1 dx = 0$$

Từ tính chuẩn hóa và trực giao của hàm sóng, hãy chứng minh

a. Tổng bình phương trị tuyệt đối các hệ số c_1, c_2 bằng đơn vị

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$$

b. Năng lượng của trạng thái ψ_1 được tính như sau

$$E_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + V(x)\psi_1(x)\Big] dx$$