บทที่ 1
ทบทวนคณิตศาสตร์ที่สำคัญในกลศาสตร์ควอนตัม

1.1 เวกเตอร์สเปซเชิงเส้น (Linear Vector Spaces)

ฟังก์ชันคลื่นในระบบควอนตัมใด ๆ อาจจะถือว่าเป็นเวกเตอร์ตัวหนึ่งในเวกเตอร์สเปซเชิงเส้นอันหนึ่ง เวกเตอร์สเปซเชิงเส้นชนิดนี้เรียกว่า สเปซของฮิลเบอร์ท (Hilbert Space) ฟังก์ชันไอเกนออร์ทอนอร์มอลที่สมบูรณ์ชุดหนึ่ง อาจถือว่าเป็นชุดฟังก์ชันมูลฐาน หรือฟังก์ชันที่มีขนาดหนึ่งหน่วยชุดหนึ่ง ซึ่งเราอาจจะใช้หลักการซ้อนทับ (superposition) เช่น ในสมการ

$$\Psi = \sum_{i=1}^{N} a_i u_i \qquad (1\text{-}1)$$

u_i's เป็นชุดฟังก์ชันไอเกนออร์ทอนอร์มอลที่สมบูรณ์ชุดหนึ่ง ฟังก์ชันคลื่น Ψ ถูกกระจายเป็น N ส่วน ตามฟังก์ชันขนาดหนึ่งหน่วยซึ่งชี้ไปตามทิศต่าง ๆ N ทิศเหล่านั้น ทิศที่ i จะมี u_i เป็นฟังก์ชันที่มีขนาด 1 หน่วย (unit vector)

ถ้าปรากฏว่า Ψ ชี้ไปทางทิศใดทิศหนึ่งในจำนวน N ทิศของทิศทั้งหมด นับว่าระบบควอนตัมนั้นอยู่ในสถานะควอนตัมที่แน่นอน สถานะควอนตัมนั้นแทนได้ด้วยเวกเตอร์มูลฐานซึ่งชี้ไปในทิศเดียวกับ Ψ เพื่อให้ง่ายขึ้น สมมุติว่า u_i แทนเวกเตอร์หนึ่งหน่วย ในสามมิติ (Eucledian Space) ดังนั้น $u_1 = \hat{i}$, $u_2 = \hat{j}$, และ $u_3 = \hat{k}$ ให้ Ψ แทนด้วยเวกเตอร์ใด ๆ A ในสามมิติ ทำให้

$$A = A_x\hat{i} + A_y\hat{j} + A_z\hat{k} \qquad (1\text{-}2)$$

ถ้าหาก $\bar{A} = A\hat{i}$ จะเห็นว่า $\bar{A} = A\hat{i}$ แทนระบบฟิสิกส์ทั้งหมด นับว่าระบบฟิสิกส์ทั้งหมด (ซึ่งแทนด้วยเวกเตอร์ $\bar{A}$) มีสถานะไอเกนซึ่งแทนได้ด้วย เวกเตอร์ขนาด 1 หน่วย $\hat{i}$

คุณสมบัติของเวกเตอร์สเปซเชิงเส้น

1.1.1 มีเวกเตอร์ขนาดหนึ่งหน่วย (unit vector)

1.1.2 การบวกจะมีคุณสมบัติสลับที่ (commutation) และ การรวมตัว (associativity) นั่นคือ ถ้า Ψ_1, Ψ_2, และ Ψ_3 เป็นเวกเตอร์ในเวกเตอร์สเปซแล้ว

$$\Psi_1+\Psi_2 = \Psi_2+\Psi_1 \quad : \text{ สลับที่กันได้}$$

$$(\Psi_1+\Psi_2)+\Psi_3 = \Psi_1+(\Psi_2+\Psi_3) \quad : \text{ มีการรวมตัวกันได้}$$

1.1.3 มีการคูณแบบสเกลาร์คือ

$$<\Psi_1|\Psi_2> = \int_V \Psi_1^*\Psi_2\, dV = <\Psi_2|\Psi_1>^* \tag{1-3}$$

$\Psi = \Psi(z)$ เมื่อ z เป็นเลขจำนวนเชิงซ้อน ดังนั้น Ψ เป็นเวกเตอร์ซึ่งเป็นสมาชิกของเวกเตอร์สเปซ โดยมีตัวแปรเป็นเลขจำนวนเชิงซ้อน ซึ่งเลขจำนวนเชิงซ้อนนี้เป็นกลุ่มทางคณิตศาสตร์ซึ่งเรียกว่า ฟิลด์ เวกเตอร์สเปซนี้มีชื่อเรียกว่า เวกเตอร์สเปซเชิงซ้อนหรือยูนิทารีสเปซ (Unitary space)

การที่สมการ (1-3) มีคุณสมบัติ $<\Psi_1|\Psi_2> = <\Psi_2|\Psi_1>^*$ เรียกว่า ผลคูณของเวกเตอร์สองตัวในยูนิทารีสเปซ มีสมมาตรเฮอร์มิเชียน (Hermitian symmetry) ถ้าบังเอิญ Ψ_i เป็นค่าจริง ผลคูณของมันจะเป็นค่าจริงด้วย

ถ้า $\Psi = \Psi_1+\Psi_2$ ดังนั้น

$<\Psi_3|\Psi> = <\Psi_3|\Psi_1>+<\Psi_3|\Psi_2>$ คุณสมบัตินี้เรียกว่า การกระจายเชิงเส้นของการคูณแบบสเกลาร์

คำนิยาม

เวกเตอร์สองเวกเตอร์ในยูนิทารีสเปซตั้งได้ฉากกัน หากการคูณแบบสเกลาร์ของเวกเตอร์ทั้งสองเป็นศูนย์

คำนิยาม

ชุดของเวกเตอร์ Ψ_i's เป็นชุดของเวกเตอร์ที่มีอิสระเชิงเส้น ถ้าชุดของเวกเตอร์นี้มีคุณสมบัติดังนี้

$$\Sigma\, c_i\Psi_i = 0 \tag{1-4}$$

เมื่อสัมประสิทธิ์ทุก ๆ ตัว (c_i's) เป็นศูนย์หมด

ตัวอย่าง $a\hat{i}+b\hat{j}+c\hat{k} = 0$ เมื่อ

$a = b = c = 0$ เท่านั้น

แสดงว่า $\hat{i}$, $\hat{j}$, และ $\hat{k}$ เป็นอิสระเชิงเส้น

ชุดของเวกเตอร์ขนาดหนึ่งหน่วย ตั้งได้ฉากซึ่งกันและกันและมีอิสระเชิงเส้น $\{\hat{\Psi}_i\}$ จำนวน N ตัว จัดว่าเป็นเวกเตอร์มูลฐาน (basis) สำหรับ สเปซ N มิติ เวกเตอร์ใด ๆ ในสเปซนี้อาจจะกระจายให้อยู่ในรูปของผลบวกของสมาชิกเวกเตอร์ซึ่งมีทิศตามทิศของ $\hat{\Psi}_i$ เหล่านี้

ทฤษฎี : การกระจายเวกเตอร์ใด ๆ บนชุดของเวกเตอร์มูลฐานชุดหนึ่ง ย่อมทำได้แบบเดียว

พิสูจน์ สมมุติว่า Ψ เป็นเวกเตอร์ใด ๆ ซึ่งกระจายบนชุดเวกเตอร์มูลฐาน $\{\hat{\Psi}_i\}$

ให้ $$\Psi = \sum_{i=1}^{N} c_i\hat{\Psi}_i$$ ในขณะเดียวกันก็ให้

$$\Psi = \sum_{i=1}^{N} c_i'\hat{\Psi}_i$$ ด้วย

จะเห็นว่า $$\sum_i (c_i - c_i')\hat{\Psi}_i = 0 \qquad (1\text{-}5)$$

แต่เนื่องจากชุดของเวกเตอร์มูลฐาน $\{\hat{\Psi}_i\}$ เป็นอิสระเชิงเส้น แสดงว่า

สมการ (1-5) เป็นจริงเมื่อ

$c_i - c_i' = 0$ ทุก c_i และ c_i'

นั่นคือ $c_i = c_i'$

แสดงว่า การกระจาย Ψ บนชุดของเวกเตอุร์มูลฐาน $\{\hat{\Psi}_i\}$ ทำได้แบบเดียวเท่านั้น

ทฤษฎี : การคูณแบบสเกลาร์ของเวกเตอร์ใด ๆ กับตัวมันเองย่อมเป็นค่าบวกเสมอ (positive definite)

พิสูจน์ ให้ Ψ เป็นเวกเตอร์ใด ๆ

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \langle\sum_j c_j\hat{\Psi}_j|\sum_i c_i\hat{\Psi}_i\rangle = \sum_{i,j} c_i c_j^* \langle\hat{\Psi}_j|\Psi_i\rangle$$

$$= \sum_{i,j} c_i c_j^* \delta_{ij} = \sum_i |c_i|^2 \geqslant 0$$

คำนิยาม ขนาดของเวกเตอร์หาได้จากขบวนการณ์ต่อไปนี้ ถ้า Ψ เป็นเวกเตอร์ใด ๆ ใน เวกเตอร์สเปซ ขนาดของ Ψ คือ

$$|\Psi| = \sqrt{<\Psi|\Psi>} = \sqrt{\Sigma |c_i|^2}$$

เวกเตอร์ที่มีขนาดเป็นหนึ่งเรียกว่า นอร์มอลไลซด์เวกเตอร์ (normalized vector)

ทฤษฎี : เวกเตอร์สองตัว Ψ_a และ Ψ_b เป็นไปตามความไม่เท่ากันของชวาร์ทซ (Schwartz inequality) $<\Psi_a|\Psi_a><\Psi_b|\Psi_b> \geqslant |<\Psi_a|\Psi_b>|^2$

พิสูจน์ ให้ $\Psi = \Psi_a + b\Psi_b$ ดังนั้น $<\Psi|\Psi>$ ย่อมเป็นบวกเสมอ ทำให้

$$<\Psi_a + b\Psi_b|\Psi_a + b\Psi_b> = <\Psi_a|\Psi_a> + b<\Psi_a|\Psi_b>$$
$$+ b^*<\Psi_b|\Psi_a> \qquad + |b|^2<\Psi_b|\Psi_b \geqslant 0 \tag{1-6}$$

เลือกค่าของ b ซึ่งทำให้ $<\Psi|\Psi>$ มีค่าต่ำที่สุด ดังนั้น

$\frac{\partial}{\partial b} <\Psi|\Psi> = 0$ แสดงว่า

$$<\Psi_a|\Psi_b> + b^*<\Psi_b|\Psi_b> = 0$$

$$b^* = -\frac{<\Psi_a|\Psi_b>}{<\Psi_b|\Psi_b>} \tag{1-7}$$

แทนค่า b จาก (1.7) ใน (1.6)

$$<\Psi_a|\Psi_a> - \frac{<\Psi_b|\Psi_a><\Psi_a|\Psi_b>}{<\Psi_b|\Psi_b>} - \frac{<\Psi_a|\Psi_b><\Psi_b|\Psi_a>}{<\Psi_b|\Psi_b<}$$

$$+ \frac{|<\Psi_b|\Psi_a>|^2}{<\Psi_b|\Psi_b>^2} <\Psi_b|\Psi_b> \geqslant 0$$

$$\therefore \quad <\Psi_a|\Psi_a><\Psi_b|\Psi_b> - |<\Psi_a|\Psi_b>|^2 \geqslant 0$$

ในสามมิติ ความไม่เท่ากันของชวาร์ทซ อาจเขียนได้ดังนี้

$$(X.X)(\bar{Y}.\bar{Y}) \geqslant (\bar{X}.\bar{Y})^2 \quad \text{หรือ}$$

$$|X|\,|\bar{Y}| \geqslant (\bar{X}.\bar{Y}) \tag{1-8}$$

$$\cos(\bar{X},\bar{Y}) = \frac{\bar{X}.\bar{Y}}{|\bar{X}|\,|\bar{Y}|} \tag{1-9}$$

ใน N มิติ เรามักจะหามุมระหว่างเวกเตอร์เลียนแบบสามมิติดังนี้

$$\cos(\Psi_a,\Psi_b) = \frac{<\Psi_a|\Psi_b>}{\left|<\Psi_a|\Psi_a> \; <\Psi_b|\Psi_b>\right|^{1/2}} \tag{1-10}$$

1.2 การแปลงเชิงเส้น

ถ้าหากเรามีความสัมพันธ์เชิงเส้น

$$\Psi_b = Q\Psi_a \tag{1-11}$$

แสดงว่าตัวดำเนินการเชิงเส้น Q ได้แปลงเวกเตอร์ Ψ_a เป็นเวกเตอร์ Ψ_b สมการไอเกนนับเป็นกรณีพิเศษ ทิศของเวกเตอร์ในกรณีของสมการไอเกน ไม่เปลี่ยนไปด้วยอำนาจของตัวดำเนินการทำให้

$$Q\Psi_a = q\Psi_a \tag{1-12}$$

มีตัวดำเนินการพิเศษอยู่สองชนิดซึ่งเราจะกล่าวถึง ณ บัดนี้คือ

ตัวดำเนินการศูนย์ (null operator)

$$0\Psi_a = 0 \tag{1-13}$$

ตัวดำเนินการเอกลักษณ์ (identity operator)

$$1\Psi_a = \Psi_a \tag{1-14}$$

การคูณของตัวดำเนินการหมายถึง ผลซึ่งตัวดำเนินการได้ทำต่อฟังก์ชันคลื่นต่อเนื่องกันไป เช่น

ถ้า $\Psi_c = P\Psi_b$ และ $\Psi_b = Q\Psi_a$ แล้ว

$\Psi_c = PQ\Psi_a$ ให้ $\Psi_c = R\Psi_a$ ดังนั้น

$$R = PQ \tag{1-15}$$

สมการที่ (1-15) เป็นผลคูณของตัวดำเนินการ

ถ้าทุก ๆ ค่าของเวกเตอร์ Ψ_a มีเวกเตอร์ Ψ_b ซึ่งได้จากสมการ $\Psi_b = Q\Psi_a$ และในทางที่กลับกัน สำหรับทุก ๆ ค่าของ Ψ_b มีเวกเตอร์ Ψ_a ซึ่งได้จากสมการ $\Psi_a = P\Psi_b$ ดังนั้น

$$\Psi_a = P\Psi_b = PQ\Psi_a \tag{1-16}$$

ทำให้เราอาจจะเขียนสมการตัวดำเนินการได้ว่า

$$PQ = 1 \tag{1-17}$$

แสดงว่าการดำเนินการ Q ถ้าตามด้วยการดำเนินการ P จะให้ผลลัพธ์เป็นการดำเนินการด้วยตัวดำเนินการเอกลักษณ์

คำนิยาม

ตัวดำเนินการ Q เป็นตัวดำเนินการปกติ (non-singular) ถ้า $Q\Psi = 0$ ต่อเมื่อ Ψ เป็นเวกเตอร์ศูนย์ (null vector)

ในสมการ (1-17) ถ้าทั้ง P และ Q เป็นตัวดำเนินการปกติ แสดงว่า

$P = Q^{-1}$: P เป็นตัวดำเนินการผกผันทางซ้ายของ Q และ

$Q = P^{-1}$: Q เป็นตัวดำเนินการผกผันทางขวาของ P

ถ้าหากตัวดำเนินการ P และ Q สับเปลี่ยนกันได้ ตัวดำเนินการผกผันอาจจะใช้ได้ทั้งทางซ้ายและทางขวา

1.3 สัญกรณ์ของดิรัก (Dirac notation)

ดิรักเรียก เวกเตอร์ในฮิลเบอร์ทสเปซ หรือ ฟังก์ชันคลื่นว่า เวกเตอร์เคท (ket vector) ตัวอย่างของเวกเตอร์เคทมีดังนี้

$\Psi_a \quad = \quad |\Psi_a> \quad$ หรือ $\quad |a>$

$Y_\ell^m(\Omega) \quad$: spherical harmonics $\quad = \quad |\ell,m>$

$R_{n\ell}(r) \quad$: ฟังก์ชันคลื่นตัวแปรรัศมีของอะตอมของไฮโดรเจน

$\quad = \quad |n,\ell>$

$R_{n\ell}(r)\, Y_\ell^m(\Omega)$: ฟังก์ชันคลื่นของไฮโดรเจนอะตอม

$\quad = \quad |n,\ell,m>$ ฯลฯ

เวกเตอร์มูลฐานเรียกว่า ไอเกนเคท (eigenket) ดังนั้น เวกเตอร์เคทใด ๆ อาจจะเขียนให้อยู่ในรูปของผลบวกเชิงเส้นของ ไอเกนเคทได้ดังนี้

$$|\Psi> \quad = \quad \sum_{i=1}^{N} c_i|i> \tag{1-18}$$

ถ้าเวกเตอร์สเปซนั้นมี N มิติ

ตัวดำเนินการเชิงเส้นกระทำต่อ เวกเตอร์เคททางด้านซ้าย ทำให้สามารถเขียนสมการไอเกนได้ดังนี้

$$Q\,|a> \quad = \quad q_a\,|a> \tag{1-19}$$

เฮอร์มิเชียนสังยุคของทุก ๆ เวกเตอร์เคท เรียกว่าเวกเตอร์บระ (bra vector) เขียนแทนด้วยสัญลักษณ์ $<a|$ หรือ $<\Psi_a|$ ทำให้เวกเตอร์บระ เป็นเวกเตอร์ในเวกเตอร์สเปซซึ่งมีมิติเท่ากับ เวกเตอร์สเปซของเวกเตอร์เคท เวกเตอร์สเปซของเวกเตอร์บระและเวกเตอร์เคท เป็นเวกเตอร์สเปซคู่ (dual vector space) การจับคู่กันของเวกเตอร์บระกับเวกเตอร์เคท เป็นประเภทหนึ่งต่อหนึ่ง ทุกเวกเตอร์เคทจะมีเวกเตอร์บระ และทุก ๆ เวกเตอร์บระจะมีเวกเตอร์เคท ตัวดำเนินการเชิงเส้นจะกระทำบนเวกเตอร์บระทางด้านซ้าย ดังนั้น สมการที่ (1.19) จะเขียนเสียใหม่ได้ว่า

$$<a|Q^+ \quad = \quad q_a<a| \tag{1-20}$$

Q^+ คือ เฮอร์มิเชียนสังยุคของตัวดำเนินการเชิงเส้น Q

การคูณแบบสเกลาร์ของเวกเตอร์จะมีลักษณะดังนี้

$<a|a>$: การคูณแบบสเกลาร์ของ $|a>$ ด้วย $|a>$ (1-21)

$<a|b>$: การคูณแบบสเกลาร์ของ $|b>$ ด้วย $|a>$ (1-22)

$$<a|b> \quad = \quad <b|a>^* \tag{1-23}$$

จากสมการ (1•19) ค่าคาดหมายของตัวดำเนินการ Q จะเป็น

$$<a||Q||a> \quad = \quad q_a<a|a> \quad = \quad q_a \tag{1-24}$$

ถ้า $|a>$ เป็นเวกเตอร์มีขนาดหนึ่งหน่วย

เราอาจจะสร้างตัวดำเนินการเชิงเส้นขึ้นใหม่ตัวหนึ่งดังนี้

$$P(a) \quad = \quad |a> <a| \tag{1-25}$$

ตัวดำเนินการ P อาจจะกระทำบนเวกเตอร์บระ หรือเวกเตอร์เคทก็ได้ เช่น

$$<b|a> <a| \quad = \quad \alpha <a| \quad , \quad \alpha \quad = \quad <b|a> \tag{1.26}$$

แสดงว่า เวกเตอร์ $<b|$ ถูกแปลงให้อยู่ในทิศ $<a|$, α เป็นค่าสัมประสิทธิ์ของ $<b|$ ในทิศ $<a|$ (ในสามมิติ ถ้าเรากระจายเวกเตอร์ $\overline{A}$ ในทิศของเวกเตอร์ $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$; $(\overline{A}.\hat{i})$ จะเป็นค่าสัมประสิทธิ์ของ $\overline{A}$ ในทิศ $\hat{i}$)

$$|a> <a|c> \quad = \quad \beta\,|a> \quad , \quad \beta \quad = \quad <a|c> \tag{1-27}$$

ในที่นี้ เวกเตอร์ $|c>$ ถูกแปลงให้อยู่ในทิศ $|a>$ โดยมี β เป็นค่าสัมประสิทธิ์ของ $|c>$ ในทิศ $|a>$ ด้วยเหตุที่ $|a> <a|$ มีคุณสมบัติดังนี้ จึงเรียกว่า P(a) เป็นตัวดำเนินการฉาย (projection operator) ตัวดำเนินการฉายมีคุณสมบัติที่สำคัญอยู่ประการหนึ่งคือ ตัวดำเนินการฉายที่กระทำซ้ำ ๆ กัน จะเหมือนว่าตัวดำเนินการฉายนั้นกระทำอยู่เพียงครั้งเดียว เช่น

$$\begin{aligned} P^2(a) &= P(a)\,P(a) = |a> <a|a> <a| = |a>\,1\,<a| \\ &= |a> <a| = P(a) \end{aligned} \tag{1-28}$$

สมมุติว่าเรามี ชุดเวกเตอร์มูลฐานออร์ทอนอร์มอลที่สมบูรณ์ $|i>$ ให้ $P(i)$ เป็นตัวดำเนินการฉาย ซึ่งแปลงเวกเตอร์ใด ๆ ให้อยู่ในรูปของผลบวกของ $|i>$ ให้ $|a>$ เป็นเวกเตอร์ใด ๆ ดังนั้น

$$|a> \;=\; \sum_{i=1}^{N} c_i|i> \tag{1-29}$$

$$P(j)|a< \;=\; |j> <j|a> \;=\; \sum_i c_i|j> <j|i>$$

$$= \sum_i c_i|j> \delta_{ij} \;=\; c_j|j> \tag{1-30}$$

c_i เป็นสัมประสิทธิ์ของการฉายเวกเตอร์ $|a>$ ลงบนเวกเตอร์มูลฐานที่ $|j>$ ถ้าหากเราบวกทุก ๆ ค่าของ j นั่นคือ

$$\sum P(j)|a> \;=\; \sum_{j=1}^{N} |j> <j\,a>$$

$$= \sum_j \sum_i |j> <j|i> c_i$$

$$= \sum_j \sum_i |j> \delta_{ij}\, c_i$$

$$= \sum_i c_i|i> \;=\; |a> \tag{1-31}$$

แสดงว่า

$$\sum_{i=1}^{N} |i> <i| \;=\; 1 \tag{1-32}$$

1.4 การทำตัวดำเนินการเชิงเส้นให้อยู่ในรูปของเมทริกซ์

ให้ $\{|i>\}$ เป็น เวกเตอร์มูลฐานออร์ทอนอร์มอล สำหรับเวกเตอร์ซึ่งมี N มิติ ดังนั้น

$$<i|j> \;=\; \delta_{ij} \tag{1-33}$$

$$i,j = 1,2,\ldots,N$$

ให้ $$|a> = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j |j> \qquad (1\text{-}34)$$

$$\therefore \quad \alpha_j = <j|a> \qquad (1\text{-}35)$$

สมมุติว่าเรามีสมการการแปลงเวกเตอร์ซึ่งต้องการจะเขียนให้อยู่ในรูปของเมทริกซ์ดังนี้

$$|b> = Q|a> \qquad (1\text{-}36)$$

Q เป็นตัวดำเนินการเชิงเส้น

$$|b> = \sum_{k=1}^{N} \beta_k |k> = Q \sum_{j=1}^{N} \alpha_j |j> = \sum_j \alpha_j Q|j> \qquad (1\text{-}37)$$

คูณสมการ (1-37) ด้วย $<i|$

$$<i|b> = \sum_k \beta_k <i|k> = \sum_j \alpha_j <i|Q|j>$$

ทำให้ $$\beta_i = \sum_{j=1}^{N} Q_{ij}\,\alpha_j \qquad (1\text{-}38)$$

โดยที่ β_i เป็นสัมประสิทธิ์ที่ได้จากการฉาย หรือการแปลง เวกเตอร์ $|b>$ บนเวกเตอร์มูลฐานออร์ทอนอร์มอล เช่นเดียวกับที่ α_j เป็นสัมประสิทธิ์ที่ได้จากการฉายเวกเตอร์ $|a>$ บนเวกเตอร์มูลฐานชุดเดียวกัน ดังนั้นสมการ (1-36) ในรูปของเมทริกซ์ก็คือ

$$\begin{vmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_N \end{vmatrix} \qquad \begin{vmatrix} Q_{11} & Q_{12} & \cdots & Q_{1N} \\ Q_{21} & \cdots & & Q_{2N} \\ \vdots & & & \vdots \\ Q_{N1} & \cdots & & Q_{NN} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{vmatrix} \qquad (1\text{-}39)$$

1.5 ปัญหาค่าไอเกนในรูปของเมทริกซ์

สมมุติว่าเรามีสมการไอเกน

$$Q|a> \quad = \quad \lambda|a> \tag{1-40}$$

สมการไอเกนนี้อาจจะเขียนเสียใหม่ได้ว่า

$$\sum_{j=1}^{N} Q_{ij}\, \alpha_j|j> \quad = \quad \lambda \sum_{j=1}^{N} \alpha_j|j> \tag{1-41}$$

หรือ

$$\sum_{j} (Q_{ij} - \lambda\delta_{ij})\alpha_j|j> \quad = \quad 0 \tag{1-42}$$

สมการที่ (1-42) เป็นชุดของสมการเอกพันธ์ N สมการ สมการชุดนี้จะให้ผลเฉลยที่ไม่เป็นศูนย์ได้ต่อเมื่อ ตัวกำหนด $|Q_{ij} - \lambda\delta_{ij}| = 0$ ซึ่งอาจเขียนในรูปของเมทริกซ์ได้ดังนี้

$$|\underline{\underline{Q}} - \lambda\, \underline{\underline{I}}| \quad = \quad \begin{vmatrix} Q_{11}-\lambda & Q_{12} & Q_{13} & \cdots & Q_{1N} \\ Q_{21} & Q_{22}-\lambda & Q_{23} & \cdots & Q_{2N} \\ \vdots & & & & \\ Q_{N1} & \cdots & & & Q_{NN}-\lambda \end{vmatrix} = \quad 0 \tag{1-43}$$

สมการที่ (1-43) มีชื่อเรียกว่า สมการเซคคูลาร์ (secular equation) หรือ สมการคาแลคเตอร์ริสติค (characteristic equation) พึงสังเกตว่า ถ้าเราสามารถทำ เมทริกซ์ $\underline{\underline{Q}}$ ให้อยู่ในรูปซึ่งสมาชิกของ $\underline{\underline{Q}}$ มีค่าต่างจากศูนย์เฉพาะค่าที่อยู่บนเส้นทะแยงมุมได้ สมการ (1-43) ก็จะอยู่ในรูปซึ่งง่ายมากดังนี้

$$(Q_{11} - \lambda)\,(Q_{22} - \lambda)\,\ldots\,(Q_{NN} - \lambda) \quad = \quad 0 \tag{1-44}$$

สมการ (1-44) มีค่าไอเกน N ค่า เท่ากับ $Q_{11}, Q_{22}, \ldots, Q_{NN}$

1.6 การเปลี่ยนเวกเตอร์มูลฐาน

เราได้เห็นจากตอนที่แล้วว่าถ้าหากเราสามารถปรับปรุง $\underset{=}{Q}$ ให้อยู่ในรูปซึ่งสมาชิกของ $\underset{=}{Q}$ มีค่าต่างจากศูนย์เฉพาะค่าซึ่งอยู่บนเส้นทะแยงมุม จะทำให้การหาค่าไอเกนนั้นสะดวกขึ้นมาก วิธีการปรับปรุง $\underset{=}{Q}$ ก็คือ เปลี่ยนเวกเตอร์มูลฐานเสียใหม่ การเปลี่ยนเวกเตอร์มูลฐานนี้ คล้ายกับทฤษฎีแกนมุขสำคัญ ซึ่งกล่าวถึงการเปลี่ยนแกนของพื้นที่ผิวใด ๆ ในสามมิติ ให้อยู่ในรูปของแกนมุขสำคัญ เช่นพื้นที่ผิวในสามมิติอันหนึ่งอาจแทนได้ด้วย

$$\sum_{i,j} a_{ij}\, x_i x_j \quad = \quad \text{ค่าคงที่};\ i,j \quad = \quad 1,2,3 \qquad (1\text{-}45)$$

อาจจะทำให้อยู่ในรูป

$$\sum_{i} A_{ii}\, x_i^2 \quad = \quad \text{ค่าคงที่} \qquad (1\text{-}46)$$

โดยการหมุนแกนให้อยู่ในแกนมุขสำคัญ ซึ่งจะทำให้สมการในแนวแกนมุขสำคัญของพื้นที่ผิวนี้อยู่ในรูป

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \sum A_{ii}\, x_i^2 \quad \propto \quad x_j$$

ทางด้านซ้ายของความสัมพันธ์คือ $2 \sum\limits_{i} A_{ii}\, x_i\, \delta_{ij}$

ดังนั้น
$$A_{jj}\, x_j \quad = \quad \lambda x_j \qquad (1\text{-}47)$$

เมื่อ λ เป็นค่าคงที่ จะเห็นว่า สมการ (1-47) เป็นสมการค่าไอเกนในรูปสมการเมทริกซ์

การเปลี่ยนชุดเวกเตอร์มูลฐานออร์ทอนอร์มอล จาก $|j\rangle$ เป็นชุดใหม่เรียกว่าชุดเวกเตอร์มูลฐานออร์ทอนอร์มอล $|i'\rangle$ อาจทำได้โดยเขียน $|i'\rangle$ ในรูปของผลบวกของ $|j\rangle$ ดังนี้

$$|i'\rangle \quad = \quad \sum_{j=1}^{N} u_{ij}^{*} |j\rangle \qquad (1\text{-}48)$$

โดยที่

$$<i'|j'> \quad = \quad \delta_{ij}$$

$$= \sum_{k=1}^{N} u_{ik} <k| \sum_{\ell=1}^{N} u_{j\ell}^{*}|\ell> \quad = \quad \sum_{k,\ell} u_{ik}\, u_{j\ell}^{*} <k|\ell> \quad = \quad \delta_{ij}$$

$$\therefore \quad \sum_{k} u_{ik}\, u_{jk}^{*} \quad = \quad \sum_{k} u_{ik}\, \tilde{u}_{kj}^{*} \quad = \quad \delta_{ij} \qquad (1\text{-}49)$$

สมการ (1-49) อาจจะเขียนในรูปของเมทริกซ์ได้ว่า

$$\underline{\underline{U}}.\underline{\underline{U}}^{+} \quad = \quad \underline{\underline{I}} \qquad (1\text{-}50)$$

แสดงว่า ชุดเวกเตอร์มูลฐานออร์ทอนอร์มอลที่สมบูรณ์สำหรับสเปซ N-มิติ หาได้จากการแปลงแบบยูนิทารีจากชุดเวกเตอร์มูลฐานออร์ทอนอร์มอลชุดเก่า

เมื่อทราบวิธีการแปลงชุดเวกเตอร์มูลฐานแล้ว ปัญหาถัดไปคือ การเปลี่ยนแปลงของสมการเวกเตอร์เช่นในสมการ (1-36) เรามีว่า $|b> = Q|a>$ การเปลี่ยนแปลงนี้จะเป็นอย่างไร เมื่อชุดของเวกเตอร์มูลฐานเปลี่ยนไปจาก $|j>$ เป็น $|i'>$ จะเห็นว่า

$$|a> \quad = \quad \sum_{j=1}^{N} \alpha_j|j> \quad = \quad \sum_{i=1}^{N} \alpha_i'|i'> \quad = \quad \sum_{\substack{i=1\\ j=1}}^{N} \alpha_i'\, u_{ij}^{*}|j> \qquad (1\text{-}51)$$

คูณด้วย $<k|$

$$<k|a> \quad = \quad \sum_{j} \alpha_j <k|j> \quad = \quad \sum_{i,j} \alpha_i'\, u_{ij}^{*} <k|j>$$

ทำให้ $$\alpha_k \quad = \quad \sum_{i} \tilde{u}_{ki}^{*}\, \alpha_i' \qquad (1\text{-}52)$$

สมการที่ (1-51) เขียนอยู่ในรูปเมทริกซ์ได้ว่า

$$\underline{\underline{\Psi}}_a \quad = \quad \underline{\underline{U}}^{+}.\underline{\underline{\Psi}}_a' \qquad (1\text{-}53)$$

โดยที่ $\underline{\underline{\Psi}}_a$ และ $\underline{\underline{\Psi}}_a'$ เมทริกซ์ในแนวตั้ง

ถ้าจะเขียน สมการ (1-53) เป็นสมการเมทริกซ์ก็จะได้ว่า

$$\begin{vmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{vmatrix} = (\underline{\underline{U}}^+)\cdot \begin{vmatrix} \alpha_1' \\ \alpha_2' \\ \vdots \\ \alpha_N' \end{vmatrix} \tag{1-54}$$

ความสัมพันธ์ระหว่างสมาชิกแต่ละตัวของสมการ (1-54) เป็นไปตามสมการ (1-52)

การแปลงผกผันของสมการ (1-53) อาจจะหาได้ดังนี้ คูณสมการ (1-52) ด้วย u_{jk} แล้วบวกกันทุก ๆ ค่าของ k

$$\sum_k u_{jk}\alpha_k = \sum_{i,k} u_{jk}\,\tilde{u}^*_{ki}\,\alpha_i' = \sum_i \delta_{ji}\alpha_i'$$

$$\alpha_j' = \sum_k u_{jk}\alpha_k \tag{1-55}$$

สมการ (1-55) ได้มาจากความสัมพันธ์ในสมการ (1-49) คูณสมการ (1-55) ด้วย $|j'>$ แล้วบวกกันทุก ๆ ค่าของ j

$$\sum_j \alpha_j' |j'> = \sum_{j,k} u_{jk}\alpha_k |j'>$$ ซึ่งเขียนเป็นสมการเมทริกซ์ได้ว่า

$$\underline{\underline{\Psi}}_a' = \underline{\underline{U}}.\underline{\underline{\Psi}}_a \tag{1-56}$$

โดยที่ $\underline{\underline{\Psi}}_a'$ และ $\underline{\underline{\Psi}}_a$ เป็นเมทริกซ์ในแนวตั้ง

โดยทำนองเดียวกับที่เราได้แปลงเวกเตอร์ $|a>$ เราอาจจะแปลงเวกเตอร์ $|b>$ ได้โดยวิธีเดียวกัน

$$\underline{\underline{\Psi}}_b = \underline{\underline{U}}^+.\underline{\underline{\Psi}}_b' \quad \text{และ} \quad \underline{\underline{\Psi}}_b' = \underline{\underline{U}}.\underline{\underline{\Psi}}_b \tag{1-57}$$

ดังนั้น ความสัมพันธ์ $|b> = Q|a>$ ในรูปของเมทริกซ์ก็คือ

$$\underline{\underline{\Psi}}_b = \underline{\underline{Q}}.\underline{\underline{\Psi}}_a \tag{1-58}$$

เมื่อ $\underline{\underline{Q}}$ เป็นตัวแทนเมทริกซ์ของตัวดำเนินการเชิงเส้น Q แทนสมการ (1-58) ด้วยสมการ (1-53) และ (1-57) ได้ว่า

$$\underline{\underline{U}}^{+}.\underline{\underline{\Psi}}_b' = \underline{\underline{Q}}.\underline{\underline{U}}^{+}.\underline{\underline{\Psi}}_a' \tag{1-59}$$

เนื่องจาก $\underline{\underline{U}}$ เป็นยูนิทารีเมทริกซ์ $\underline{\underline{U}}^{+} = \underline{\underline{U}}^{-1}$ คูณ $\underline{\underline{U}}$ เข้าทางซ้ายของสมการ (1-59)

$$\underline{\underline{\Psi}}_b' = \underline{\underline{U}}.\underline{\underline{Q}}.\underline{\underline{U}}^{+}.\underline{\underline{\Psi}}_a' \tag{1-60}$$

ถ้าเรากำหนดให้ $\underline{\underline{Q}}' = \underline{\underline{U}}.\underline{\underline{Q}}.\underline{\underline{U}}^{+}$ (1-61)

สมการ (1-60) คือ $|b'\rangle = Q'|a'\rangle$ (1-62)

ดังนั้นการเปลี่ยนเวกเตอร์มูลฐาน อาจทำได้สองวิธี คือ

(1) เป็นการเปลี่ยนเวกเตอร์มูลฐานโดยตรง ดังสมการ (1-59)

(2) เป็นการแปลงตัวดำเนินการ ดังสมการ (1-61)

ยังมีปริมาณจำนวนหนึ่ง ซึ่งไม่เปลี่ยนแปลงเนื่องจาก การแปลงแบบยูนิทารี หรือการเปลี่ยนเวกเตอร์มูลฐานซึ่งเราได้ศึกษามาแล้ว จากสมการที่ (1-42) จะเห็นว่า

$$|Q_{ij} - \lambda\delta_{ij}| = 0$$

ซึ่งอาจจะเขียนเป็นสมการเมทริกซ์ได้ว่า $|\underline{\underline{Q}} - \lambda\,\underline{\underline{I}}\,| = \underline{\underline{0}}$ (1-63)

ดังนั้น $|\underline{\underline{U}}.(\underline{\underline{Q}} - \lambda\,\underline{\underline{I}}).\underline{\underline{U}}^{-1}| = |\underline{\underline{U}}.\underline{\underline{Q}}.\underline{\underline{U}}1 - -\lambda\underline{\underline{U}}.\underline{\underline{I}}.\underline{\underline{U}}^{-1}|$

$$= |\underline{\underline{Q}}' - \lambda\,\underline{\underline{I}}'| \tag{1-64}$$

แต่เนื่องจากตัวกำหนดของผลคูณของเมทริกซ์ เท่ากับผลคูณของตัวกำหนดของเมทริกซ์ (1-64) จึงมีค่าเท่ากับ

$$|\underline{\underline{U}}|\,|\underline{\underline{U}}^{-1}|\,|\underline{\underline{Q}} - \lambda\,\underline{\underline{I}}\,| = |\underline{\underline{Q}} - \lambda\,\underline{\underline{I}}\,| = |\underline{\underline{Q}}' - \lambda\,\underline{\underline{I}}'| \tag{1-65}$$

สมการ (1-65) แสดงว่า สมการเซคคูลาร์ หรือ สมการแคแลคเตอร์ริสติค มีค่าไม่เปลี่ยนไปในการเปลี่ยนชุดพิกัดมูลฐาน

จะเห็นว่าปริมาณที่ไม่เปลี่ยนแปลงเมื่อเราเปลี่ยนชุดเวกเตอร์มูลฐานมีดังนี้ คือ

1. สมการเซคคูลาร์
2. ค่าไอเกน
3. ตัวกำหนด
4. เทรซ (trace) ซึ่งเท่ากับผลบวกของค่าไอเกน

ข้อสังเกตเกี่ยวกับเทรซของเมทริกซ์

1. $$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\,(\underline{\underline{A}}.\underline{\underline{B}}.\underline{\underline{C}}.\underline{\underline{D}}) &= \mathrm{Tr}\,(\underline{\underline{B}}.\underline{\underline{C}}.\underline{\underline{D}}.\underline{\underline{A}}) \\ &= \mathrm{Tr}\,(\underline{\underline{C}}.\underline{\underline{D}}.\underline{\underline{A}}.\underline{\underline{B}}) \\ &= \ldots\ldots \end{aligned}$$

2. $$\mathrm{Tr}\,(\underline{\underline{A}}.\underline{\underline{B}} - \underline{\underline{B}}.\underline{\underline{A}}) = \mathrm{Tr}\,(\underline{\underline{A}}.\underline{\underline{B}}) - \mathrm{Tr}\,(\underline{\underline{B}}.\underline{\underline{A}})$$

3. เทรซของผลบวกของเมทริกซ์เท่ากับผลบวกของเทรซของเมทริกซ์

$$\mathrm{Tr}\,(\underline{\underline{A}} + \underline{\underline{B}}) = \mathrm{Tr}\,\underline{\underline{A}} + \mathrm{Tr}\,\underline{\underline{B}}$$

1.7 การทำเมทริกซ์ให้มีค่าเฉพาะค่าบนเส้นทะแยงมุม

การแปลงแบบยูนิทารี เป็นกรณีพิเศษของการแปลงแบบซิมิลาริตี (similarity transformation) จะเห็นว่า

การแปลงแบบซิมิลาริตี :
$$\underline{\underline{Q}}' = \underline{\underline{U}}.\underline{\underline{Q}}.\underline{\underline{U}}^{-1} \tag{1-66}$$

การแปลงแบบซิมิลาริตีจะเป็นการแปลงแบบยูนิทารีเมื่อ $\underline{\underline{U}}^{+} = \mathrm{U}^{-1}$

นั่นคือการแปลงแบบยูนิทารี :
$$\underline{\underline{Q}}' = \underline{\underline{U}}.\underline{\underline{Q}}.\underline{\underline{U}}^{+} \tag{1-67}$$

ถ้าหาก $\underline{\underline{U}}^{-1} = \tilde{\underline{\underline{U}}}$ หรือ $\underline{\underline{U}}^{T}$ ($\tilde{\underline{\underline{U}}}$ คือ ทรานสโปส (transpose) ของเมทริกซ์ $\underline{\underline{U}}$)
การแปลงแบบซิมิลาริตีจะเป็นการแปลงแบบออร์ทอกอนอล ซึ่งเขียนได้ว่า :

$$\underline{\underline{Q}}' = \underline{\underline{U}}.\underline{\underline{Q}}.\underline{\underline{U}}^{T} \tag{1-68}$$

จะเห็นว่าการแปลงแบบยูนิทารี คือ การขยายขอบเขตของการแปลงแบบออร์ทอกอนอลไปสู่เมทริกซ์ซึ่งมีสมาชิกเป็นเลขจำนวนเชิงซ้อน เพราะในการแปลงแบบยูนิทารีนั้น

$$\underset{=}{U}^{-1} = \tilde{\underset{=}{U}}^{*} = \underset{=}{U}^{+} \qquad (1\text{-}69)$$

เมทริกซ์ทุก ๆ ตัวไม่อาจจะจัดให้มีค่าที่ต่างจากศูนย์เฉพาะค่าบนเส้นทะแยงมุม แต่เมทริกซ์ซึ่งมีมิติด้านตั้งและด้านนอนเท่ากัน หรือที่เรียกว่า เมทริกซ์สี่เหลี่ยม อาจจะทำการแปลงแบบซิมิลาริตีจนได้ค่าไอเกนบนเส้นทะแยงมุม แม้ว่าค่าที่อยู่นอกเส้นทะแยงมุมอาจไม่เป็นศูนย์ แต่เมทริกซ์เฮอร์มิเชียนทุกตัว อาจจะทำให้อยู่ในรูปซึ่งมีค่าต่างจากศูนย์เฉพาะค่าบนเส้นทะแยงมุม ตัวดำเนินการทางฟิสิกส์ส่วนมากแทนได้ด้วยเฮอร์มิเชียนเมทริกซ์ ดังนั้นการหาค่าไอเกนของตัวดำเนินการทางฟิสิกส์ก็จะลดลงเหลือเพียงการทำเมทริกซ์ให้เหลือค่าเฉพาะค่าบนเส้นทะแยงมุม

สมมุติว่าเรามีเฮอร์มิเชียนเมทริกซ์ $\underset{=}{Q}$ ทำ $\underset{=}{Q}$ ให้มีค่าเฉพาะค่าบนเส้นทะแยงมุม สมมุติว่าเมื่อทำแล้วได้เมทริกซ์ λ ให้ $\underset{=}{U}$ เป็นเมทริกซ์ที่ทำให้เกิดการแปลงนั้น

$$\therefore \quad \underset{=}{U}^{-1}.\underset{=}{Q}.\underset{=}{U} = \lambda \qquad (1\text{-}70)$$

หรือ $\underset{=}{Q}.\underset{=}{U} = \underset{=}{U}.\lambda$ ซึ่งเขียนได้ว่า

$$\begin{vmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{13} & \cdots \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{23} & \cdots \\ Q_{31} & Q_{32} & Q_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{vmatrix} \begin{vmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} & \cdots \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} & \cdots \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{vmatrix} \qquad (1\text{-}71)$$

ถ้า $\underline{\underline{U}}_1 = \begin{vmatrix} u_{11} \\ u_{21} \\ u_{31} \\ \vdots \end{vmatrix} \qquad \underline{\underline{U}}_2 = \begin{vmatrix} u_{12} \\ u_{22} \\ u_{32} \\ \vdots \end{vmatrix} \quad \ldots$ (1-72)

เราอาจจะเขียนสมการ (1-71) เสียใหม่ได้ดังนี้

$$\begin{aligned} \underline{\underline{Q}}.\underline{\underline{U}}_1 &= \lambda_1 \underline{\underline{I}}.\underline{\underline{U}}_1 \qquad \text{หรือ} \quad (\underline{\underline{Q}} - \lambda_1 \underline{\underline{I}}).\underline{\underline{U}}_1 = 0 \\ \underline{\underline{Q}}.\underline{\underline{U}}_2 &= \lambda_2 \underline{\underline{I}}.\underline{\underline{U}}_2 \qquad \text{หรือ} \quad (\underline{\underline{Q}} - \lambda_2 \underline{\underline{I}}).\underline{\underline{U}}_2 = 0 \\ \ldots \end{aligned} \qquad (1\text{-}73)$$

จะเห็นว่า เมทริกซ์ $\underline{\underline{U}}$ จะหาได้ดังนี้

1. หาค่าไอเกนของเมทริกซ์ $\underline{\underline{Q}}$
2. แต่ละค่าไอเกนหาเมทริกซ์แนวตั้งจากสมการ (1-73) ได้เมทริกซ์ $\underline{\underline{U}}_i$
3. สร้าง $\underline{\underline{U}}$ โดยมีเมทริกซ์ $\underline{\underline{U}}_i$ เป็นแนวตั้ง

ตัวอย่างที่ 1 กำหนดให้

$$\underline{\underline{Q}} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 4 \end{vmatrix}$$

จงหา ค่าไอเกน ไอเกนเวกเตอร์ ของ $\underline{\underline{Q}}$ และหาเมทริกซ์ $\underline{\underline{U}}$ ซึ่งทำ

$\underline{\underline{U}}^{-1}.\underline{\underline{Q}}.\underline{\underline{U}} = \underline{\underline{\lambda}}$: เมทริกซ์ซึ่งมีค่าต่างจากศูนย์บนเส้นทะแยงมุมเท่านั้น

วิธีทำ

หาค่าไอเกนจากตัวกำหนด $|\underline{\underline{Q}} - \underline{\underline{\lambda}}| = 0$

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 & -2 \\ 0 & -\lambda & 0 \\ -2 & 0 & 4-\lambda \end{vmatrix} = -\lambda\,[(1-\lambda)(4-\lambda)-4] = 0$$

แสดงว่า ค่าไอเกนคือ 0,0,5

ให้ $\lambda_1 = 0$ จากสมการที่ (1-73)

$$\underline{\underline{Q}} \cdot \underline{\underline{U}}_1 = 0 \quad , \qquad \underline{\underline{U}}_1 = \begin{vmatrix} u_{11} \\ u_{21} \\ u_{31} \end{vmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 4 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} u_{11} \\ u_{21} \\ u_{31} \end{vmatrix} = \underline{0}$$ แสดงว่า

$$u_{11} - 2u_{31} = 0$$

$$-2u_{11} + 4u_{31} = 0$$

ซึ่งให้ความสัมพันธ์ $u_{11} = 2u_{31}$ ทำให้เราเลือก $\underline{\underline{U}}_1$ ได้เป็น

$$\underline{\underline{U}}_1 = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{vmatrix} 2 \\ 0 \\ 1 \end{vmatrix}$$

ให้ $\lambda_2 = 0$ เราจะได้สมการคล้ายกับ $\lambda_1 = 0$ โดยมี

$$\underline{\underline{U}}_2 = \begin{vmatrix} u_{12} \\ u_{22} \\ u_{32} \end{vmatrix}$$ และ $\underline{\underline{U}}_2$ ต้องตั้งฉากกับ $\underline{\underline{U}}_1$ ดังนั้น

$u_{12} = 2u_{32}$ ทำให้เราเลือก $\underline{\underline{U}}_2$ ได้เป็น

$$\underline{\underline{U}}_2 = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{vmatrix}$$

จะเห็นว่า $\underline{\underline{U}}_1^{\dagger} \cdot \underline{\underline{U}}_2 = 0$ พอดี

ให้ $\lambda_3 = 5$ ทำให้สมการ (1-73) กลายเป็น

$$(\underline{\underline{Q}} - \lambda_3 \underline{\underline{I}}) \cdot \underline{\underline{U}}_3 = 0$$

$$\begin{vmatrix} -4 & 0 & -2 \\ 0 & -5 & 0 \\ -2 & 0 & -1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} u_{13} \\ u_{23} \\ u_{33} \end{vmatrix} = 0$$

$$4u_{13} + 2u_{33} = 0$$

$$5u_{23} = 0$$

$$2u_{13} + u_{33} = 0$$

ทำให้ $u_{33} = -2u_{13}$

$u_{23} = 0$ ทำให้เลือก $\underline{\underline{U}}_3$ ได้เป็น

$$\underline{\underline{U}}_3 = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ -2 \end{vmatrix}$$

ทำให้สามารถสร้างเมทริกซ์ $\underline{\underline{U}}$ ได้ดังนี้

$$\underline{\underline{U}} = \begin{vmatrix} 2/\sqrt{5} & 0 & 1/\sqrt{5} \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/\sqrt{5} & 0 & -2/\sqrt{5} \end{vmatrix} = 1/\sqrt{5} \begin{vmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & \sqrt{5} & 0 \\ 1 & 0 & -2 \end{vmatrix}$$

เราอาจจะหา $\underline{\underline{U}}^{-1}$ ได้ โดยหา Adj $\underline{\underline{U}}$ แล้วหารด้วย det$\underline{\underline{U}}$[1] แต่ถ้าเราสังเกตดู เมทริกซ์ $\underline{\underline{Q}}$ จะเห็นว่า $\underline{\underline{Q}}^{+} = \underline{\underline{Q}}$ แสดงว่า $\underline{\underline{Q}}$ เป็นเฮอร์มิเชียน ทำให้ $\underline{\underline{U}}$ เป็นยูนิทารีเมทริกซ์

ดังนั้น
$$\underline{\underline{U}}^{-1} = \underline{\underline{U}}^{+} = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{vmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & \sqrt{5} & 0 \\ 1 & 0 & -2 \end{vmatrix} = \underline{\underline{U}}$$

$$\therefore \quad \underline{\underline{U}}^{-1}.\underline{\underline{Q}}.\underline{\underline{U}} = \frac{1}{5}\begin{vmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & \sqrt{5} & 0 \\ 1 & 0 & -2 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} 1 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 4 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & \sqrt{5} & 0 \\ 1 & 0 & -2 \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{5}\begin{vmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & \sqrt{5} & 0 \\ 1 & 0 & -2 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} 0 & 0 & 5 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -10 \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & \sqrt{5} & 0 \\ 1 & 0 & -2 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{vmatrix}$$

---

[1] **พิสิทฐ์ วรสิงห์, ฟิสิกส์เชิงคณิตศาสตร์**. พิมพ์ครั้งที่ 2, กรุงเทพมหานคร : มหาวิทยาลัยรามคำแหง, 2530, หน้า 67.

ตัวอย่างที่ 2 กำหนดให้

$$\underline{\underline{L}} = \begin{vmatrix} \gamma & 0 & i\beta\gamma \\ 0 & 1 & 0 \\ -i\beta\gamma & 0 & \gamma \end{vmatrix}$$

จงหา 1. ค่าไอเกน

2. ไอเกนเวกเตอร์

3. เมทริกซ์ $\underline{\underline{U}}$ ซึ่งทำให้ $\underline{\underline{L}}$ มีค่าไอเกนบนเส้นทะแยงมุม

และจงแสดงว่า $\underline{\underline{U}}.\underline{\underline{U}}^{+} = \underline{\underline{I}}$, $\underline{\underline{U}}^{-1}.\underline{\underline{L}}.\underline{\underline{U}}$ เป็นเมทริกซ์ซึ่งมีค่าบนเส้นทะแยงมุมเท่านั้น

วธทา 1. ค่าไอเกน

$$|\underline{\underline{L}} - \lambda \underline{\underline{I}}| = \begin{vmatrix} \gamma-\lambda & 0 & i\beta\gamma \\ 0 & 1-\lambda & 0 \\ -i\beta\gamma & 0 & \gamma-\lambda \end{vmatrix}$$

$$= (1-I) \begin{vmatrix} \gamma-\lambda & i\beta\gamma \\ -i\beta\gamma & y - 1 \end{vmatrix}$$

$$= (1-\lambda)\left[(\gamma-\lambda)^2 - \beta^2\gamma^2\right]$$

$$= (1-\lambda)(\lambda-\gamma-\gamma\beta)(\lambda-\gamma+\gamma\beta) = 0$$

แสดงว่า $\lambda = 1, \ \gamma(1\pm\beta)$

2. ไอเกนเวกเตอร์

ให้ $\underline{\underline{U}}_1 = \begin{vmatrix} u_{11} \\ u_{21} \\ u_{31} \end{vmatrix}$ $\lambda_1 = 1$

$$(\underline{\underline{L}} - \lambda_1 \underline{\underline{I}}) \cdot \underline{\underline{U}}_1 = \begin{vmatrix} \gamma - 1 & 0 & i\beta\gamma \\ 0 & 0 & 0 \\ -i\beta\gamma & 0 & \gamma - 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} u_{11} \\ u_{21} \\ u_{31} \end{vmatrix} = \underline{\underline{0}}$$

ทำให้ $(\gamma - 1)u_{11} + i\beta\gamma u_{31} = 0$

$-i\beta\gamma u_{11} + (\gamma - 1)u_{31} = 0$ เลือก $u_{11} = u_{31} = 0,\ u_{12} = 1$

$$\underline{\underline{U}}_1 = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{vmatrix}$$

ให้ $\underline{\underline{U}}_2 = \begin{vmatrix} u_{21} \\ u_{22} \\ u_{23} \end{vmatrix}$ $\lambda_2 = \gamma(1 + \beta)$

$$(\underline{\underline{L}} - \lambda_2 \underline{\underline{I}}) \cdot \underline{\underline{U}}_2 = \begin{vmatrix} -\beta\gamma & 0 & i\beta\gamma \\ 0 & 1 - \gamma(1+\beta) & 0 \\ -i\beta\gamma & 0 & -\gamma\beta \end{vmatrix} \begin{vmatrix} u_{12} \\ u_{22} \\ u_{32} \end{vmatrix} = \underline{\underline{0}}$$

ทำให้ $-\gamma\beta u_{12} + i\beta\gamma u_{32} = 0$

$(1 - \gamma(1 + \beta))u_{22} = 0$

$-i\beta\gamma u_{12} - \gamma\beta u_{32} = 0$

$iu_{32} = u_{12}$

$u_{22} = 0$

$$\underline{\underline{U}}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} -1 \\ 0 \\ i \end{vmatrix}$$

$\underline{\underline{U}}_3$ อาจจะหาได้โดยวิธีเดียวกับ $\underline{\underline{U}}_1$ และ $\underline{\underline{U}}_2$ ก็ได้ แต่จะหาจากความสัมพันธ์ต่อไปนี้ก็ได้ $\underline{\underline{U}}_3 \cdot \underline{\underline{U}}_1 = 0 = \underline{\underline{U}}_3 \cdot \underline{\underline{U}}_2$ แสดงว่า

$$\underline{\underline{U}}_3 = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ i \end{vmatrix} \qquad \lambda_3 = \gamma(\;-\beta)$$

3. เมทริกซ์ $\underline{\underline{U}}$ ซึ่งทำให้ $\underline{\underline{L}}$ มีค่าไอเกนบนเส้นทะแยงมุม

$$\underline{\underline{U}} = (\underline{\underline{U}}_3, \underline{\underline{U}}_1, \underline{\underline{U}}_2) = \begin{vmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & -1/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ i/\sqrt{2} & 0 & i/\sqrt{2} \end{vmatrix}$$

$$\underline{\underline{U}}^{-1} \cdot \underline{\underline{U}} = \underline{\underline{U}}^{+} \cdot \underline{\underline{U}} = \begin{vmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & -1/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ i/\sqrt{2} & 0 & i/\sqrt{2} \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

$$\underline{\underline{U}}^{-1} \cdot \underline{\underline{L}} \cdot \underline{\underline{U}} = \begin{vmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & i/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ -1/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \gamma & 0 & i\beta\gamma \\ 0 & 1 & 0 \\ -i\beta\gamma & 0 & \gamma \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ i/\sqrt{2} & 0 & i/\sqrt{2} \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ -1/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1/\sqrt{2}\,(\gamma-\beta\gamma) & 0 & -1/\sqrt{2}\,(\gamma+\beta\gamma) \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/\sqrt{2}\,(-i\beta\gamma+i\gamma) & 0 & +1/\sqrt{2}\,(i\beta\gamma+i\gamma) \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} \frac{1}{2}(\gamma - \beta\gamma - \beta\gamma + \gamma) & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}(\gamma + \beta\gamma + \gamma + \beta\gamma) \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} \gamma - \beta\gamma & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma + \beta\gamma \end{vmatrix}$$