บทที่ 1
กลศาสตร์ของเมทริกซ์

บทที่ 1
กลศาสตร์ของแมททริกซ์

วัตถุประสงค์

1. ให้สามารถคำนวณหาค่าไอเกนจาก Self-adjoint differential operator
2. ให้สามารถทำสมการคลื่นให้อยู่ในรูปของเมทริกซ์
3. ให้สามารถทำโจทย์เกี่ยวกับตัวแทนในกลศาสตร์ควอนตัมได้
4. ให้สามารถแปลงระบบที่มีสมาชิกนับได้เป็นระบบที่มีสมาชิกนับไม่ได้

รูปที่ (1-1)

Werner Karl Heisenberg
ผู้ค้นพบกลศาสตร์ของเมทริกซ์

1.1 Self-Adjoint Differential Eigenvalue Problems

ถ้าหากเราพิจารณาอนุภาคตัวหนึ่ง ซึ่งเคลื่อนที่โดยที่ตัวดำเนินการแฮมมิลโทเนียนของอนุภาคนั้นมีค่าเท่ากับพลังงานซึ่งเขียนเป็นสมการได้ว่า

$$H = E = T + V(\bar{r})$$

$$= -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\bar{r}) \tag{1-1}$$

เพื่อให้ง่ายขึ้นเราจะพิจารณาปัญหาซึ่งมีตัวแปรตัวเดียวโดยให้ $H = H(x)$ และ

$$H(x)\, U_i(x) = E_i\, U_i(x) \tag{1-2}$$

U_i เป็นฟังก์ชันไอเกน ออร์ทอนอร์มอล (orthonormal eigenfunctions) ของ $H(x)$ ให้ $U_i^*(x)$ เป็นสังยุคเชิงซ้อน (complex conjugate) ของ $U_i(x)$ ดังนั้น

$$H(x)\, U_1(x) = E_1\, U_1(x) \tag{1-3}$$

$$H(x)\, U_2(x) = E_2\, U_2(x) \tag{1-4}$$

โดยที่ค่า E_1 และ E_2 เป็นค่าจริง ให้ช่วงของการอินทีเกรตคือ (a, b) ดังนั้น

$$\int_a^b U_i^*(x)\, H(x)\, U_j(x)\, dx = E_j \int_a^b U_i^* U_j\, dx = E_j\, \delta_{ij} \tag{1-5}$$

คุณสมบัติของสมการที่ (1-5) เป็นคุณสมบัติของตัวดำเนินการดิฟเฟอเรนเชียล ซึ่งมีชื่อเรียกว่า self-adjoint differential operator ซึ่งเราจะกล่าวถึงโดยละเอียดดังต่อไปนี้ สมมติว่ามีตัวดำเนินการดิฟเฟอเรนเชียล (L) ตัวหนึ่ง ซึ่งทำให้

$$L\, U_n(x) = \lambda_n\, U_n(x) \tag{1-6}$$

เมื่อ $U_n(x)$ คือ ฟังก์ชันไอเกน และ λ_n คือ ค่าไอเกน ซึ่งเกิดจาก $U_n(x)$ ให้

$$L = a_0(x)\left(\frac{d}{dx}\right)^n + a_,(x)\left(\frac{d}{dx}\right)^{n-1} + \ldots + a_,(x)$$

$$\equiv M$$

โดยที่ $M = (-1)^n\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^n a_0(x) - \left(\frac{d}{dx}\right)^{n-1} a_1(x) + \quad + \quad (-1)^n a_n(x)\right]$ (1-7)

L มีชื่อเรียกว่า self-adjoint differential operator จะเห็นว่า

$$U_j^* L U_i = U_j^* a_n U_i + U_j^* a_{n-1} \frac{d}{dx} U_i + \ldots$$

$$U_i\ M\ U_j^* = U_i a, U_j^* - U_i \frac{d}{dx}(a,-, U_j^*) + \ldots$$

ดังนั้น $$U_j^* L U_i - U_i M U_j^* = U_i^* L U_i - U_i L U_j^*$$

$$= \frac{d}{dx}(U_i a_{n-1} U_j^*) + \frac{d}{dx}\begin{vmatrix} U_j^* a_{n-2} & U_i \\ \frac{d}{dx}(a_{n-2} U_j^*) & \frac{d}{dx} U_i \end{vmatrix} + \ldots$$

ให้ช่วงของการอินทีเกรตคือ (c, d) ซึ่งทำให้

$$\begin{aligned} 0 &\equiv \int_c^d (U_j^* L U_i - U_i L U_j^*)\, dx \\ &= \int_c^d dx \left\{ \frac{d}{dx}(U_i a_{n-1} U_j^*) + \frac{d}{dx}\begin{vmatrix} U_j^* a_{n-2} & U_i \\ \frac{d}{dx}(a_{n-2} U_j^*) & \frac{d}{dx} U_i \end{vmatrix} + \cdots \right\} \\ &= \left\{ U_i a_{n-1} U_j^* + \begin{vmatrix} U_j^* a_{n-2} & U_i \\ \frac{d}{dx}(a_{n-2} U_j^*) & \frac{d}{dx} U_i \end{vmatrix} + \ldots \right\} \Bigg|_d^c \end{aligned} \tag{1-8}$$

แทนค่าสมการที่ (l-6) ในสมการ (l-8)

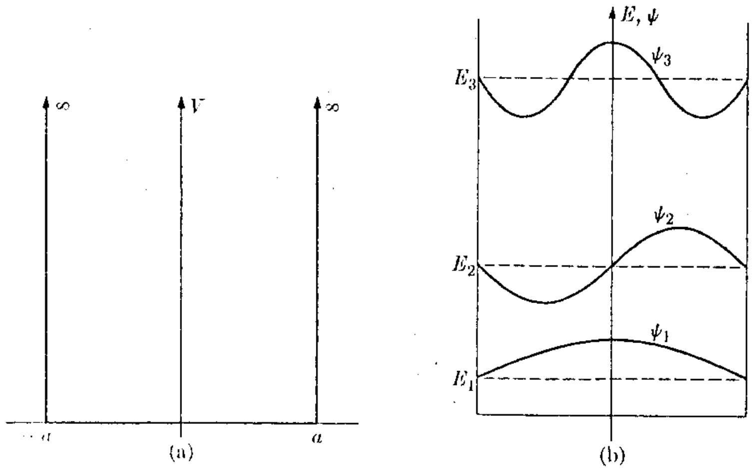
$$\int_c^d (U_j^* L U_i \quad U_i L U_j^*)\, dx = (\lambda_i - \lambda_j^*) \int_c^d U_j^* U_i dx \tag{1-9}$$

$$= (\lambda_i - \lambda_j^*)\, \delta_{ij} \tag{l-10}$$

แสดงว่า
$$\left.\begin{aligned} \int_c^d U_j^* U_i dx &= 0 \;,\; i \neq j \\ \lambda_i &= \lambda_i^*, \;\; i = j \end{aligned}\right\} \tag{1-11}$$

สมการที่ (l-8) มีชื่อเรียกว่า self adjoint boundary condition ดังนั้น เราอาจสรุปคุณสมบัติของ self adjoint differential operator ได้ดังนี้ว่า ค่าไอเกนของตัวดำเนินการชนิดนี้เป็นค่าจริงและฟังก์ชันไอเกนสองฟังก์ชันที่ต่างกันของตัวดำเนินการชนิดนี้เป็นออร์ทอกอนอลเชิงซ้อน (complex orthogonal) ต่อกัน

ตัวอย่างที่ 1 จงแสดงว่าตัวดำเนินการแฮมมิลโทเนียนของศักยบ่อจัตุรัส (square well potential) ซึ่งมีความสูงของบ่อถึงอนันต์ (รูปที่ 1-2) เป็น self adjoint differential operator และจงแสดงว่าค่าไอเกนของตัวดำเนินการชนิดนี้เป็นค่าจริง



รูปที่ (1-2)

ศักยบ่อจัตุรัส

วิธีทำ จากรูปที่ (1-2) จะเห็นว่าในขอบเขตซึ่ง $-a<x<a$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = E\,\psi(x) \qquad (1\text{-}12)$$

$$\therefore \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$$

ดังนั้น

$$\psi(x) \propto \begin{cases} \sin kx \\ \cos kx \end{cases}$$

แทนค่า $\sin kx$ หรือ $\cos kx$ ลงในสมการที่ (1-12) จะเห็นว่า

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad (1\text{-}13)$$

แต่เนื่องจากที่ผนังของศักยบ่อจัตุรัสชนิดนี้ฟังก์ชันคลื่นเป็นศูนย์

ถ้า $\cos ka = 0$ หมายความว่า

$$ka = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \ldots \qquad (1\text{-}14)$$

ถ้า $\sin ka = 0$ หมายความว่า

$$ka = \pi, 2\pi, 3\pi, \ldots \qquad (1\text{-}15)$$

สมการที่ (1-14) และ (1-15) อาจจะเขียนรวมกันได้ว่า

$$ka = \frac{n\pi}{2} \equiv k_n a, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \qquad (1\text{-}16)$$

ดังนั้น จากสมการที่ (1-13) และ (1-16) เราอาจจะเขียนค่าไอเกนของสมการ (1-12) ได้ดังนี้

$$k = k_n = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}$$

หรือ

$$E_n = \frac{k_n^2 \hbar^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} n^2 \qquad (1\text{-}17)$$

สมการที่ (1-17) ให้ค่าไอเกนที่ต้องการเป็นค่าจริง

ถ้าหาก $\sin k_n x$ และ $\sin k_m x$ เป็นฟังก์ชันไอเกนใด ๆ จะเห็นว่า

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sin k_n x = \frac{k_n^2\hbar^2}{2m}\sin k_n x$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sin k_m x = \frac{k_m^2\hbar^2}{2m}\sin k_m x$$

$$\therefore \int_{-a}^{a} dx \left\{\sin k_n x\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\sin k_m x - \sin k_m x\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\sin k_n x\right\}$$

$$= \int_{-a}^{a} dx \left\{\frac{\hbar^2}{2m}(k_m^2 - k_n^2)\right\}\sin k_n x \sin k_m x$$

$$= 0 \quad \text{ทุก ๆ ค่าของ } k_n \text{ และ } k_m$$

อินทีเกรชั่นนี้เป็นจริงในกรณีของ $\cos k_n x$, $\cos k_m x$ และ $\sin k_n x$, $\sin k_m x$ เมื่อ k_n และ k_m เป็นค่าจริงใด ๆ ด้วย ดังนั้น จะเห็นว่าตัวดำเนินการ $\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + E\right)$ เป็น self-adjoint differential operator

1.2 ค่าไอเกนและไอเกนเวกเตอร์ของเฮอร์มีเชียนเมททริกซ์

ถ้าหาก $\underline{\underline{A}}$ เป็นเฮอร์มีเชียนเมทริกซ์ จากตำราคณิตศาสตร์ต่าง ๆ[1] จะพบว่า หาก $\bar{x}_1$ และ $\bar{x}_2$ เป็นไอเกนเวกเตอร์ของ $\underline{\underline{A}}$ แล้ว

---

[1]เช่น พิสิทธิ์ วรสิงห์, *ฟิสิกส์เชิงคณิตศาสตร์* สำนักพิมพ์มหาวิทยาลัยรามคำแหง 2535 หน้า 68

$$\underline{\underline{A}} \cdot \bar{x}_1 = \lambda_1 \bar{x}_1 \tag{1-18}$$

$$\underline{\underline{A}} \cdot \bar{x}_2 = \lambda_2 \bar{x}_2 \tag{1-19}$$

โดยที่ค่า λ_1 และ λ_2 เป็นค่าจริง สมการที่ (1-18) และ (1-19) เทียบได้กับสมการที่ (1-3) และ (1-4) และถ้าหาก $\bar{x}_i$ และ $\bar{x}_j$ เป็นไอเกนเวกเตอร์ ออร์ทอนอร์มอล (orthonormal eigenvectors) แล้ว

$$(\bar{x}_i^*)^T \cdot \underline{\underline{A}} \cdot (\bar{x}_j) = \lambda_i \delta_{ij} \tag{1-20}$$

สมการที่ (1-20) เทียบได้กับสมการที่ (1-5) ดังนั้น จะเห็นว่ากลศาสตร์ของคลื่นใช้วิธีทางคณิตศาสตร์ที่คล้ายคลึงกับกลศาสตร์ของเมทริกซ์เมื่อใช้แก้ปัญหาควอนตัม Schrödinger[2] และ Eckart[3] เป็นผู้แสดงว่ากลศาสตร์ของคลื่น และกลศาสตร์ของเมทริกซ์ใช้แก้ปัญหาได้อย่างเดียวกัน

1.3 ฟังก์ชันคลื่นและตัวดำเนินการในรูปของแมททริกซ์

ให้ $U_j(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \ldots, \bar{r}_N)$ เป็นชุดของฟังก์ชันมูลฐานออร์ทอนอร์มอล (orthonormal basis) ชุดหนึ่ง โดยที่

$$< U_j | U_k > \equiv \int (U_j^*)^T U_k \, d\bar{r}_1, d\bar{r}_2, \ldots, d\bar{r}_N = \delta_{jk} \tag{1-21}$$

U_j^* คือสังยุคเชิงซ้อนของ U_j

เพื่อให้ง่ายขึ้นในตอนนี้จะสมมติว่า U_j เป็นฟังก์ชันที่นับได้ (discrete) และมีจำนวนจำกัด (finite) โดยปกติแล้ว U_j จะต้องมีจำนวนที่นับไม่ได้ เพื่อว่าจะสามารถกระจายฟังก์ชันใด ๆ โดยมี U_j เป็นฟังก์ชันมูลฐานได้ ในที่นี้เราเพียงต้องการจะอธิบายวิธีทำฟังก์ชันคลื่น**ให้อยู่ในรูปของเมทริกซ์** จำนวนที่นับไม่ได้ของ U_j จึงยังไม่จำเป็น

ถ้าหาก U_j เป็นชุดของฟังก์ชันมูลฐานที่สมบูรณ์แล้ว ฟังก์ชันคลื่นใด ๆ ψ อาจจะกระจายให้อยู่ในรูปของผลบวกของ U_j ได้ดังนี้

$$\psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \ldots, \bar{r}_N, t) = \sum_j a_j U_j \tag{1-22}$$

โดยที่

$$a_j = < U_j | \psi > \tag{1-23}$$

---

[2]E. Schrödinger, Ann. d. Phys. 79 734 (1926)

[3]C. Eckart, Phys. Rev. 28 (1926)

เนื่องจาก U_j เป็นฟังก์ชันมูลฐานออร์ทอนอร์มอล ดังนั้น สัมประสิทธิ์ a_j จึงนับว่าเป็นสัมประสิทธิ์ที่แสดงลักษณะของฟังก์ชันคลื่น ψ ชุดของสัมประสิทธิ์ a_j จึงมีชื่อเรียกว่าตัวแทน (representation) ของฟังก์ชันคลื่น ψ

สมมติว่าเรามีสมการคลื่นสมการหนึ่ง คือ

$$\psi' = Q\psi \tag{1-24}$$

เราอาจจะทำสมการ (1-24) ให้อยู่ในรูปของสมการเมทริกซ์ได้โดยกระจายฟังก์ชันคลื่นในสมการ (1-24) ให้อยู่ในรูปของตัวแทน ซึ่งมี U_j เป็นเวกเตอร์มูลฐาน (base vector) ดังนี้

$$\sum_j a_j' \,|\, U_j > \;=\; Q \sum_j a_j \,|\, U_j > \tag{1-25}$$

คูณ (1-25) ด้วย $< U_k \,|$

$$\begin{aligned} \therefore \quad \sum_j a_j < U_k \,|\, Q \,|\, U_j > &= \sum_j a_j' < U_k \,|\, U_j > \\ &= \sum_j a_j' \delta_{kj} \\ &= a_k' \end{aligned} \tag{1-26}$$

สมการ (1-26) เขียนในรูปของสมการเมทริกซ์ได้ว่า

$$\left.\begin{aligned} \sum_j Q_{kj} a_j &= a_k' \\ \text{หรือ} \quad \underline{\underline{Q}} \cdot \bar{a} &= \bar{a}' \end{aligned}\right\} \tag{1-27}$$

โดยที่

$$Q_{kj} = < U_k \,|Q|\, U_j > \tag{1-28}$$

$$\underline{\underline{Q}} \equiv \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} & \cdots & Q_{1N} \\ Q_{21} & \cdots & & \\ \vdots & & & \\ & \cdots & & Q_{NN} \end{bmatrix} \tag{1-29}$$

$$\bar{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} \qquad \bar{a}' = \begin{bmatrix} a_1' \\ a_2' \\ \vdots \\ a_N' \end{bmatrix} \tag{1-30}$$

1.4 ความเหมือนกันของตัวดำเนินการเมทริกซ์และตัวดำเนินการดิฟเฟอเรนเชียล

ในตอนที่ 1.1 และ 1.2 ได้ชี้ให้เห็นถึงความคล้ายคลึงกันของตัวดำเนินกวรดิฟเฟอเรนเชียลซึ่งเป็น self-adjoint differential operator กับตัวดำเนินการเมทริกซ์ซึ่งเป็นเฮอร์มีเชียน ในตอนนี้จะแสดงให้เห็นความเหมือนกันของกลศาสตร์คลื่นและกลศาสตร์ของแมททริกซ์เลยทีเดียว

สมมติว่าฟังก์ชันไอเกนออร์ทอนอร์มอลของตัวดำเนินการดิฟเฟอเรนเชียล L คือ $U_n(\bar{r})$ โดยที่

$$L\,U_n \;=\; \lambda_n U_n \tag{1-31}$$

λ_n คือค่าไอเกนของฟังก์ชันไอเกน U_n

ให้ S เป็นตัวดำเนินการเชิงเส้นใด ๆ ดังนั้น ค่าคาดหมายของตัวดำเนินการ S ระหว่างฟังก์ชันไอเกน U_m และ U_n ก็คือ

$$\int U_m^*(\bar{r})\, S\, U_n(\bar{r})\, d^3\bar{r} \;=\; S_{mn} \tag{1-32}$$

เนื่องจากเราได้อินทีเกรตตัวแปร $\bar{r}$ ออกแล้วในสมการ (1-32) ดังนั้น S_{mn} จึงขึ้นอยู่กับเลขดัชนีสองตัว คือ m และ n เราอาจจะเขียนเสียใหม่ได้ว่า

$$S_{mn} \;=\; \langle m|S|n\rangle \tag{1-33}$$

แต่ละคู่ของเลขดัชนี m และ n จะกำหนดองค์ประกอบ S_{mn} ขึ้นตัวหนึ่ง แสดงว่าชุดของค่าคาดหมายของตัวดำเนินการ S อาจจะเขียนอยู่ในรูปของเมทริกซ์ได้ ดังนั้น แต่ละตัวของตัวดำเนินการดิฟเฟอเรนเชียลเชิงเส้น เราจะสามารถเขียนตัวดำเนินการเมทริกซ์ขึ้นได้

จากสมการที่ (1-31) จะเห็นว่า

$$\begin{aligned} L_{mn} &= \int U_m^*\, L\, U_n\, d^3_{\bar{r}} \\ &= \lambda_n \langle m|n\rangle \;=\; \lambda_n \delta_{mn} \end{aligned} \tag{1-34}$$

เนื่องจาก U_n เป็นชุดของฟังก์ชันไอเกน ออร์ทอนอร์มอล ชุดของเมทริกซ์ $\underline{L}$ จึงเป็นเมทริกซ์ซึ่งมีค่าเฉพาะค่าบนเส้นทแยงมุม แต่ละค่าเท่ากับค่าไอเกน λ_n ของตัวดำเนินการดิฟเฟอเรนเชียล L จะเห็นว่าเราสามารถหาค่าไอเกนได้อีกวิธีหนึ่ง คือ การหาค่าไอเกนของเมทริกซ์ วิธีทางเมทริกซ์ให้คำตอบเช่นเดียวกับวิธีทางสมการดิฟเฟอเรนเชียล

ถ้าหากตัวดำเนินการ S เป็น self-adjoint differential operator แล้ว U_n ไม่จำเป็นต้องเป็นฟังก์ชันไอเกนของ S แต่เมทริกซ์ของ S จะเป็นเฮอร์มีเชียนดังนี้

$$(S^*_{mn})^T = (< m \mid S \mid n >^*)^T$$
$$= (< n \mid S \mid m >)^T = S_{mn} \qquad (1\text{-}35)$$

ตัวอย่างที่ 2 กำหนดให้ฟังก์ชันไอเกนของ quantum harmonic oscillator ในหนึ่งมิติ คือ

$$U_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)$$

จงหาเมทริกซ์ของตัวดำเนินการตำแหน่งและตัวดำเนินการโมเมนตัม ซึ่ง

$$X_{pq} = \int_{-\infty}^{\infty} U_p^*(x)\, \hat{x}\, U_q(x)\, dx \qquad (1\text{-}36)$$

$$P_{pq} = \int_{-\infty}^{\infty} U_p^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} U_q(x)\, dx \qquad (1\text{-}37)$$

และจงแสดงว่า $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar = (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})$

X_{pq} และ P_{pq} เป็นองค์ประกอบของเมทริกซ์ของตัวดำเนินการตำแหน่งและตัวดำเนินการโมเมนตัมตามลำดับ

วิธีทำ เราจะใช้ Dirac notation ดังนี้

$$|n> = U_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |0>$$

$$|0> = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp.\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

$$a^+ = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\hat{X} - \frac{i}{m\omega}\hat{P}\right)$$

: ตัวดำเนินการเพิ่มระดับ (1-38)

$$a = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\hat{X} + \frac{i}{m\omega}\hat{P}\right)$$

: ตัวดำเนินการลดระดับ (1-39)

$$a^+|n> = (n+1)^{\frac{1}{2}} |n+1> \qquad (1\text{-}40)$$
$$a|n> = n^{\frac{1}{2}} |n-1> \qquad (1\text{-}41)$$

สัญลักษณ์ ∧ ข้างบนตัวอักษรแสดงว่าเป็นตัวดำเนินการ ไม่ใช่ตัวแปร ตอนแรกเราจะแสดงว่า $|n> = U_n(x)$ ดังนี้

ให้
$$y = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} x$$

$$a^+ = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left(x - \frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(y - \frac{\partial}{\partial y}\right) \qquad (1\text{-}38)'$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(y + \frac{\partial}{\partial y}\right) \qquad (1\text{-}39)'$$

จากคำนิยาม
$$|n> = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n\,|\,0>$$

$$= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(y - \frac{\partial}{\partial y}\right)^n e^{-\frac{y^2}{2}}$$

แต่เนื่องจาก
$$\left(y - \frac{\partial}{\partial y}\right) e^{\frac{y^2}{2}} f(y) = -e^{\frac{y^2}{2}} \frac{\partial}{\partial y} f(y)$$

$$\therefore \left(y - \frac{\partial}{\partial y}\right)^n e^{-\frac{y^2}{2}} = (-1)^n e^{\frac{y^2}{2}} \frac{\partial^n}{\partial y^n} e^{-y^2}$$

ดังนั้น
$$|n> = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} (-1)^n e^{\frac{y^2}{2}} \frac{\partial^n}{\partial y^n} e^{-y^2}$$

$$= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{y^2}{2}} \left\{(-1)^n e^{y^2} \frac{\partial^n}{\partial y^n} e^{-y^2}\right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{y^2}{2}} H_n(y)$$

แทนค่า y
$$|n> = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp.\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)$$

$$= U_n(x) \qquad (1\text{-}42)$$

จากสมการที่ (1-36), (1-38) และ (1-39)
$$X_{pq} = <p\,|\,\hat{x}\,|\,q> \qquad (1\text{-}43)$$

$$= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} <p\,|\,a^+ + a\,|\,q>$$

$$= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} \left\{ (q+1)^{\frac{1}{2}} < p \mid q+1 > + (q)^{\frac{1}{2}} \right.$$

$$\left. < p \mid q-1 > \right\} \qquad (1\text{-}44)$$

$p, q = 0, 1, 2, \ldots$

สมการที่ (1-44) จะเขียนเป็นรูปของแมททริกซ์ได้ดังนี้

$$\underline{\underline{X}} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \ldots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & & \ldots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{bmatrix} \qquad (1\text{-}44)'$$

โดยทำนองเดียวกันเราอาจจะหา P_{pq} ในสมการที่ (1-37) ได้ดังนี้

$$P_{pq} = < p \mid \hat{p} \mid q >$$

และโดยการแทนค่าจากสมการที่ (1-38) และ (1-39)

$$P_{pq} = -i\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{\frac{1}{2}} < p \mid a - a^{+} \mid q >$$

$$= -i\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \left\{ q^{\frac{1}{2}} < p \mid q-1 > - (q+1)^{\frac{1}{2}} < p \mid q+1 > \right\}$$

$$= i\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \left\{ (q+1)^{\frac{1}{2}} < p \mid q+1 > - q^{\frac{1}{2}} < p \mid q-1 > \right\} \qquad (1\text{-}45)$$

สมการที่ (1-45) จะเขียนให้เป็นรูปของเมทริกซ์ได้ดังนี้

$$\underline{\underline{P}} = i\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & \ldots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & \ldots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \ldots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{bmatrix} \qquad (1\text{-}45)'$$

ดังนั้น จะเห็นว่า

$$[\underline{\underline{X}}, \underline{\underline{P}}] = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} i\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{bmatrix}\right]$$

$$= i\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 2 & 0 & \cdots \\ 0 & 2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \end{bmatrix}$$

$$= i\hbar\underline{\underline{I}}$$

Q.E.D.

จากสมการที่ (1-44)′ และ (1-45)′ เราอาจจะหาตัวดำเนินการแฮมมิลโทเนียนของ quantum harmonic oscillator ได้โดยการคูณกันของ $\underline{\underline{P}}$ และ $\underline{\underline{X}}$ ดังนี้

$$\underline{\underline{H}} = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

$$= \left(\frac{\underline{\underline{P}}\cdot\underline{\underline{P}}}{2m}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2(\underline{\underline{X}}\cdot\underline{\underline{X}}) \qquad (1\text{-}46)$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 5 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{bmatrix} \qquad (1\text{-}46)'$$

จะเห็นว่าถ้าหากเราจะกำหนดชุดของฟังก์ชันออร์ทอนอร์มอลขึ้นชุดหนึ่ง คือ

$$\left.\begin{aligned} e_0 &= (1, 0, 0, \ldots)^T \\ e_1 &= (0, 1, 0, \ldots)^T \\ e_2 &= (0, 0, 1, \ldots)^T \end{aligned}\right\} \tag{1-47}$$

$$\ldots \qquad \ldots$$

จะเห็นว่า $$\underline{\underline{H}}\, e_n = E_n e_n \tag{1-48}$$

โดยที่ $$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \tag{1-49}$$

สถานะใด ๆ ของ harmonic oscillator อาจจะแทนได้ด้วยเวกเตอร์ $\bar{V}$ ซึ่งมีขนาดเป็นหนึ่งโดยที่

$$\bar{V} = \sum_{k=0}^{\infty} c_k e_k \tag{1-50}$$

และเนื่องจาก e_n's เป็นชุดของฟังก์ชันออร์ทอนอร์มอลที่สมบูรณ์ ดังนั้น

$$(\bar{V}^*)^T \cdot (\bar{V}) = \sum_k |c_k|^2 = 1 \tag{1-51}$$

$$c_k = (e_k^*)^T \cdot \bar{V} \tag{1-52}$$

$|c_k|^2$ ก็คือ ความน่าจะเป็นที่จะพบว่าระบบของ harmonic oscillator อยู่ในสถานะไอเกน e_k

ค่าเฉลี่ยของตัวดำเนินการเฮอร์มีเชียน S เมื่อระบบอยู่ในสถานะ $\bar{V}$ ก็คือ

$$< S > = (\bar{V}^*)^T \cdot (S) \cdot (\bar{V}) \tag{1-53}$$

$$< S^* >^T = (\bar{V}^*)^T \cdot (S^*)^T \cdot (\bar{V}) \tag{1-54}$$

ดังนั้น จะเห็นว่ากลศาสตร์ของคลื่นและกลศาสตร์ของเมทริกซ์ ให้ผลลัพธ์เหมือนกันทุกประการ

1.5 คุณสมบัติที่สำคัญบางประการของตัวแทนเมทริกซ์ (Matrix representation) ของตัวดำเนินการเชิงเส้น

1.5.1 เมทริกซ์ของตัวดำเนินการเฮอร์มีเชียนใด ๆ เป็นเฮอร์มีเชียนเมทริกซ์ คุณสมบัติอันนี้อาจจะหาได้จากการหา Hermetian adjoint ของตัวดำเนินการเฮอร์มีเชียน Q ดังนี้

$$(<m|Q|n>^*)^T = <Qn|m> \quad (1\text{-}55)$$
$$= <n|Qm>$$
$$= <n|Q|m> \quad (1\text{-}56)$$
$$\therefore \quad (Q^*_{mn})^T = Q_{nm} \quad (1\text{-}57)$$

จากสมการที่ (1-55) ไปสู่สมการที่ (1-56) เราใช้คุณสมบัติความเป็นเฮอร์มีเชียนของ Q

1.5.2 **เมทริกซ์ของผลคูณของตัวดำเนินการสองตัวเท่ากับผลคูณของเมทริกซ์ของตัวดำเนินการแต่ละตัว** คุณสมบัตินี้เห็นได้จาก

$$\sum_k Q_{jk} P_{k\ell} = \sum_k <j|Q|k> <k|P|\ell> \quad (1\text{-}58)$$

แต่เนื่องจากเวกเตอร์ $|k>$ เป็นชุดของเวกเตอร์ออร์ทอนอร์มอลที่สมบูรณ์

$$\therefore \quad \sum_k <j|Q|k> <k|P|\ell> = <j|QP|\ell> \quad (1\text{-}59)$$
$$= (\underline{\underline{Q}} \cdot \underline{\underline{P}})_{j\ell}$$

ซึ่งเขียนได้ดังนี้
$$\sum_k Q_{jk}P_{k\ell} = (\underline{\underline{Q}} \cdot \underline{\underline{P}})_{j\ell} \quad (1\text{-}60)$$

เพื่อให้เข้าใจสมการที่ (1-59) ชัดขึ้นเราจะเขียน $|\ >$ ให้เป็นเวกเตอร์ของตัวแทนพิกัด (coordinate representation) ดังนี้

$$\sum_k <j|Q|k> <k|P|\ell> = \sum_k \int \left(U_j^*(\bar r)\right)^T Q\, U_k(\bar r)\, d\bar r \int \left(U_k^*(\bar r')\right)^T P U_\ell(\bar r')\, d\bar r'$$
$$= \iint \left(U_j^*(\bar r)\right)^T Q \left\{\sum_k U_k(\bar r) \left(U_k^*(\bar r')\right)^T\right\} P U_\ell(\bar r')\, d\bar r\, d\bar r' \quad (1\text{-}59)'$$

เนื่องจาก $|k>$ เป็นชุดของเวกเตอร์ออร์ทอนอร์มอลที่สมบูรณ์ ดังนั้น

$$\sum_k U_k(\bar r)\, U_k(\bar r') = \delta(\bar r - \bar r') \quad (1\text{-}61)$$

แทน (1-61) ลงใน (1-59)′ ได้ผลลัพธ์ว่า

$$\sum_k <j|Q|k> <k|P|\ell> = \iint \left(U_j^*(\bar r)\right)^T Q\cdot\delta(\bar r - \bar r')\, P\, U_\ell(\bar r')\, d\bar r\, d\bar r'$$
$$= \int \left(U_j^*(\bar r)\right)^T QP\, U_\ell(\bar r)\, d\bar r$$
$$= <j|QP|\ell>$$

จากข้อที่ 1.5.1 และ 1.5.2 จะเห็นได้ว่า ถ้าตัวดำเนินการสับเปลี่ยนกันได้เมทริกซ์**ของตัวดำเนินการเหล่านั้นจะสับเปลี่ยนกันได้ด้วย** เมทริกซ์ของตัวดำเนินการซึ่งเป็น inverse **ของตัวดำเนินการ Q ใด ๆ จะเป็น** inverse ของเมทริกซ์ของตัวดำเนินการ Q นั้น

1.5.3 ถ้า $|k>$ เป็นชุดของเวกเตอร์ออร์ทอนอร์มอลที่สมบูรณ์ และเป็นฟังก์ชันไอเกนของตัวดำเนินการควอนตัมบางตัว เช่น

$$H\,|\,k> \quad = \quad E_k\,|\,k> \tag{1-62}$$

ดังนั้น จะเห็นว่า $$H_{ij} \quad = \quad <i\,|H|\,j> \quad = \quad E_j\,\delta_{ij} \tag{1-63}$$

แสดงว่า ตัวแทนเมทริกซ์ของ H จะมีค่าต่างจากศูนย์ตามเส้นทแยงมุมเท่านั้น $\underline{\underline{H}}$ เรียกว่า เมทริกซ์ทแยง (diagonal matrix)

ถ้าตัวดำเนินการหลายตัวสับเปลี่ยนกันได้ ตัวแทนเมทริกซ์ของตัวดำเนินการเหล่านั้นจะสับเปลี่ยนกันได้

1.6 ชนิดของตัวแทนเมทริกซ์

ถ้าหากชุดของฟังก์ชันมูลฐานออร์ทอนอร์มอลไม่ขึ้นกับเวลา สมการโชร์ดิงเจอร์จะมีรูปร่างไม่เปลี่ยนเมื่อทำให้อยู่ในรูปของแมททริกซ์ สมมติให้ $\psi(\bar{r}, t)$ เป็นฟังก์ชันคลื่นฟังก์ชันหนึ่งซึ่งกระจายออกได้ดังนี้

$$\psi(\bar{r}, t) \quad \equiv \quad \sum_n \psi_n(t)\, U_n(\bar{r}) \tag{1-64}$$

เมื่อ $U_n(\bar{r})$ เป็นฟังก์ชันมูลฐานออร์ทอนอร์มอล (orthonormal base functions) ซึ่งไม่ขึ้นกับเวลา สมการโชร์ดิงเจอร์ในรูปของเมทริกซ์เขียนได้ดังนี้

$$\underline{\underline{H}} \cdot \underline{\underline{\psi}} \quad = \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underline{\underline{\psi}} \quad = \quad i\hbar \sum_n \dot{\underline{\underline{\psi}}}_n(t) \cdot \underline{\underline{U}}_n(\bar{r}) \tag{1-65}$$

สมการเมทริกซ์ในรูป (1-65) คือ สมการโชร์ดิงเจอร์ในรูปของเมทริกซ์ สัญลักษณ์ $\underline{\underline{\psi}}$, $\underline{\underline{U}}_n$, $\underline{\underline{\psi}}_n$ เน้นความเป็นเมทริกซ์ ความจริงสัญลักษณ์เหล่านี้อาจเขียนในรูปของเวกเตอร์ได้

ถ้าหากชุดของฟังก์ชันมูลฐานออร์ทอนอร์มอลเป็นฟังก์ชันของระยะกับเวลาแล้ว จะปรากฏว่า ชุดของฟังก์ชันนั้นจะรักษาความเป็นออร์ทอนอร์มอลอยู่ได้ตลอดไป และจะให้ตัวแทน (representation) ซึ่งไม่ขึ้นกับเวลา ตัวแทนชนิดนี้เราเรียกว่าตัวแทนตามแบบของไฮเซนเบอร์ก

ทฤษฎี ออร์ทอนอร์มอลลิตี้ของชุดของฟังก์ชัน $U_n(\bar{r}, t)$ ไม่เปลี่ยนเมื่อเวลาเปลี่ยนไป

พิสูจน์ ให้ $U_n = U_n(\bar{r}, t)$ เป็นชุดฟังก์ชันออร์ทอนอร์มอล ณ เวลา t ใด ๆ และ

$$HU_n = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_n \qquad (1\text{-}66)$$

โดยที่ H เป็นเฮอร์มีเชียน

$$< U_m \mid HU_n > = i\hbar < U_m \mid \frac{\partial}{\partial t} U_n > \qquad (1\text{-}67)$$

โดยทำนองเดียวกัน เราอาจจะพิสูจน์ได้ว่า

$$< U_n \mid HU_m > = i\hbar < U_n \mid \frac{\partial}{\partial t} U_m > \qquad (1\text{-}68)$$

แต่เนื่องจาก H เป็นเฮอร์มีเชียน ดังนั้น เราอาจจะเขียน (1-67) เสียใหม่ได้ดังนี้

$$< HU_m \mid U_n > = i\hbar < U_m \mid \frac{\partial}{\partial t} U_n > \qquad (1\text{-}67)'$$

หาสังยุคเชิงซ้อนของสมการ (1-68)

$$< HU_m \mid U_n > = -i\hbar < \frac{\partial}{\partial t} U_m \mid U_n > \qquad (1\text{-}68)'$$

เอา (1-68)′ ลบออกจาก (1-67)′

$$\begin{aligned} 0 &= i\hbar \left[< U_m \mid \frac{\partial}{\partial t} U_n > + < \frac{\partial}{\partial t} U_m \mid U_n > \right] \\ &= i\hbar \frac{d}{dt} < U_m \mid U_n > \end{aligned}$$

แสดงว่า ออร์ทอนอร์มอลลิตี้ของชุดของฟังก์ชัน $U_n(\bar{r}, t)$ ไม่เปลี่ยนเมื่อเวลาเปลี่ยนไป

Q.E.D.

ฟังก์ชันคลื่นใด ๆ $\psi(\bar{r}, t)$ อาจจะเขียนในรูปของตัวแทนชนิดนี้ได้ดังนี้

$$\psi(\bar{r}, t) = \sum_n \psi_n U_n(\bar{r}, t) \qquad (1\text{-}69)$$

ในคราวนี้ตัวแทน คือ ψ_n ไม่ขึ้นกับเวลา นับว่าฟังก์ชันคลื่น $\psi(\bar{r}, t)$ กระจายในตัวแทนตามแบบของไฮเซนเบอร์ก ตัวดำเนินการในตัวแทนแบบนี้เขียนได้ดังนี้

$$Q_{ij} = < U_i \mid QU_j > \qquad (1\text{-}70)$$

อนุพันธ์เทียบกับเวลาขององค์ประกอบของแมททริกซ์ คือ

$$\dot{Q}_{ij} = < \frac{\partial}{\partial t} U_i \mid QU_j > + < U_i \mid Q \frac{\partial}{\partial t} U_j > + < U_i \mid \frac{\partial}{\partial t} Q \mid U_j > \qquad (1\text{-}71)$$

แต่จากสมการที่ (1-66) เราอาจจะเขียนสมการที่ (1-71) เสียใหม่ได้ดังนี้

$$Q_{ij} = \frac{i}{\hbar}\left[< HU_i \mid QU_j > - < U_i \mid QH \mid U_j > \right] + < U_i \mid \frac{\partial}{\partial t} QU_j >$$

$$= \frac{i}{\hbar} < U_i \mid [HQ - QH] \mid U_j > + < U_i \mid \frac{\partial}{\partial t} Q \mid U_j > \qquad (1\text{-}72)$$

ในสมการที่ (1-72) เราใช้ความจริงที่ว่า H เป็นเฮอร์มีเชียน สมการ (1-72) เป็นสมการแสดงความสัมพันธ์ขององค์ประกอบของเมทริกซ์ ซึ่งอาจจะเขียนเป็นสมการของเมทริกซ์ได้ดังนี้

$$\underline{\underline{Q}} = \frac{i}{\hbar}[\underline{\underline{H}}, \underline{\underline{Q}}] + \frac{\partial}{\partial t}\underline{\underline{Q}} \qquad (1\text{-}73)$$

ดังนั้น ในตัวแทนตามแบบของไฮเซนเบอร์ก ตัวดำเนินการขึ้นกับเวลา เมื่อ $[\underline{\underline{H}}, \underline{\underline{Q}}]$ คือ วงเล็บของการสับเปลี่ยนของเมทริกซ์ $\underline{\underline{H}}$ และเมทริกซ์ $\underline{\underline{Q}}$

ยังมีตัวแทนอีกชนิดหนึ่งเรียกว่าตัวแทนแบบอันตรกิริยา (interaction representation) ตัวแทนชนิดนี้เห็นได้จากการแบ่งแฮมมิลโทเนียนออกเป็นสองส่วน คือ

$$H = H_0 + H_1 \qquad (1\text{-}74)$$

ชนิดของปัญหาทางควอนตัมจะเป็นตัวชี้ว่าจะใช้แฮมมิลโทเนียนชนิดนี้เมื่อใด H_0 จะมีฟังก์ชันมูลฐานออร์ทอนอร์มอลเช่นเดียวกับตัวแทนตามแบบของไฮเซนเบอร์ก ดังนั้น

$$H_0 U_n = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_n \qquad (1\text{-}75)$$

ส่วน H_1 เป็นส่วนของแฮมมิลโทเนียนซึ่งทำให้เกิดอันตรกิริยา (interaction) ระหว่างระบบต่างชนิดกัน

ถ้าหาก ψ เป็นฟังก์ชันคลื่นใด ๆ ซึ่งทำให้

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi \qquad (1\text{-}76)$$

เราอาจจะกระจายฟังก์ชันคลื่น ψ ได้ดังนี้

$$\psi = \sum_k \psi_k U_k \qquad (1\text{-}77)$$

แทนค่าสมการที่ (1-77) ลงในสมการที่ (1-76)

$$H \sum_k \psi_k U_k = i\hbar \sum_k \frac{\partial}{\partial t}(\psi_k U_k) \qquad (1\text{-}76)'$$

$$(H_0+H_1)\sum_k \psi_k U_k = H_0 \sum_k \psi_k U_k + H_1 \sum_k \psi_k U_k$$

$$= \sum_k \psi_k Ho\ U_k + H_1 \sum_k \psi_k U_k$$

$= \text{R.H.S.}$ ของสมการ (1-76)′

$$\therefore \sum_k \psi_k H_0 U_k + H_1 \sum_k \psi_k U_k = i\hbar \sum_k \left(\frac{\partial}{\partial t}\psi_k\right) U_k + i\hbar \sum_k \psi_k \frac{\partial}{\partial t} U_k \tag{1-78}$$

ใช้สมการที่ (1-75) ในสมการที่ (1-78) เหลือ

$$H_1 \sum_k \psi_k U_k = i\hbar \sum_k \left(\frac{\partial}{\partial t}\psi_k\right) U_k \tag{1-78}'$$

คูณสมการที่ (1-78)′ ด้วย U_m^* แล้วอินทีเกรตทางด้านซ้ายของสมการ (1-78)′ กลายเป็น

$$< m \mid H_1 \sum_k \psi_k \mid k > = \sum_k (H_1\psi_k) < m \mid k >$$

$$= H_1\psi_m$$

ทางด้านขวาของสมการที่ (1-78)′ คือ $i\hbar \sum_k \left(\frac{\partial}{\partial t}\psi_k\right) < m \mid k >$

ดังนั้น จะเห็นว่า $\quad H_1\psi_m = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi_m \qquad$ (1-79)

สมการที่ (1-79) อาจจะเขียนเป็นสมการ **เมทริกซ์ได้ดังนี้**

$$\underline{\underline{H}}_1 \cdot \underline{\underline{\psi}} = i\hbar \underline{\underline{\psi}} \tag{1-80}$$

ในตัวแทนแบบอันตรกิริยานี้ เราอาจจะหาอนุพันธ์เทียบกับเวลาของตัวดำเนินการใด ๆ ได้ดังนี้

ให้ $\quad Q_{ij} = < U_i \mid QU_j > \qquad$ (1-81)

เมื่อ U_i และ U_j เป็นฟังก์ชันออร์ทอนอร์มอลของ H_0 ในสมการที่ (1-74)

ดังนั้น $\quad \dot{Q}_{ij} = < \frac{\partial}{\partial t} U_i \mid QU_j > + < U_i \mid Q \frac{\partial}{\partial t} U_j >$

$$+ < U_i \ \frac{\partial}{\partial t} Q|U_j > \tag{I-82}$$

ใช้สมการที่ (I-75) ในสมการที่ (I-82)

$$\dot{Q}_{ij} = \frac{i}{\hbar} < H,, U_i \quad QU, > \quad \frac{i}{\hbar} < U, \mid QH_0U_j >$$

$$+ < U, \ \frac{\partial}{\partial t} Q \quad U, >$$

$$= \frac{i}{\hbar} < U_i | [H_0, Q] | U_j > + < U_i | \frac{\partial}{\partial t} Q | U_j > \tag{1-83}$$

สมการที่ (1-83) อาจจะเขียนเป็นสมการแมททริกซ์ได้ดังนี้

$$\dot{\underline{\underline{Q}}} = \frac{i}{\hbar} [\underline{\underline{H}}_0, \underline{\underline{Q}}] + \frac{\partial}{\partial t} \underline{\underline{Q}} \tag{1-84}$$

ตัวแทนแบบอันตรกิริยานิยมใช้ในปัญหาควอนตัม เมื่อ $H_1 << H_0$ ทำให้สามารถใช้วิธีประมาณที่เรียกว่า เพอเทอเบชั่นได้ เพราะ H_1 ทำให้มีการเปลี่ยนแปลงของค่าไอเกนของ H_0 เพียงเล็กน้อย

ข้อสังเกตอีกประการหนึ่งในเรื่องของตัวแทนก็คือ โดยปกติจะไม่มีการแบ่งว่า ทฤษฎีทางควอนตัมใดใช้ตัวแทนชนิดใดชนิดหนึ่งโดยเฉพาะ หากแต่มีการผสมปนเปกันไป ตัวแทนตามแบบของไอเซนเบอร์กช่วยให้เขียนเมทริกซ์ของแฮมมิลโทเนียนและตัวดำเนินการอื่น ๆ ซึ่งสับเปลี่ยนกันได้กับแฮมมิลโทเนียนนั้น อยู่ในรูปของเมทริกซ์ซึ่งมีค่าเฉพาะบนเส้นทแยงมุม ชุดของตัวดำเนินการเป็นเครื่องชี้ว่าเราควรเลือกใช้ตัวแทนชนิดใด แต่ชุดของตัวดำเนินการนั้นไม่ได้บังคับการเรียงแถวตั้งและแถวนอนของเมทริกซ์ของฟังก์ชันมูลฐาน U_k ว่าจะต้องเรียงอย่างไร อีกทั้งไม่ได้กำหนดค่าเฟส (phase factor) ของฟังก์ชันมูลฐาน U_k ว่าต้องเป็นเท่าใด

1.7 เมทริกซ์ซึ่งมีองค์ประกอบเป็นจำนวนนับไม่ได้ (Infinite Matrices)

ในตอนที่แล้วมาเราพูดถึงสเปซซึ่งมีมิติเป็นจำนวนที่นับได้ ซึ่งมีฟังก์ชันมูลฐาน U_j เป็นจำนวนที่นับได้เช่นกัน แต่ในทางปฏิบัติแล้วเราจะต้องเกี่ยวข้องกับสเปซซึ่งมีมิติเป็นจำนวนนับไม่ได้ ในการขยายสังกัปไปสู่สเปซซึ่งมีจำนวนนับไม่ได้นี้ เราจะทำให้สถานการณ์ง่ายขึ้นโดยใช้สมมติฐานต่อไปนี้

1. ให้ฟังก์ชันมูลฐานยังคงเป็นชุดที่นับได้ กรณีนี้เราจะกำหนดขึ้นว่าระบบควอนตัมที่เราพิจารณาอยู่นั้นอยู่ภายในลูกบาศก์ที่ใหญ่ (มิติเข้าสู่อนันต์)

2. ฟังก์ชันมูลฐานเหล่านี้มีตัวแปรซึ่งเป็นค่าต่อเนื่องเพียงตัวเดียว นั่นคือ

$$U_k = U_k(\bar{r})$$

3. U_k เป็นชุดฟังก์ชันที่มีความสมบูรณ์โดยที่ $-\infty \leqslant k \leqslant \infty$

ตามสมมติฐานที่กล่าวมาแล้วนี้ทำให้ตัวดำเนินการ การดำเนินการ ฟังก์ชันและอินทีเกรชั่นต่าง ๆ จะเปลี่ยนไปดังนี้ (หมายเหตุ : ตัวสังยุคเชิงซ้อนในข้อ (1-7) นี้ถ้าเป็นเมทริกซ์หมายถึงมีการ transpose ด้วย)

เมทริกซ์ซึ่งมีองค์ประกอบเป็นจำนวนนับได้	เมทริกซ์ซึ่งมีองค์ประกอบเป็นจำนวนนับไม่ได้
1. $< U_j \| U_k > = \delta_{jk}$ (1-85)	$< U_q \| U_{q'} > = \delta(q - q')$ (1-86) โดยที่ $\int_{-\infty}^{\infty} U_q^*(\bar{r})\, U_q(\bar{r}')\, dq = \delta(\bar{r} - \bar{r}')$ (1-87)
2. $\psi = \sum_j a_j U_j$ (1-88)	$\psi(\bar{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(q)\, U_q(\bar{r}) dq$ (1-89)

พึงสังเกตว่า $\int |\psi(\bar{r})|^2 d\bar{r} = \int |\psi(q)|^2 dq$ (1-90)

ตัวอย่างที่ 3 กำหนดให้ plane wave eigenfunction คือ

$$\psi(\bar{r}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int \psi(\bar{k}) \exp(i\bar{k}\cdot\bar{r})\, d\bar{k} \qquad (1\text{-}91)$$

จงแสดงว่า $\int |\psi(\bar{r})|^2 d\bar{r} = \int |\psi(\bar{k})|^2 d\bar{k}$

วิธีทำ ให้ $\psi(\bar{r})$ เป็นฟังก์ชันคลื่นซึ่งนอร์มอลไลซด์

$$\therefore \int |\psi(\bar{r})|^2 d\bar{r} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\bar{r} \iint d\bar{k}\, d\bar{k}'\, \psi^*(\bar{k}')$$
$$\exp(-i\bar{k}'\cdot\bar{r})\, \psi(\bar{k}) \exp(i\bar{k}\cdot\bar{r})$$

เนื่องจาก $\bar{r}$, $\bar{k}$ และ $\bar{k}'$ ต่างก็เป็นตัวแปรอิสระด้วยกัน ดังนั้นเราจึงเลือกทำการอินทีเกรตโดยใช้ตัวแปร $\bar{r}$ ดังนี้

$$\begin{aligned}\int |\psi(\bar{r})|^2 d\bar{r} &= \iint d\bar{k}'\, d\bar{k}\, \psi^*(\bar{k}')\, \psi(\bar{k}) \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\bar{r} \exp i(\bar{k} - \bar{k}') \\ &= \iint d\bar{k}'\, d\bar{k}\, \psi^*(\bar{k}')\, \psi(\bar{k})\, \delta(\bar{k} - \bar{k}') \\ &= \int dk\, |\psi(\bar{k})|^2 \qquad \text{Q.E.D.}\end{aligned}$$

3. $a_j = \langle U_j | \psi \rangle$ (1-92)

$$\begin{aligned}\psi(q) &= \langle U_q | \psi \rangle \\ &\equiv \int U_q^*(\bar{r})\,\psi(\bar{r})\,d\bar{r} \\ &= \iint \psi(q')\,U_q^*(\bar{r})\,U_{q'}(\bar{r})\,d\bar{r}\,dq' \\ &= \int \psi(q')\,\delta(q'-q)\,dq' \qquad (1\text{-}93)\end{aligned}$$

ข้อควรสังเกต จากสมการที่ (1-93) เราอาจเขียนสมการเช่นเดียวกัน โดยใช้ตัวแปร $\bar{r}$ ดังนี้

$$\psi(\bar{r}) = \int \psi(\bar{r}')\,\delta(\bar{r}'-\bar{r})\,d\bar{r}' \qquad (1\text{-}94)$$

เราอาจจะตีความ (1-94) ว่า เป็นการกระจายฟังก์ชันคลื่น $\psi(\bar{r})$ โดยใช้ฟังก์ชันมูลฐาน-$\delta(\bar{r}'-\bar{r})$ ก็ได้ความ

4. ตัวดำเนินการเฮอร์มีเชียน

$$\begin{aligned}Q_{kj} &= \langle U_k | Q | U_j \rangle \\ &\equiv \int d\bar{r}_1 d\bar{r}_2 \ldots d\bar{r}_N\, U_k^* Q U_j \qquad (1\text{-}95)\end{aligned}$$

$$Q_{q',q} \equiv \int U_{q'}^*\, Q\, U_q\, d\bar{r} \qquad (1\text{-}96)$$

และถ้าหาก U_q เป็นฟังก์ชันไอเกนของ Q

$$Q_{q',q} = q\,\delta(q-q') \qquad (1\text{-}96)'$$

5. ผลคูณของตัวดำเนินการเฮอร์มีเชียน

$$\sum_k R_{ik} S_{kj} = T_{ij} \qquad (1\text{-}97)$$

$$(\underline{\underline{Q}}\cdot\underline{\underline{P}})_{q',q''} = \int Q_{q',q}\, P_{q,q''}\, dq \qquad (1\text{-}98)$$

6. $$\left.\begin{aligned} Q\psi &= \psi' \\ \underline{\underline{Q}}\cdot\underline{\psi} &= \underline{\psi}' \end{aligned}\right\} \qquad (1\text{-}99)$$

$$\underline{\psi}' = \underline{\underline{Q}}\cdot\underline{\psi}$$

ในเมื่อองค์ประกอบของ ψ' คือ

$$\begin{aligned}\psi'_q &= \int Q_{q,q'}\,\psi_{q'}\,dq' \\ &= \int Q(q,q')\,dq'\,\psi(q') \qquad (1\text{-}100)\end{aligned}$$

สมการที่ (1-100) อาจจะตีความว่า ตัวดำเนินการอินทีกรอล $\int Q(q,q')\,dq'$ ทำบน Fourier transform $\psi(q')$ ให้ ψ'_q ก็ได้

ข้อสังเกต

(1) จากสมการที่ (1-96) $Q_{q',q} \equiv \int U_{q'}^*\, Q\, U_q\, d\bar{r}$ เราอาจจะเขียนสมการเดียวกัน โดยใช้ตัวแปร $\bar{r}$ ได้ดังนี้

$$Q(\bar{r},\bar{r}') = \int \delta(\bar{r}-\bar{r}'')\,Q''\,\delta(\bar{r}'-\bar{r}'')\,d\bar{r}'' \qquad (1\text{-}101)$$

Q'' แสดงว่าตัวดำเนินการ Q ทำบนตัวแปร $\bar{r}''$ โดยที่ $\delta(\bar{r}-\bar{r}'')$ และ $\delta(\bar{r}'-\bar{r}'')$ เป็นฟังก์ชันมูลฐาน

(2) จากสมการที่ (1-96)$'$

$$\begin{aligned} \bar{r}_{r,r'} &= \int \delta(\bar{r}-\bar{r}'')\bar{r}''\,\delta(\bar{r}'-\bar{r}'')d\bar{r}'' \\ &= \bar{r}\delta(\bar{r}-\bar{r}') \end{aligned}$$

1.8 สรุป

$$\text{ถ้า } L = a_0(x)\left(\frac{d}{dx}\right)^n + a_1(x)\left(\frac{d}{dx}\right)^{n-1} + \dots + a_n(x)$$

$$M = (-1)^n\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^n a_0(x) - \left(\frac{d}{dx}\right)^{n-1} a_1(x) + \dots + (-1)^n a_n(x)\right]$$

$L \equiv M$ แล้ว

L คือ self-adjoint differential operator

$$\text{ถ้า } \int_c^d (U_j^* L U_i - U_i L U_j^*)dx = \left\{ U_i\, a_{n-1} U_j^* + \begin{vmatrix} U_i^*\, a_{n-2} & U_i^* \\ \frac{d}{dx}(a_{n-2}\, U_j^*) & \frac{d}{dx} U_i^* \end{vmatrix} + \dots \right\}\Bigg|_c^d \equiv 0 \text{ แล้ว} \qquad (1\text{-}8)$$

สมการที่ (1-8) มีชื่อเรียกว่า self adjoint boundary condition

ตัวดำเนินการแฮมมิลโทเนียนในกลศาสตร์ควอนตัมก็เป็น self-adjoint differential operator ตัวหนึ่ง

ในหัวข้อ 1.2 ได้แสดงให้เห็นว่า ตัวดำเนินการเฮอร์มีเชียนกับเฮอร์มีเชียนเมทริกซ์ใช้วิธีการที่คล้ายคลึงกันในการแก้ปัญหาค่าไอเกน

ในหัวข้อที่ 1.3 ได้แสดงวิธีเปลี่ยนตัวดำเนินการดิฟเฟอเรนเชียลเป็นตัวดำเนินการเมทริกซ์ และเขียนเวกเตอร์ฟังก์ชันให้อยู่ในรูปของเมทริกซ์

ในหัวข้อที่ 1.4 ได้พิสูจน์ความเหมือนกันของตัวดำเนินการแบบเมทริกซ์และแบบดิฟเฟอเรนเชียลในกลศาสตร์ควอนตัม

ในหัวข้อที่ 1.5 ได้กล่าวถึงคุณสมบัติที่สำคัญบางประการของตัวแทนเมทริกซ์ของตัวดำเนินการเชิงเส้นดังนี้ แมททริกซ์ของตัวดำเนินการเฮอร์มีเชียนใด ๆ เป็นเฮอร์มีเชียนเมทริกซ์ เมทริกซ์ของผลคูณของตัวดำเนินการสองตัวเท่ากับผลคูณของเมทริกซ์

ของตัวดำเนินการแต่ละตัวในประการสุดท้าย ถ้าฟังก์ชันไอเกนของตัวดำเนินการควอนตัมเป็นชุดของเวกเตอร์ออร์ทอนอร์มอลที่สมบูรณ์แล้ว เมทริกซ์ของตัวดำเนินการควอนตัมนั้นซึ่งเกิดจากฟังก์ชันไอเกนชุดนี้จะมีค่าเฉพาะบนเส้นทแยงมุม

ในหัวข้อที่ 1.6 ได้แบ่งตัวแทนเมทริกซ์ออกเป็นสามแบบ คือ ตัวแทนเมทริกซ์แบบของโชร์ดิงเจอร์ ตัวแทนเมทริกซ์แบบของไฮเซนเบอร์ก และตัวแทนเมทริกซ์แบบอันตรกิริยา

ในหัวข้อที่ 1.7 ได้ขยายเมทริกซ์จากเมทริกซ์ซึ่งมีองค์ประกอบเป็นจำนวนนับได้ไปสู่เมทริกซ์ซึ่งมีองค์ประกอบเป็นจำนวนนับไม่ได้ โดยพิจารณาระบบควอนตัมซึ่งเดิมเป็นระบบที่อยู่ในขอบเขตจำกัดไปสู่ระบบซึ่งมีขอบเขตเป็นอนันต์

1.9 คำถามท้ายบท

1. self-adjoint differential operator คืออะไร?
2. จงอธิบายวิธีหาค่าไอเกนและลักษณะค่าไอเกนของเฮอร์มีเชียนเมทริกซ์?
3. จงพิสูจน์ความเหมือนกันของตัวดำเนินการแบบเมทริกซ์และแบบดิฟเฟอเรนเชียล?
4. เฮอร์มีเชียนเมทริกซ์ มีคุณสมบัติอย่างไร?
5. จงสำรวจดูความเหมือนและความแตกต่างระหว่างเมทริกซ์ซึ่งมีองค์ประกอบนับได้และเมทริกซ์ซึ่งมีองค์ประกอบเป็นอนันต์?

แบบฝึกหัดบทที่ 1

1. (ก) ในตัวแทนโมเมนตัม (momentum representation) ฟังก์ชันคลื่นเป็นฟังก์ชันของตัวแปรใด?

   (ข) จงให้ความหมายของค่าสัมบูรณ์ (absolute value) ของฟังก์ชันคลื่นนี้? ถ้าหากฟังก์ชันคลื่นนั้นเป็นฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคตัวเดียวที่ไม่มีสปิน

2. สมมติว่า one-dimensional simple harmonic oscillator มีปริมาณการขจัดอยู่ที่ตำแหน่ง x_0 เมื่อเวลา $t = 0$ จงแสดงว่า เมื่อเวลาผ่านไปหนึ่งส่วนสี่ของรอบ $\left(t = \frac{\pi}{2\omega}\right)$ โมเมนตัมจะมีค่า $p = \sqrt{km}\, x_0$

3. ในตัวแทนตำแหน่ง (position representation) **เมทริกซ์แฮมมิลโทเนียนสำหรับอนุภาคตัวเดียวอาจจะเขียนได้ว่า**

$$H_{\bar{r}\bar{r}'} = H\delta(\bar{r}-\bar{r}')$$

เมื่อ H เป็นตัวดำเนินการแฮมมิลโทเนียนซึ่งกระทำบน $\bar{r}$ จงแสดงว่า inverse ของแมททริกซ์นี้อาจจะเขียนได้ว่า

$$H^{-1}_{rr'} = \sum_n E_n^{-1}\, \phi_n^*(\bar{r}')\, \phi_n(\bar{r})$$

E_n และ ϕ_n เป็นค่าไอเกนของพลังงาน (energy eigenvalue) และฟังก์ชันไอเกนตามลำดับ อาจจะสมมติให้ ϕ_n เป็นชุดฟังก์ชันออร์ทอนอร์มอลก็ได้ สัญลักษณ์ของผลบวกจะกลายเป็นอินทีกรอล เมื่อพลังงานเปลี่ยนจากค่ากระโดด (discrete) เป็นค่าต่อเนื่อง (continuous)

4. ถ้า $\underline{\underline{A}}$ เป็น orthogonal matrix แล้ว $\underline{\underline{A}}^T = \underline{\underline{A}}^{-1}$ จงแสดงว่า ถ้า $\underline{\underline{B}} = \begin{vmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$

แล้ว $\underline{\underline{B}}$ เป็น orthogonal matrix ($\underline{\underline{B}}$ เป็นแมททริกซ์ที่ทำให้เกิดการหมุนรอบแกน Z เป็นมุม θ) จงหาดีเทอร์มีเนนท์ของ $\underline{\underline{B}}$ ด้วย

5. ในตัวแทนซึ่งแมททริกซ์ของ L^2 และ L_z มีค่าตามแนวทแยงมุม จงหาไอเกนเวกเตอร์ซึ่งเป็นไอเกนเวกเตอร์ของ L_x และ L^2 พร้อม ๆ กัน โดยให้ค่าไอเกนของ L^2 คือ $2\hbar^2$

6. projection operator คือ ตัวดำเนินการซึ่งฉาย (project) เวกเตอร์ลงในสเปซย่อย (subspace) ตัวอย่างเช่น

$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ ฉายเวกเตอร์ $\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}$ ซึ่งเป็นเวกเตอร์ในสามมิติ ลงในสเปซ ซึ่งมีสองมิติ ในกรณีนี้ผลลัพธ์ คือ $\begin{bmatrix} a \\ b \\ 0 \end{bmatrix}$

(ก) จงแสดงว่า projection operator $\underline{\underline{P}}$ ใด ๆ มีคุณสมบัติดังนี้

$$\underline{\underline{P}}^2 - \underline{\underline{P}} = 0$$ และค่าไอเกนของ $\underline{\underline{P}}$ คือ 0 กับ 1

(ข) จงแสดงว่า integral operator $P_n(\bar{r}) = \int U_n(\bar{r})\, U_n^*(\bar{r}')\, d\bar{r}'$ ฉายเวกเตอร์ฟังก์ชัน $\psi(\bar{r})$ ลงบนแกนของฮิลเบอร์ทสเปซซึ่งมี $U_n(\bar{r})$ เป็น unit vector

(ค) จงแสดงว่า projection operator เป็นตัวดำเนินการเฮอร์มีเชียน

(ง) จงแสดงว่า $P = \frac{1}{n} \sum_{q=1}^{n} \exp\left(\frac{2\pi i}{\hbar} \frac{q}{n} L_z\right)$ เป็น projection operator สำหรับสเปซย่อยที่มีเลขดัชนีควอนตัม $m\ell$ มีค่าเท่ากับเลขจำนวนบวกคูณด้วย n

7. ถ้าหาก $\underline{\underline{A}}$ เป็นเฮอร์มีเชียนเมทริกซ์ จงแสดงว่า $\exp(i\underline{\underline{A}})$ เป็นยูนิทารีเมทริกซ์ (Unitary matrix)

8. (ก) จงแสดงว่าตัวดำเนินการ $Q \equiv P \sin \omega t - m\omega X \cos \omega t$ ซึ่งเป็นตัวดำเนินการ สำหรับ simple harmonic oscillator ไม่ขึ้นกับเวลา

(ข) ตัวดำเนินการนี้เป็นค่าคงที่ในการเคลื่อนที่ (Constant of motion) หรือไม่?

(ค) เราจะสามารถทำให้ตัวดำเนินการนี้มีค่าเฉพาะค่าบนเส้นทแยงมุม พร้อมกับแฮมมิลโทเนียนเมทริกซ์หรือไม่?

9. จงแสดงว่าการบวก การลบ และการคูณเมทริกซ์ด้วยค่าคงที่มีกฎเกณฑ์เหมือนในพีชคณิตธรรมดา

10. จากตัวอย่างที่ 2 ในเรื่อง simple harmonic oscillator จงหาค่าของ $\langle x^2 \rangle$, $\langle p^2 \rangle$ และ $\langle H \rangle$ โดยใช้ฟังก์ชันไอเกนในสมการที่ (1-42)