

บทที่ 4
การแปลงรูปของตัวแทน
(Transformations of Representations)

บทที่ 4

การแปลงรูปของตัวแทน

วัตถุประสงค์

1. ให้สามารถทำแบบฝึกหัดเรื่องตัวแทนพิกัดตอนท้ายบทได้
2. ให้สามารถแปลงตัวแทนพิกัดเป็นตัวแทนโมเมนตัม
3. ให้คำนวณระบบควอนตัมอย่างง่ายโดยใช้กลศาสตร์เมทริกซ์
4. ให้แปลงกลับไปกลับมาได้ระหว่างตัวแทนแบบของโชร์ดิงเจอร์และแบบของไฮเซนเบิร์ก



รูปที่ (4-1)

Paul Adrien Maurice Dirac ผู้คิดค้นพีชคณิตของกลศาสตร์ควอนตัม

4.1 บทนำ

ในบทที่ 2 ได้แสดงให้เห็นว่าการหมุนในสามมิติอาจจะแทนได้ด้วยยูนิทารีเมทริกซ์ในสองมิติ อันที่จริงคณิตศาสตร์ของกลศาสตร์ควอนตัมก็คือ เวกเตอร์สเปซซึ่งมีมิติเป็นอนันต์และมีเวกเตอร์มูลฐานซึ่งมีขนาดหนึ่งหน่วย เวกเตอร์มูลฐานแต่ละชุดอาจจะเปลี่ยนแปลงไปมาสู่กันได้ด้วยการแปลงรูปชนิดหนึ่งซึ่งเรียกว่า การแปลงรูปแบบยูนิทารี ซึ่งจะแสดงให้เห็นในบทนี้

ให้ u_k และ v_j เป็นตัวแทนออร์thonormalสองชุด แต่ละชุดมีความสมบูรณ์ จะเห็นว่าชุดของตัวแทนทั้งสองแปลงไปมาหากันได้ดังนี้

$$v_j = \sum_k (T_{jk}^*)^T u_k \quad (4-1)$$

คูณด้วย $(v_i)^T$ แล้วอินทิเกรตได้ผลว่า

$$\langle v_i | v_j \rangle = \sum_{k,r} T_{ir} (T_{jk}^*)^T \langle u_r | u_k \rangle \quad (4-2)$$

$$\left. \begin{aligned} \text{แต่ว่า} \\ \langle v_i | v_j \rangle &= \delta_{ij} \\ \langle u_r | u_k \rangle &= \delta_{rk} \end{aligned} \right\} \quad (4-3)$$

$$\begin{aligned} \text{ดังนั้น} \quad \delta_{ij} &= \sum_{k,r} T_{ir} (T_{jk}^*)^T \delta_{rk} \\ &= \sum_k T_{ik} (T_{jk}^*)^T \end{aligned} \quad (4-4)$$

จะเห็นว่าสมการที่ (4-4) คือ สมการเมทริกซ์

$$\underline{I} = \underline{T} \cdot \underline{T}^* \quad (4-5)$$

สมการที่ (4-5) แสดงว่า $\underline{T}^* = \underline{T}^{-1}$ ดังนั้น \underline{T} เป็นยูนิทารีเมทริกซ์

4.1.1 คุณสมบัติของยูนิทารีเมทริกซ์

(ก) เวกเตอร์ซึ่งเกิดจากองค์ประกอบทางแนวตั้งหรือแนวนอนของ $n \times n$ ยูนิทารีเมทริกซ์ เป็นเวกเตอร์ซึ่งมีขนาด 1 หน่วย ซึ่งตั้งได้ฉากซึ่งกันและกัน เวกเตอร์ซึ่งเกิดจากองค์ประกอบแนวตั้งทั้งหมด หรือองค์ประกอบแนวนอนทั้งหมดของ $n \times n$ ยูนิทารีเมทริกซ์เป็นฐานออร์thonormal (orthonormal basic) ของเวกเตอร์สเปซซึ่งมี n มิติ

ตัวอย่างที่ 1 ถ้า \underline{A} เป็นยูนิทารีเมทริกซ์ และ $A =$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & & \\ a_{31} & \dots & & & \\ \vdots & & & & \\ \vdots & & & & a_{nn} \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} \text{ดังนั้น ให้ } \bar{A}_1 &= (a_{11} \ a_{12} \ a_{13} \ \dots \ a_{1n}) \\ \bar{A}_2 &= (a_{21} \ a_{22} \ \dots \ a_{2n}) \\ &\vdots \\ \bar{A}_n &= (a_{n1} \ a_{n2} \ \dots \ a_{nn}) \end{aligned}$$

$\bar{A}_1, \bar{A}_2, \dots, \bar{A}_n$ เป็นฐานออร์ทอนอร์มอลของเวกเตอร์สเปซซึ่งมี n มิติ ชุดหนึ่ง

$$\begin{aligned} \text{และให้ } \bar{A}^1 &= (a_{11} \ a_{21} \ \dots \ a_{n1}) \\ \bar{A}^2 &= (a_{12} \ a_{22} \ \dots \ a_{n2}) \\ &\vdots \\ \bar{A}^n &= (a_{1n} \ a_{2n} \ \dots \ a_{nn}) \end{aligned}$$

$\bar{A}^1, \bar{A}^2, \dots, \bar{A}^n$ เป็นฐานออร์ทอนอร์มอลของเวกเตอร์สเปซซึ่งมี n มิติ อีกชุดหนึ่ง

(ข) inverse กับ transpose ของยูนิทารีเมทริกซ์เป็นยูนิทารีเมทริกซ์

(ค) ผลคูณของยูนิทารีเมทริกซ์เป็นยูนิทารีเมทริกซ์

(ง) ค่าสัมบูรณ์ (absolute value) ของดีเทอร์มิแนนต์ของยูนิทารีเมทริกซ์มีค่าเป็นหนึ่ง

4.1.2 การแปลงรูปของฟังก์ชันคลื่น

ถ้าหากตัวแทนของฟังก์ชันคลื่น ψ ซึ่งมี v_j 's เป็นฟังก์ชันมูลฐาน คือ ψ' โดยที่องค์ประกอบของ ψ' หาได้ดังนี้

$$\psi'_j = \langle v_j | \psi \rangle \quad (4-6)$$

แทนค่า v_j จากสมการที่ (4-1)

$$\psi'_j = \sum_k T_{jk} \langle u_k | \psi \rangle = \sum_k T_{jk} \psi_k \quad (4-7)$$

ψ_k คือองค์ประกอบของ ψ เมื่อฟังก์ชันมูลฐาน คือ u_k 's สมการที่ (4-7) เขียนเป็นรูปของเมทริกซ์ได้ดังนี้

$$\bar{\psi}' = \underline{T} \cdot \bar{\psi} \quad (4-8)$$

ตัวอย่างที่ 2 สมมติว่ามีโมเมนตัมเชิงมุมสองตัว j_1 และ j_2 ทำอันตรกิริยากันในรูปของไดโพลโมเมนต์แม่เหล็กสองตัว ซึ่งมีพลังงานเป็นสัดส่วนกับ $j_1 \cdot j_2$ จงแสดงว่าฟังก์ชันคลื่น

ซึ่งเป็นฟังก์ชันไอเกนของ $\vec{j}_1 \cdot \vec{j}_2$ เกิดจากการแปลงรูปแบบยูนิทารีของฟังก์ชันคลื่นของ \vec{j}_1 และ \vec{j}_2

วิธีทำ ให้ฟังก์ชันคลื่นของตัวดำเนินการ \vec{j}_1 คือ $\phi_{j_1 m_1}$ และฟังก์ชันคลื่นของตัวดำเนินการ \vec{j}_2 คือ $\phi_{j_2 m_2}$ ดังนั้น รูปหนึ่งของฟังก์ชันคลื่นของตัวแปรทั้งสอง คือ

$$\begin{aligned} \phi_{j_1 m_1} \phi_{j_2 m_2} &= |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \\ \text{ให้ } \vec{j}^2 &= (\vec{j}_1 + \vec{j}_2)^2 \\ &= \vec{j}_1^2 + \vec{j}_2^2 + 2\vec{j}_1 \cdot \vec{j}_2 \end{aligned} \quad (4-9)$$

$$\therefore \vec{j}_1 \cdot \vec{j}_2 = \frac{1}{2} (\vec{j}^2 - \vec{j}_1^2 - \vec{j}_2^2) \quad (4-10)$$

แสดงว่า ฟังก์ชันไอเกนของตัวดำเนินการ $\vec{j}_1 \cdot \vec{j}_2$ เป็นฟังก์ชันไอเกนของ \vec{j}^2 , \vec{j}_1^2 , \vec{j}_2^2 และ j_z การที่ฟังก์ชันคลื่นเป็นฟังก์ชันไอเกนของ j_z ด้วยเพราะ $[j_z, j^2] = 0$ การมีฟังก์ชันคลื่นร่วมกันเป็นไปตามทฤษฎีในสัจพจน์ที่ 4 บทที่ 3 ให้ $\psi_{jmj_1j_2}$ เป็นฟังก์ชันไอเกนของ $\vec{j}_1 \cdot \vec{j}_2$ ดังนั้น จากสมการที่ (4-7)

$$\psi_{jmj_1j_2} = \sum_{m_1 m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jmj_1j_2} \phi_{j_1 m_1} \phi_{j_2 m_2}$$

หรือเขียนเป็นสัญลักษณ์ของ Dirac ได้ว่า

$$|jmj_1j_2\rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle jmj_1j_2 | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \quad (4-11)$$

เมื่อ $C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jmj_1j_2} = \langle jmj_1j_2 | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle$ เป็นองค์ประกอบของการแปลงรูปแบบยูนิทารีที่ต้องการ $\langle jmj_1j_2 | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle$ มีชื่อเรียกว่าสัมประสิทธิ์ของ Clebsch-Gordon หรือสัมประสิทธิ์ของ Wigner

4.1.3 การแปลงรูปของตัวดำเนินการ

สมมติว่าตัวดำเนินการ Q ในตัวแทน v_j เขียนได้ดังนี้

$$Q'_{ij} = \langle v_i | Q | v_j \rangle \quad (4-12)$$

แทนค่า v_i และ v_j จากสมการที่ (4-1)

$$\begin{aligned} Q'_{ij} &= \sum_{k, l} T_{ir} (T_{jk}^*)^T \langle u_r | Q | u_k \rangle \\ &= \sum_{k, l} T_{ir} Q_{lk} (T_{jk}^*)^T \end{aligned} \quad (4-13)$$

หรือเขียนในรูปของเมทริกซ์ได้ว่า

$$\underline{Q}' = \underline{T} \cdot \underline{Q} \cdot \underline{T}^{-1} \quad (4-14)$$

สมการที่ (4-14) เรียกว่าการแปลงรูปแบบ similarity ถ้า \underline{T} เป็นยูนิทารีเมทริกซ์ เราเรียกสมการที่ (4-14) ว่าการแปลงรูปแบบยูนิทารี

4.1.4 คุณสมบัติของการแปลงรูปแบบยูนิทารี

คำนิยาม ถ้าหาก $\underline{Y} = \underline{A} \cdot \underline{x}$ เป็นการแปลงรูปเชิงเส้นซึ่งมี \underline{A} เป็นยูนิทารีเมทริกซ์ การแปลงรูปชนิดนี้เรียกว่า การแปลงรูปแบบยูนิทารี (unitary transformation) ซึ่งมีคุณสมบัติต่อไปนี้

(ก) การแปลงรูปแบบยูนิทารีรักษานาของเวกเตอร์และมุมระหว่างเวกเตอร์

(ข) ถ้า E-basis เป็นฐานออร์ทอนอร์มอลชุดหนึ่ง การแปลงรูปจาก E-basis ไปสู่ Z-basis ทำได้โดย

$$\underline{\psi}' = \underline{A} \cdot \underline{\psi} \quad (4-15)$$

$\underline{\psi}'$ เป็นเวกเตอร์ฟังก์ชันซึ่งองค์ประกอบขึ้นอยู่กับ การเขียนฟังก์ชันคลื่นใน E-basis ส่วน $\underline{\psi}$ เป็นเวกเตอร์ซึ่งองค์ประกอบของเวกเตอร์ขึ้นอยู่กับ การเขียนฟังก์ชันคลื่นใน Z-basis และ \underline{A} เป็นยูนิทารีเมทริกซ์ ดังนั้น

$$\text{Z-basis เป็นฐานออร์ทอนอร์มอล} \leftrightarrow \underline{A} \text{ เป็นยูนิทารีเมทริกซ์} \quad (4-16)$$

(ค) ทฤษฎี สมการเมทริกซ์ไม่เปลี่ยนรูปเมื่อมีการเปลี่ยนแปลงรูปแบบ similarity

พิสูจน์ ถ้า

$$\begin{aligned} \underline{W} &= \underline{Q} \cdot \underline{R} \\ \underline{T} \cdot \underline{W} \cdot \underline{T}^{-1} &= \underline{T} \cdot \underline{Q} \cdot \underline{R} \cdot \underline{T}^{-1} \\ &= \underline{T} \cdot \underline{Q} \cdot \underline{T}^{-1} \cdot \underline{T} \cdot \underline{R} \cdot \underline{T}^{-1} \\ \therefore \underline{W}' &= \underline{T} \cdot \underline{W} \cdot \underline{T}^{-1} \\ &= \underline{T} \cdot \underline{Q} \cdot \underline{T}^{-1} \cdot \underline{T} \cdot \underline{R} \cdot \underline{T}^{-1} = \underline{Q}' \cdot \underline{R}' \end{aligned}$$

(ง) ทฤษฎี คุณสมบัติการเป็นเฮอริมีเทียนของเมทริกซ์ไม่เปลี่ยนไปเมื่อมีการแปลงรูปแบบยูนิทารี

พิสูจน์ สมมติว่า \underline{Q} เป็นเฮอริมีเทียนและ \underline{T} เป็นยูนิทารี

$$\therefore (\underline{T} \cdot \underline{Q} \cdot \underline{T}^{-1})^* = (\underline{T}^{-1})^* \cdot (\underline{Q})^* \cdot (\underline{T})^* \quad (4-17)$$

แต่เนื่องจาก \underline{T} เป็นยูนิทารี ดังนั้น ด้านขวาของ (4-17) กลายเป็น

$$= (\underline{T}(\underline{Q})^* \underline{T}^{-1}) = \underline{T} \cdot \underline{Q} \cdot \underline{T}^{-1} \quad (4-18)$$

ขั้นสุดท้ายของสมการ (4-18) ใช้คุณสมบัติความเป็นเฮอร์มิเชียนของ \underline{Q}

$$\therefore (\underline{T} \cdot \underline{Q} \cdot \underline{T}^{-1})^* = \underline{T} \cdot \underline{Q} \cdot \underline{T}^{-1} \quad \text{Q.E.D.}$$

ตัวอย่างที่ 3 จงแสดงว่าถ้า E-basis และ Z-basis เป็นชุดของฐานออร์ทอโนมอลสองชุด \underline{A} เป็นเมทริกซ์ซึ่งแปลง E-basis เป็น Z-basis แล้ว \underline{A} เป็นยูนิทารีเมทริกซ์

วิธีทำ ให้ ϕ_1 และ ϕ_2 เป็นฟังก์ชันคลื่นสองฟังก์ชัน ดังนั้น $\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle$ เป็นความน่าจะเป็นอันหนึ่ง ให้ \underline{A} เป็นเมทริกซ์ของการแปลงรูปใด ๆ

$$\therefore \langle \underline{A} \cdot \phi_1 | \underline{A} \cdot \phi_2 \rangle = \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle \quad (4-19)$$

(4-19) แสดงว่า ความน่าจะเป็นไม่ขึ้นกับการแปลงรูป ทางด้านซ้ายของสมการ (4-19) อาจเขียนเสียใหม่ว่า

$$\langle \phi_1 | \underline{A}^* \cdot \underline{A} | \phi_2 \rangle = \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle \quad (4-20)$$

แสดงว่า $\underline{A}^* \cdot \underline{A} = I$ ซึ่งหมายความว่า \underline{A} เป็นยูนิทารีเมทริกซ์ Q.E.D.

4.2 เวกเตอร์ในสามมิติและเวกเตอร์ในฮิลเบิร์ตสเปซ (Hilbert Space)

เราอาจจะเทียบฟังก์ชันคลื่นกับเวกเตอร์ในสามมิติซึ่งทำให้เห็นคุณสมบัติอันเป็นนามธรรมของฟังก์ชันคลื่นนั้นได้ชัดเจนดังนี้

เวกเตอร์ในสามมิติ

4.2.1 การหมุน (rotation)

$$\text{สมมติว่า } \underline{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

เป็นเวกเตอร์ในสามมิติ เราอาจจะแปลง \underline{a} ให้เป็น \underline{a}' โดยการหมุนด้วยเมทริกซ์ \underline{R} ดังนี้

$$\underline{a}' = \underline{R} \cdot \underline{a} \quad (4.21a)$$

ฟังก์ชันคลื่น

ให้ ψ เป็นฟังก์ชันคลื่นในฮิลเบิร์ตสเปซ ดังนั้น ψ จะมีมิติเป็นอนันต์และอาจจะมีองค์ประกอบเป็นเลขจำนวนเชิงซ้อน เรา

อาจจะหมุน ψ ในฮิลเบิร์ตสเปซได้โดยความสัมพันธ์

$$\underline{\psi}' = \underline{T} \cdot \underline{\psi} \quad (4-21b)$$

\underline{T} : ยูนิทารีเมทริกซ์

4.2.2 การคูณแบบสเกลาร์

ถ้า \underline{a} และ \underline{b} เป็นเวกเตอร์สองตัวในสามมิติ ดังนั้น

$$\begin{aligned}\underline{a} \cdot \underline{b} &= |\underline{a}| |\underline{b}| \cos \theta = (\underline{a})^T \cdot (\underline{b}) \\ &= a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 \quad (4.22a)\end{aligned}$$

ถ้า $|\psi\rangle$ และ $|\phi\rangle$ เป็นฟังก์ชันคลื่นสองฟังก์ชันในฮิลเบิร์ตสเปซ

$$\begin{aligned}\langle \psi | \phi \rangle &= \sum_{j,k} (\psi_j^*)^T \phi_k \langle j|k \rangle \\ &= \sum_k (\psi_k^*)^T \phi_k \\ &= (\underline{\psi}^*)^T \cdot \underline{\phi} \quad (4.22b)\end{aligned}$$

4.2.3 ออร์ทอกอนอลิตี (orthogonality)

ถ้า $\underline{a} \perp \underline{b}$ ดังนั้น

$$\underline{a} \cdot \underline{b} = 0 = \underline{a}^T \cdot \underline{b} \quad (4.23a)$$

ถ้า $|\psi\rangle$ และ $|\phi\rangle$ เป็นออร์ทอกอนอลกันแล้ว

$$\langle \psi | \phi \rangle = 0 \quad (4.23b)$$

4.2.4 นอร์มอลไลเซชัน (normalization)

ถ้า \underline{a} เป็นเวกเตอร์ซึ่งมีความยาวเป็นหนึ่ง

$$\underline{a} \cdot \underline{a} = 1 \leftrightarrow \underline{a}^T \cdot \underline{a} = \underline{1} \quad (4.24a)$$

ถ้า $|\psi\rangle$ เป็นนอร์มอลไลซ์เวกเตอร์ในฮิลเบิร์ตสเปซแล้ว

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (4.24b)$$

4.2.5 การสะท้อน (reflection)

การสะท้อนหรือ improper rotation คือการสะท้อนแกนพิกัดในสามมิติ

ไม่มีการแปลงรูปแบบการสะท้อนในฮิลเบิร์ตสเปซ

ข้อเปรียบเทียบที่สำคัญอันหนึ่งคือ การหมุนของวัตถุเกร็ง (rigid body rotation) ในการหมุนชนิดนี้ ระบบของเวกเตอร์ชุดหนึ่งจะถูกหมุนทั้งระบบจากพิกัดเดิมไปสู่พิกัดใหม่ การหมุนนี้อาจจะเกิดขึ้นเนื่องจากเราหมุนพิกัดเพียงอย่างเดียว ปล่อยให้ชุดของเวกเตอร์อยู่หนึ่ง ๆ ก็ได้ การหมุนอย่างนี้ทำให้เราเปลี่ยนจากฐานออร์ทอนอร์มอลชุดหนึ่งไปสู่อีกชุดหนึ่ง การคูณแบบสเกลาร์ของเวกเตอร์ใด ๆ จะไม่เปลี่ยนแปลง (invariant) เนื่องจากการหมุนนี้

ในฮิลเบิร์ตสเปซ mapping ซึ่งเท่ากับการหมุนของวัตถุเกร็ง ก็คือการแปลงรูปของตัวแทนจากฐานออร์ทอนอร์มอลชุดหนึ่งไปยังอีกชุดหนึ่ง สมมติว่า

$$\psi = \sum_j \psi_j u_j \quad (4-25)$$

n , เป็นฐานออร์โทโนมอลชุดหนึ่งในฮิลเบิร์ตสเปซ ให้ ψ' เป็นฟังก์ชันคลื่นเดียวกันในฐานออร์โทโนมอล ψ ดังนั้น

$$\psi' = \underline{T} \cdot \psi \quad (4-26)$$

สมมติว่า ϕ เป็นฟังก์ชันคลื่นอีกฟังก์ชันหนึ่งในฐานออร์โทโนมอล ψ , และ

$$\phi' = \underline{T} \cdot \phi \quad (4-27)$$

ดังนั้น $\langle \phi' | \psi' \rangle = \langle \underline{T}\phi | \underline{T}\psi \rangle$

$$= \langle \phi | \underline{T}^* \underline{T} | \psi \rangle \quad (4-28)$$

แต่เนื่องจาก \underline{T} เป็นยูนิทารีแมทริกซ์ ดังนั้น

$$\langle \phi' | \psi' \rangle = \langle \phi | \psi \rangle \quad (4-29)$$

จากสมการที่ (4-29) แสดงว่า การคูณแบบสเกลาร์ไม่เปลี่ยนแปลงรูปแบบยูนิทารี และจากสมการ (4-28) แสดงว่าการแปลงรูปแบบยูนิทารี รักษาคุณสมบัติออร์โทกอนอลลิตี้ของเวกเตอร์

4.3 คุณสมบัติของสมการไอเคน

ถ้าหากเรามีสมการไอเคน

$$Q\psi_1 = q_1\psi_1 \quad (4-30)$$

เราอาจจะเขียนเป็นสมการเมทริกซ์ได้ดังนี้

$$Q \cdot \psi_1 = q_1 \psi_1 \quad (4-31)$$

สมการที่ (4-31) อาจจะเขียนเสียใหม่ได้ดังนี้

$$(\underline{Q} - q_1 \underline{I}) \cdot \psi_1 = 0 \quad (4-31)'$$

สมการที่ (4-31)' เป็นสมการเชิงเส้น homogeneous ถ้าหากมิติของสเปซไม่เป็นอนันต์ สมการที่ (4-31)' จะมี solution เมื่อ

$$\det (\underline{Q} - q_1 \underline{I}) = 0 \quad (4-32)$$

สมมติว่ามีดี คือ n ดังนั้น สมการที่ (4-32) อาจจะเขียนเสียใหม่ได้ดังนี้

$$q_1^n + c_1 q_1^{n-1} + \dots + c_n = 0 \quad (4-33)$$

ทางด้านซ้ายมือของสมการที่ (4-33) เรียกว่า characteristic polynomial ซึ่งอาจจะเขียนในรูปของรากได้ดังนี้

$$(q - q_1)(q - q_2) \dots (q - q_n) = 0 \quad (4-34)$$

เทียบสมการที่ (4-33) และ (4-34) จะเห็นว่า

$$c_1 \equiv -\sum_i q_i \quad (4-35)$$

$$c_n \equiv (-1)^n \prod q_i = (-1)^n q_1 q_2 \dots q_n \quad (4-36)$$

จาก (4-32) และ (4-33) จะเห็นว่า trace หรือ spur ของ \underline{Q} ซึ่งมีค่านิยามดังนี้

$$\text{tr } \underline{Q} \equiv \sum_i Q_{ii} \quad (4-37)$$

$$\text{tr } \underline{Q} = -c_1 \quad \text{และจากสมการที่ (4-35)}$$

$$\text{tr } \underline{Q} = -c_1 = \sum_i q_i \quad (4-38)$$

ตัวอย่างที่ 4 จงแสดงว่า $\text{tr } \underline{Q} = -c_1$ ในกรณีที่ \underline{Q} เป็น 3×3 เมทริกซ์

วิธีทำ จากสมการที่ (4-32)

$$\begin{vmatrix} Q_{11} - q_j & Q_{12} & Q_{13} \\ Q_{21} & Q_{22} - q_j & Q_{23} \\ Q_{31} & Q_{32} & Q_{33} - q_j \end{vmatrix} = 0$$

$$\begin{aligned} \text{ดังนั้น } (Q_{11} - q_j) & \begin{vmatrix} Q_{22} - q_j & Q_{23} \\ Q_{32} & Q_{33} - q_j \end{vmatrix} - Q_{12} \begin{vmatrix} Q_{21} & Q_{23} \\ Q_{31} & Q_{33} - q_j \end{vmatrix} \\ & + Q_{13} \begin{vmatrix} Q_{21} & Q_{22} - q_j \\ Q_{31} & Q_{32} \end{vmatrix} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \therefore (Q_{11} - q_j) & \{ (Q_{22} - q_j)(Q_{33} - q_j) - Q_{23}Q_{32} \} \\ & - Q_{12} \{ Q_{21}(Q_{33} - q_j) - Q_{23}Q_{31} \} \\ & + Q_{13} \{ Q_{32}Q_{21} - Q_{31}(Q_{22} - q_j) \} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \therefore (Q_{11} - q_j) & (Q_{22} - q_j)(Q_{33} - q_j) - (Q_{11} - q_j)Q_{23}Q_{32} \\ & - (Q_{22} - q_j)Q_{13}Q_{31} - (Q_{33} - q_j)Q_{12}Q_{21} + Q_{12}Q_{23}Q_{31} + Q_{13}Q_{32}Q_{21} = 0 \\ q_j^3 - (Q_{11} + Q_{22} + Q_{33})q_j^2 + \{ \dots \} q_j + \dots & = 0 \quad (4-39) \end{aligned}$$

เทียบสมการที่ (4-39) กับสมการที่ (4-33) จะเห็นว่า

$$-c_1 = \text{tr } \underline{Q} \quad \text{Q.E.D.}$$

4.3.1 ทฤษฎี ทุก ๆ $n \times n$ แมทริกซ์ \underline{Q} จะคล้ายคลึงกับ triangular matrix ซึ่งมีค่าไอเกนของแมทริกซ์ \underline{Q} บนเส้นทแยงมุม

คำนิยาม triangular matrix $\underline{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots \\ 0 & A_{22} & A_{23} & \dots \\ 0 & 0 & A_{33} & \dots \\ 0 & 0 & & \dots \\ \vdots & \vdots & & \dots \end{bmatrix}$

พิสูจน์ ให้ค่าไอเกนของ \underline{Q} คือ q_1, q_2, \dots, q_n ให้ \underline{X}_i เป็นฟังก์ชันไอเกนซึ่งมีขนาดเป็นหนึ่งของ \underline{Q} โดยมีค่าไอเกน q_i ให้ \underline{X}_i เป็นแถวตั้งแถวแรกของ non-singular matrix \underline{R}_i ดังนั้นแถวตั้งแถวแรกของ $\underline{Q} \cdot \underline{R}_i$ คือ $(R_i$ เป็นแมทริกซ์ที่จะใช้ทำการแปลงแมทริกซ์ $\underline{Q})$

$$\underline{Q} \cdot \underline{X}_i = q_i \underline{X}_i$$

แถวตั้งแถวแรกของ $\underline{R}_i^{-1} \cdot \underline{Q} \cdot \underline{R}_i$ คือ $\underline{R}_i^{-1} \cdot \underline{Q} \cdot \underline{X}_i = (q_i, 0, 0, \dots)^T$

หรือเขียนในรูปของแมทริกซ์

$$\underline{R}_i^{-1} \cdot \underline{Q} \cdot \underline{R}_i = \begin{bmatrix} q_i & B_i \\ 0 & \underline{Q}_i \end{bmatrix} \quad (4-40)$$

โดยที่ \underline{Q}_i มีออร์เดอร์เป็น $n-1$

$$\begin{aligned} \therefore \det (q\underline{I} - \underline{R}_i^{-1} \cdot \underline{Q} \cdot \underline{R}_i) &= \det \begin{bmatrix} q - q_i & -B_i \\ 0 & q\underline{I} - \underline{Q}_i \end{bmatrix} \\ &= (q - q_i) \det (q\underline{I} - \underline{Q}_i) \end{aligned}$$

โดยทำนองเดียวกัน เราอาจจะหาค่า q_2 จาก \underline{Q}_1 แล้วจัดให้เป็น triangular matrix ขบวนการนี้อาจจะทำซ้ำไปเรื่อย ๆ จนในที่สุดแมทริกซ์ \underline{Q} จะถูกเปลี่ยนเป็น triangular matrix โดยมีค่าไอเกนอยู่เฉพาะบนเส้นทแยงมุม Q.E.D.

4.3.2 ทฤษฎี จงแสดงว่า $\det \underline{Q} = (-1)^n c_n = q_1 q_2 \dots q_n$ (4-41)

พิสูจน์ จากข้อ 4.3.1 จะเห็นว่า

$$\begin{aligned} \det \underline{Q} &= q_1 \det \underline{Q}_1 = q_1 q_2 \det \underline{Q}_2 \\ &= \dots = q_1 q_2 \dots q_n \end{aligned}$$

และจากสมการ (4-34) และ (4-33)

$$q_1 q_2 \dots q_n = (-1)^n c_n \quad \text{Q.E.D.}$$

เนื่องจากสมการเมทริกซ์ไม่เปลี่ยนเมื่อมีการแปลงรูปแบบ similarity โดยทำนองเดียวกันสมการไอเกน (4-30) ย่อมไม่เปลี่ยนไปเมื่อมีการแปลงรูปแบบ similarity ดังนั้น จะเห็นว่าค่าไอเกนของเมทริกซ์ย่อมไม่เปลี่ยนและ characteristic polynomial ย่อมไม่เปลี่ยนไปด้วย โดยทำนองเดียวกัน trace และดีเทอร์มิแนนท์ของเมทริกซ์ย่อมไม่เปลี่ยนไปเมื่อมีการแปลงรูปแบบ similarity

4.3.3 ทฤษฎี เฮอร์มิเซียนแมทริกซ์ \underline{Q} อาจจะถูกแปลงให้อยู่ในรูปของแมทริกซ์ซึ่งมีค่าไอเกนบนเส้นทแยงมุมเท่านั้น

พิสูจน์ ให้

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

แปลง $\underline{\psi}$ ดังนี้

$$\underline{\psi} = \underline{T} \cdot \underline{\psi}'$$

$$\therefore \underline{Q} \cdot \underline{T} \cdot \underline{\psi}' = q_j \underline{T} \cdot \underline{\psi}'$$

$$= q_j \underline{T} \cdot \underline{T} \cdot \underline{\psi}'$$

$$= \underline{T} \cdot \underline{T} \cdot (q_j \underline{\psi}')$$

$$\therefore \underline{Q} \cdot \underline{T} = \underline{T} \cdot \underline{Q}_d$$

$$= \underline{T} \cdot \underline{Q}_d$$

เมื่อ $\underline{Q}_d = \underline{I} q_j$ เป็นแมทริกซ์ซึ่งมีค่าบนเส้นทแยงมุมเป็นค่าไอเกน

$$\therefore \underline{T}^{-1} \cdot \underline{Q} \cdot \underline{T} = \underline{T} \cdot \underline{Q}_d \cdot \underline{T}^{-1} = \underline{Q}_d \quad \text{Q.E.D.}$$

ตัวอย่างที่ 5 ให้ $S_x = \hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$

$$\phi_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \phi_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

จงหา (1) characteristic polynomial

(2) จงแสดงว่าสมการ (4-36), (4-38) และ (4-41) เป็นจริง

วิธีทำ

$$\underline{S}_x \cdot \phi_i = q_i \phi_i$$

$$\therefore \det (\underline{S}_x - \underline{I} q_i) = 0$$

$$= \begin{vmatrix} \hbar - q_i & 0 \\ 0 & -\hbar - q_i \end{vmatrix} = 0$$

จะเห็นว่า $(h - q_i)(h + q_i) = 0$: characteristic polynomial

$$q_i = h, -h$$

$$q_i^2 - h^2 = 0$$

$$c_n = -h^2 = (-1)^2(h)(-h) : (4-36) \text{ เป็นจริง}$$

$$\text{tr } \underline{S}_i = 0 = c_1 : (4-38) \text{ เป็นจริง}$$

$$\det \underline{S}_i = -h^2 = (-1)^2(-h^2) : (4-41) \text{ เป็นจริง}$$

ตัวอย่างที่ 6 จงหาค่าไอเกนและไอเกนเวกเตอร์ของ $\underline{A} = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \end{bmatrix}$

วิธีทำ

$$\det(\underline{A} - q_i \underline{I}) = 0 = \det(q_i \underline{I} - \underline{A})$$

$$= \begin{vmatrix} q-2 & -2 & -1 \\ -1 & q_i-3 & -1 \\ -1 & -2 & q_i-2 \end{vmatrix}$$

$$\therefore q_i^3 - 7q_i^2 + 11q_i - 5 = 0 \quad (4-42)$$

\therefore ค่าไอเกน คือ $q_1 = 5, q_2 = q_3 = 1$

สำหรับค่า $q_1 = 5$

$$\underline{A} \cdot \underline{X} = q_1 \underline{X} \Rightarrow \begin{bmatrix} 3 & -2 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = 0 =$$

$$\begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = 0$$

ดังนั้น ไอเกนเวกเตอร์ของ $q_1 = 5$ คือ $(1, 1, 1)^T$

สำหรับค่า $q_2 = q_3 = 1$

$$\underline{A} \cdot \underline{X} = q_2 \underline{X} \Rightarrow \begin{bmatrix} -1 & -2 & -1 \\ -1 & -2 & -1 \\ -1 & -2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = 0$$

ได้ว่า $x_1 + 2x_2 + x_3 = 0$

ดังนั้น ไอเกนเวกเตอร์ที่เป็นอิสระเชิงเส้นแก่กันก็คือ $(2, -1, 0)^T$ และ $(1, 0, -1)^T$

พึงสังเกตว่าเราอาจจะเขียน characteristic equation ได้ดังนี้

$$\det (q_i \underline{I} - \underline{A}) = q_i^3 + (-1)^1 m_1 q_i^2 + (-1)^2 m_2 q_i^1 + (-1)^3 m_3 q_i^0$$

$$m_1 = 2+3+2 = \text{ค่าตามทแยงของ } \underline{A} = 7$$

$$m_2 = \begin{vmatrix} 2 & 2 \\ 1 & 3 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 3 & 1 \\ 2 & 2 \end{vmatrix} = 11$$

$$m_3 = \begin{vmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \end{vmatrix} = 5$$

$$\therefore \det (q_i \underline{I} - \underline{A}) = q_i^3 - 7q_i^2 + 11q_i - 5 = 0$$

ตัวอย่างที่ 7 ทฤษฎีของเคย์เลย์และแฮมมิลตัน (Cayley-Hamilton Theorem)

(1) ถ้า \underline{A} เป็น $n \times n$ เมทริกซ์ มี $\lambda \underline{I} - \underline{A}$ เป็น characteristic matrix มีสมการ characteristic ดังนี้

$$\det |\lambda \underline{I} - \underline{A}| = 0 \quad (4-43)$$

จงแสดงว่า $\{(\lambda \underline{I} - \underline{A})\} \{\text{adjugate ของ } \underline{A}\} = \{\det |\lambda \underline{I} - \underline{A}|\} \cdot \underline{I}$

พิสูจน์ ถ้า \underline{B} เป็น $n \times n$ เมทริกซ์ใดๆ ให้

$$\underline{B} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & \\ \vdots & & & \\ b_{n1} & \dots & & b_{nn} \end{bmatrix}$$

$$\text{Adjugate ของ } \underline{B} = \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \dots & \beta_{1n} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \dots & \\ \vdots & & & \\ \beta_{n1} & \dots & & \beta_{nn} \end{bmatrix} \quad (4-43ก)$$

เมื่อ β_{ij} คือ Cofactor ของ b_{ij}

แต่เนื่องจากว่า

$$\underline{B} \cdot \text{adjugate } \underline{B} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots \\ \vdots & & \\ \dots & b_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \dots \\ \vdots & & \\ \dots & & \beta_{nn} \end{bmatrix} \quad (4-43ข)$$

และเนื่องจาก $[a, -a] = 0$ ดังนั้น

$$(e^a)^{-1} = e^{-a} \quad (4-46)$$

4.4.1 ทฤษฎี $\underline{A} = e^{\underline{S}}$ เป็นตัวดำเนินการยูนิทารี ถ้าหาก \underline{S} เป็นตัวดำเนินการเฮอร์มีเชียน

พิสูจน์
$$\underline{A}^* = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\underline{S})^n}{n!} = \sum_n \frac{(-i\underline{S}^*)^n}{n!}$$

แต่เนื่องจาก \underline{S} เป็นตัวดำเนินการเฮอร์มีเชียน

$$\sum_n \frac{(-i\underline{S}^*)^n}{n!} = \sum_n \frac{(-i\underline{S})^n}{n!} = e^{-i\underline{S}} = \underline{A}^{-1}$$

$\underline{A}^* = \underline{A}^{-1}$ แสดงว่า \underline{A} เป็นยูนิทารีเมทริกซ์

บทกลับ (ซึ่งจะไม่พิสูจน์)

ถ้า $\underline{A} = e^{\underline{S}}$, \underline{S} เป็นเฮอร์มีเชียน ดังนั้น \underline{A} เป็นยูนิทารี

ทฤษฎี (ซึ่งจะไม่พิสูจน์ให้ดู)

ถ้า $\underline{S}_1, \underline{S}_2, \dots$ เป็นเฮอร์มีเชียนแล้ว $e^{i\underline{S}_1}, e^{i\underline{S}_2}, \dots$ จะเป็นยูนิทารีไม่ว่า $\underline{S}_1, \underline{S}_2, \dots$ จะสับเปลี่ยนกันได้หรือไม่

4.5 คุณสมบัติการเป็นกรุปของการแปลงรูปแบบยูนิทารี

สมมติว่า \underline{U} และ \underline{Q} เป็นยูนิทารีเมทริกซ์สองตัว จะเห็นว่า

4.5.1
$$\underline{U} \cdot \underline{Q} = \underline{W} \text{ เป็นยูนิทารีเมทริกซ์ เพราะ}$$

$$(\underline{U} \cdot \underline{Q})^* \cdot (\underline{U} \cdot \underline{Q}) = \underline{Q}^* \cdot \underline{U}^* \cdot \underline{U} \cdot \underline{Q} = \underline{Q}^* \cdot \underline{Q} = \underline{I}$$

ดังนั้น
$$(\underline{U} \cdot \underline{Q})^* = (\underline{U} \cdot \underline{Q})^{-1} \text{ นี้เป็นคุณสมบัติ closure}$$

4.5.2
$$(\underline{U} \cdot \underline{Q}) \cdot \underline{W} = \underline{U} \cdot (\underline{Q} \cdot \underline{W}) \text{ นี้เป็นคุณสมบัติ associative}$$

4.5.3 ถ้า \underline{I} เป็นไอเดนติตี้เมทริกซ์แล้ว

$$\underline{I} \cdot \underline{U} = \underline{U} \cdot \underline{I} = \underline{U}$$

4.5.4 ถ้า \underline{U} เป็นยูนิทารีเมทริกซ์แล้ว inverse ของมันคือ

$$\underline{U}^{-1} = \underline{U}^*$$

ดังนั้น การแปลงรูปแบบยูนิทารีมีคุณสมบัติเป็นกรุป

4.6 เมทริกซ์ซึ่งมีองค์ประกอบเป็นตัวแปรต่อเนื่อง (Continuous Matrix)

ในตอนก่อนเราพูดถึงการแปลงรูปของตัวแทนซึ่งมีฟังก์ชันมูลฐาน (base functions) เป็นชุดที่นับได้ ในตอนนี้เราจะพูดถึงเมทริกซ์ซึ่งมีองค์ประกอบเป็นตัวแปรต่อเนื่อง วิธีต่าง ๆ ก็นำมาจากเมทริกซ์ซึ่งมีองค์ประกอบเป็นตัวแปรนับได้นั่นเอง

4.6.1 ตัวแทนแบบฟูเรียร์ (Fourier representation)

ในสมการที่ (I-101) เรามีตัวดำเนินการซึ่งเป็นฟังก์ชันของ \bar{r} และ \bar{r}' ดังนี้

$$Q(\bar{r}, \bar{r}') = \int \delta(\bar{r} - \bar{r}'') Q'' \delta(\bar{r}' - \bar{r}'') d\bar{r}'' \quad (I-101)$$

Q'' หมายถึงว่าตัวดำเนินการนั้นกระทำบนตัวแปร \bar{r}'' เราอาจจะแปลงความหมายให้ Q กระทำบน \bar{r}' ได้ดังนี้

$$Q(\bar{r}, \bar{r}') = \pm \int \delta(\bar{r} - \bar{r}'') Q' \delta(\bar{r}' - \bar{r}'') d\bar{r}'' \quad (4-47)$$

คราวนี้ Q กระทำบนตัวแปร \bar{r}' เครื่องหมายบวกลบข้างหน้าแสดงว่า Q อาจจะเป็นคู่ (even) หรือเป็นคี่ (odd) ก็ได้ ถ้า Q เป็นคู่เครื่องหมายจะคงเดิม ถ้า Q เป็นคี่เครื่องหมายจะเปลี่ยนไป จากสมการที่ (4-47) จะเห็นว่า

$$\begin{aligned} Q(\bar{r}, \bar{r}') &= \pm Q' \delta(\bar{r} - \bar{r}') \\ &= Q \delta(\bar{r} - \bar{r}') \end{aligned} \quad (4-48)$$

ดังนั้น ตัวดำเนินการอินทิกราลซึ่งเทียบได้กับตัวดำเนินการดิฟเฟอเรนเชียล Q ก็คือ $\int Q \delta(\bar{r} - \bar{r}') d\bar{r}'$ จะเห็นว่า

$$Q f(\bar{r}) = \int Q \delta(\bar{r} - \bar{r}') f(\bar{r}') d\bar{r}' \quad (4-49)$$

เราจะแสดงการใช้สมการที่ (4-48) และ (4-49) ทำการเปลี่ยนให้ตัวดำเนินการโมเมนตัมอยู่ในลักษณะที่มีองค์ประกอบบนเส้นทแยงมุมเท่านั้น

$$\text{กำหนดให้} \quad \bar{P} = \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (4-50)$$

เราจะหายูนิทารีเมทริกซ์มาแปลงให้ \bar{P} อยู่ในรูปที่มีองค์ประกอบบนเส้นทแยงมุม การแปลงรูปอย่างนี้เท่ากับการหมุนในสามมิติ

ให้ \underline{U} เป็นยูนิทารีเมทริกซ์ซึ่งมีแถวตั้งเป็นฟังก์ชันไอเกนซึ่งมีขนาดเป็นหนึ่ง (normalized eigenfunction) ของตัวดำเนินการ \bar{P} สำหรับในสามมิติ

$$\begin{aligned}\underline{U} &= \underline{U}(\bar{r}, \bar{p}) \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{i\bar{p}\bar{r}}{\hbar}\right)\end{aligned}\quad (4-51)$$

\underline{U} ในที่นี้เป็นเมทริกซ์ซึ่งมีองค์ประกอบเป็นตัวแปรต่อเนื่อง มีแถวตั้งเป็นตัวแปร \bar{p} และแถวนอนเป็นตัวแปร \bar{r} Hermitian adjoint ของ \underline{U} มีองค์ประกอบซึ่งเป็นสังยุคเชิงซ้อนของ \underline{U} โดยที่ \bar{p} และ \bar{r} สลับกัน คือ \bar{p} เป็นแถวนอน และ \bar{r} เป็นแถวตั้ง ตัวดำเนินการ \bar{P} จะทำให้อยู่ในรูปมีองค์ประกอบเฉพาะบนเส้นทแยงมุมได้ดังนี้

$$\begin{aligned}\underline{P}(\bar{p}, \bar{p}') &= \int d\bar{r} d\bar{r}' (\underline{U}^*(\bar{r}, \bar{p}))^T \left[\frac{\hbar}{i} \bar{\nabla}\right] \delta(\bar{r}-\bar{r}') \underline{U}(\bar{r}', \bar{p}') \\ &= \int d\bar{r} (\underline{U}^*(\bar{r}, \bar{p}))^T \left[\frac{\hbar}{i} \bar{\nabla}\right] \underline{U}(\bar{r}, \bar{p}')\end{aligned}\quad (4-52)$$

$$\begin{aligned}\text{แต่เนื่องจาก } \bar{\nabla} \underline{U}(\bar{r}, \bar{p}') &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \bar{\nabla} \exp\left(\frac{i\bar{p}'\cdot\bar{r}}{\hbar}\right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \bar{p}' \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{i\bar{p}'\cdot\bar{r}}{\hbar}\right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \bar{p}' \underline{U}\end{aligned}\quad (4-53)$$

แทน (4-53) ลงใน (4-52)

$$\begin{aligned}\underline{P}(\bar{p}, \bar{p}') &= \bar{p}' \int d\bar{r} (\underline{U}^*(\bar{r}, \bar{p}))^T \underline{U}(\bar{r}, \bar{p}') \\ &= \bar{p}' \int d\bar{r} \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \exp\left\{\left(\frac{i}{\hbar}\right) \bar{r} \cdot (\bar{p}' - \bar{p})\right\} \\ &= \bar{p}' \delta(\bar{p}' - \bar{p}) = \bar{p} \delta(\bar{p}' - \bar{p})\end{aligned}\quad (4-54)$$

สมการที่ (4-54) คือเมทริกซ์ซึ่งมีองค์ประกอบเฉพาะบนเส้นทแยงมุม

จากสมการที่ (4-48) ถ้าตัวดำเนินการ \underline{Q} คือตัวดำเนินการตำแหน่ง

$$\underline{Q} = \underline{R}(\bar{r}, \bar{r}') = \bar{r} \delta(\bar{r}-\bar{r}') \quad (4-55)$$

เราจะแสดงวิธีหา \underline{R} ในรูปของตัวแทนโมเมนตัม (momentum representation) ได้ดังนี้

$$\begin{aligned}\underline{R}(\bar{r}, \bar{r}') &= \int d\bar{r} d\bar{r}' (\underline{U}^*(\bar{r}, \bar{p}))^T \bar{r} \delta(\bar{r}-\bar{r}') \underline{U}(\bar{r}', \bar{p}') \\ &= \int d\bar{r} (\underline{U}^*(\bar{r}, \bar{p}))^T \bar{r} \underline{U}(\bar{r}, \bar{p}')\end{aligned}\quad (4-56)$$

$$\text{แต่ } \bar{r} (\underline{U}^*(\bar{r}, \bar{p}))^T = \bar{r} \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{i\bar{p}\cdot\bar{r}}{\hbar}\right)$$

$$\begin{aligned}
&= i\hbar \nabla_{\vec{p}} \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{i\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar} \right) \\
&= i\hbar \nabla_{\vec{p}} \left(\underline{U}^*(\vec{r}, \vec{p}) \right)^T
\end{aligned} \tag{4-57}$$

ดังนั้น สมการที่ (4-56) อาจเขียนเสียใหม่ได้ดังนี้

$$R(\vec{r}, \vec{r}') = \int d\vec{r} i\hbar \nabla_{\vec{p}} \left(\underline{U}^*(\vec{r}, \vec{p}) \right)^T \underline{U}(\vec{r}, \vec{p}') \tag{4-58}$$

โดยที่ $\nabla_{\vec{p}} = \hat{i} \frac{\partial}{\partial p_x} + \hat{j} \frac{\partial}{\partial p_y} + \hat{k} \frac{\partial}{\partial p_z}$ (4-59)

อินทิเกรตสมการที่ (4-58) ได้ผลลัพธ์ดังนี้

$$R(\vec{r}, \vec{r}') = i\hbar \nabla_{\vec{p}} \delta(\vec{p}' - \vec{p}) \tag{4-60}$$

พึงสังเกตว่าเราเจาะจงที่จะแปลงตัวดำเนินการ $\underline{R}(\vec{r}, \vec{r}')$ ให้เป็นตัวดำเนินการของโมเมนตัม \vec{p} ไม่ใช่ \vec{p}' ทั้งนี้เนื่องจากเราแปลงตัวดำเนินการ $\underline{P}(\vec{p}, \vec{p}')$ ให้อยู่ในรูปของ \vec{p} และตัวดำเนินการ \vec{r} และ \vec{p} สลับเปลี่ยนกันไม่ได้

ต่อไปเราจะหันมาพิจารณาฟังก์ชันคลื่นกันบ้าง ฟังก์ชันคลื่นในตัวแทนโมเมนตัมซึ่งมีค่าเฉพาะบนเส้นทแยงมุม (momentum diagonal representation) ก็ได้จากการแปลงรูปแบบยูนิทารีเหมือนกัน

$$\underline{\psi}(\vec{p}) = \int \left(\underline{U}^*(\vec{r}, \vec{p}) \right)^T \cdot \underline{\psi}(\vec{r}) d\vec{r} \tag{4-61}$$

หรือเขียนเป็นสมการ เมทริกซ์

$$\underline{\psi}(\vec{p}) = \left(\underline{U}^* \right)^T \cdot \underline{\psi}(\vec{r}) \tag{4-62}$$

การอินทิเกรตกระทำบนองค์ประกอบของเมทริกซ์ จะเห็นว่า

$$\underline{U} \cdot \underline{\psi}(\vec{p}) = \underline{U} \cdot \left(\underline{U}^* \right)^T \cdot \underline{\psi}(\vec{r}) = \underline{\psi}(\vec{r}) \tag{4-63}$$

สมการที่ (4-63) จะเขียนเป็นรูปองค์ประกอบได้ดังนี้

$$\underline{\psi}(\vec{r}) = \int d\vec{p} \underline{U}(\vec{r}, \vec{p}) \cdot \underline{\psi}(\vec{p}) \tag{4-64}$$

จะเห็นว่าผลคูณระหว่างตัวดำเนินการ $\underline{R}(\vec{r}, \vec{r}')$ และ $\underline{\psi}(\vec{r})$ ในแบบตัวแทนโมเมนตัมก็คือ

$$\begin{aligned}
\underline{R} \cdot \underline{\psi}(\vec{p}) &= \int i\hbar \nabla_{\vec{p}} \delta(\vec{p} - \vec{p}') \underline{\psi}(\vec{p}') d\vec{p}' \\
&= i\hbar \nabla_{\vec{p}} \cdot \underline{\psi}(\vec{p})
\end{aligned} \tag{4-65}$$

โดยที่ $\nabla_{\vec{p}}$ กระทำบนองค์ประกอบทุก ๆ ตัวของ $\underline{\psi}(\vec{p})$

เราอาจจะสรุปเป็นกฎในการแปลงรูปจากตัวแทนตำแหน่งไปเป็นตัวแทนโมเมนตัมดังนี้ แทนฟังก์ชันคลื่นด้วย Fourier transform ของมัน แทนตัวดำเนินการโมเมนตัมด้วย \vec{p} และแทนตัวดำเนินการตำแหน่งด้วย $i\hbar \nabla_{\vec{p}}$

4.6.2 รูปของตัวแทนตามแบบของไฮเซนเบิร์ก (Heisenberg representation) เมื่อมีรูปเป็นเมทริกซ์ที่มีค่าเฉพาะบนเส้นทแยงมุม (position diagonal form) ที่เวลา $t = 0$

สมมุติว่า แฮมิลโทเนียนไม่ขึ้นกับเวลาอย่างแท้จริง ให้ $\psi(\vec{r}, t)$ เป็นฟังก์ชันคลื่นในตัวแทนตามแบบชโรดิงเจอร์ (schrodinger representation) โดยที่

$$H\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \quad (4-66)$$

เราต้องการแปลงรูปแบบยูนิทารี เพื่อแปลงฟังก์ชันคลื่น $\psi(\vec{r}, t)$ ให้อยู่ในรูปฟังก์ชันคลื่นที่ไม่ขึ้นกับเวลา นอกจากนี้เราต้องการให้มีค่าเฉพาะค่าตามแนวทแยงเมื่อ $t = 0$ ทำให้การแปลงรูปแบบยูนิทารีที่จะหาขึ้นต้องเป็น $\underline{1}$ เมื่อ $t = 0$ เมทริกซ์ซึ่งสามารถแปลงรูปได้อย่างนี้ก็คือ

$$\exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) = \underline{1} + \frac{iHt}{\hbar} + \frac{1}{2!}\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)^2 + \dots \quad (4-67)$$

ถ้า H เป็นเฮอร์มิเชียน จะเห็นว่าสมการที่ (4-67) เป็นยูนิทารี และสมการนี้เท่ากับ $\underline{1}$ เมื่อ $t = 0$ ให้ฟังก์ชันคลื่น $\psi(\vec{r}, t)$ กระจายในรูปของฟังก์ชันไอเกนสำหรับพลังงานได้ดังนี้

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_j c_j \exp\left(-\frac{iE_j t}{\hbar}\right) u_j(\vec{r}) \quad (4-68)$$

เนื่องจาก $u_j(\vec{r})$ เป็นฟังก์ชันไอเกนของพลังงาน ดังนั้น

$$\exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) \cdot u_j(\vec{r}) = \exp\left(\frac{iE_j t}{\hbar}\right) u_j(\vec{r}) \quad (4-69)$$

ใช้ตัวดำเนินการในสมการที่ (4-67) กระทำบน $\psi(\vec{r}, t)$ ได้ว่า

$$\exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) \psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, 0) = \psi'(\vec{r}) \quad (4-70)$$

จะเห็นว่า
$$\psi(\vec{r}, t) = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) \psi(\vec{r}, 0) \quad (4-71)$$

ถ้า Q เป็นตัวดำเนินการดิฟเฟอเรนเชียลใด ๆ เราอาจจะแปลงให้อยู่ในรูปซึ่งมีค่าเฉพาะบนเส้นทแยงมุมได้ดังนี้

$$Q = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) Q \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) \quad (4-72)$$

$$\underline{Q}(\underline{p}, \underline{p}') = \int d\underline{r} \underline{U}(\underline{r}, \underline{p}) \cdot \underline{Q}' \cdot \underline{U}(\underline{r}, \underline{p}) \quad (4-73)$$

สมการที่ (4-73) เป็นสมการเมทริกซ์ในตัวแทนโมเมนตัมซึ่งมีค่าเฉพาะบนเส้นทแยงมุมเมื่อ $t = 0$

4.7 สรุป

ถ้า u_k และ v_j เป็นเวกเตอร์มูลฐานออร์thonormalสองชุด เวกเตอร์ทั้งสองชุดนั้นจะมีความสัมพันธ์กันดังนี้

$$v_i = \sum_k (\underline{T}^*)^i_k u_k \quad (4-1)$$

\underline{T} : เมทริกซ์ยูนิทารี

ถ้า ψ และ ψ' เป็นฟังก์ชันคลื่นสองฟังก์ชัน เราอาจจะหายูนิทารีเมทริกซ์ใด ๆ

\underline{T} ซึ่งทำให้

$$\underline{\psi}' = \underline{T} \cdot \underline{\psi} \quad (4-8)$$

การแปลงรูปของตัวดำเนินการ \underline{Q} ทำได้ดังนี้

$$\underline{Q}' = \underline{T} \cdot \underline{Q} \cdot \underline{T}^{-1} \quad (4-14)$$

\underline{T} : ยูนิทารีเมทริกซ์ใด ๆ

เวกเตอร์ในสามมิติและฟังก์ชันคลื่นในฮิลเบิร์ตสเปซมีความคล้ายคลึงกัน ยกเว้นการแปลงรูปแบบการสะท้อน

สมการไอเกน ค่าไอเกน characteristic polynomial trace และดีเทอร์มิแนนท์ของเมทริกซ์ย่อมไม่เปลี่ยนแปลงเมื่อมีการแปลงรูปแบบคล้ายคลึง

การแปลงรูปแบบยูนิทารีมีคุณสมบัติเป็นกรุป

4.8 คำถามท้ายบท

1. จงแสดงการแปลงรูปของเวกเตอร์มูลฐานออร์thonormal ฟังก์ชันคลื่น และตัวดำเนินการ ?
2. จงแสดงความแตกต่างและความคล้ายคลึงของการแปลงรูปแบบคล้ายคลึงและแบบยูนิทารี ?
3. จงแสดงการเปรียบเทียบคุณสมบัติของเวกเตอร์ในสามมิติและในฮิลเบิร์ตสเปซ ?
4. จงแสดงคุณสมบัติที่เป็นกรุปส์ของการแปลงรูปแบบยูนิทารี ?

แบบฝึกหัดบทที่ 4

1. กำหนดให้ $\bar{X} = (1+i, -i, 1)^T$, $\bar{Y} = (2+3i, 1-2i, i)^T$
 - (ก) จงหา $(\bar{X}^*)^T \cdot \bar{Y}$
 - (ข) จงแสดงว่า $\{((\bar{X}^*)^T \cdot \bar{Y})^*\}^T = (\bar{Y}^*)^T \cdot \bar{X}$
 - (ค) จงแสดงว่า $(\bar{X}^*)^T \cdot \bar{Y} + (\bar{Y}^*)^T \cdot \bar{X} = 2 \operatorname{Re}(\bar{X}^*)^T \cdot \bar{Y}$
 - (ง) จงแสดงว่า $(\bar{X}^*)^T \cdot \bar{Y} - (\bar{Y}^*)^T \cdot \bar{X} = 2 \operatorname{Im}(\bar{X}^*)^T \cdot \bar{Y}$
2. ถ้า $|\psi| = \sqrt{(\psi^*)^T \psi}$, ψ และ ϕ เป็นฟังก์ชันคลื่นใด ๆ จงแสดงว่า
 $|\psi\phi| \leq |\psi| |\phi|$: Schwartz Inequality
3. จงแสดงว่า $\underline{B} = (\underline{A}^*)^T \cdot \underline{A}$ เป็นเฮอร์มีเชียน ถ้าหาก \underline{A} เป็น $n \times n$ เมทริกซ์
4. จงหาค่าไอเกนและไอเกนเวกเตอร์ของเมทริกซ์ต่อไปนี้

ก. $\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 3 \end{bmatrix}$	ตอบ	1, $(1, -1, 0)^T$ 2, $(2, -1, -2)^T$ 3, $(1, -1, -2)^T$
---	-----	---

ข. $\begin{bmatrix} 1 & 1 & -2 \\ -1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}$	ตอบ	-1, $(1, 0, 1)^T$ 2, $(1, 3, 1)^T$ 1, $(3, 2, 1)^T$
---	-----	---

5. จงแสดงว่า ค่าไอเกนของยูนิทารีเมทริกซ์คือ 1

6. กำหนดให้ $\underline{A} = \begin{bmatrix} 7 & -2 & 1 \\ -2 & 10 & -2 \\ 1 & -2 & 7 \end{bmatrix}$ จงหาเมทริกซ์ \underline{P} ซึ่งทำให้ $\underline{P}^{-1} \cdot \underline{A} \cdot \underline{P}$ มีค่า

ไอเกนอยู่บนเส้นทแยงมุม

7. กำหนดให้ $\underline{R} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

- (ก) จงหาค่าไอเกนและไอเกนเวกเตอร์ของเมทริกซ์ \underline{R}
- (ข) จงหาเมทริกซ์ \underline{I} ซึ่งทำให้ $\underline{R}_d = \underline{I}^{-1} \cdot \underline{R} \cdot \underline{I}$ โดยที่เมทริกซ์ \underline{I} มีแถวตั้งเป็นไอเกนเวกเตอร์ซึ่งมีขนาดเป็นหนึ่ง (normalized eigenvectors) ของ \underline{R}
- (ค) จงแสดงว่า ค่าไอเกนของ \underline{R}_d คือค่าไอเกนของ \underline{R} นั่นเอง

8. กำหนดให้ $\underline{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$

(ก) จงหาเมทริกซ์ \underline{T} ซึ่งมีแถวตั้งเป็นไอเกนเวกเตอร์ซึ่งมีขนาดเป็นหนึ่งของ \underline{S}_x สับเปลี่ยนแถวตั้งของ \underline{T} จนกระทั่งได้ค่าตามแนวทแยงเป็นค่าจริงบวก

(ข) จงแสดงว่า \underline{T} เป็นยูนิทารีเมทริกซ์ และ $\underline{T}^{-1} \cdot \underline{S}_x \cdot \underline{T}$ เป็นเมทริกซ์ซึ่งมีค่าบนเส้นทแยงมุม

(ค) จงแสดงว่าอาจจะทำ \underline{T} ให้อยู่ในรูปของตัวดำเนินการในการหมุน นั่นก็คือ

$$\underline{T} = \exp\left(\pm \frac{i\pi}{2\hbar} \underline{S}_y\right)$$

(ง) จงอธิบายการแปลงรูปชนิดนี้เทียบกับการหมุนในสามมิติ

(จ) จงอธิบายลักษณะการหมุนอันเกิดจากเมทริกซ์ชนิดนี้ใน two dimensional complex function space

9. กำหนดให้ $U_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{n/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)$ เป็นไอเกนฟังก์ชันของพลังงานของฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ในหนึ่งมิติ จงแสดงว่าตัวแทนแบบโมเมนตัมของ $U_n(x)$ คือ

$$\psi_n(p) = U_n\left(\frac{1}{\sqrt{km}} p\right)$$

10. แอมพลิจูดของการหมุนเหวี่ยงตัว (spin precession) ของอิเล็กตรอนในสนามแม่เหล็กเนื่องจากแมกเนติกโมเมนต์ของอิเล็กตรอนคือ $H = -\omega S$, เมื่อ $\omega = \frac{e\hbar}{mc}$

คือ ความถี่ของการเหวี่ยงตัว (precession frequency) จงใช้ตัวดำเนินการยูนิทารี $\underline{T} = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)$ แปลง \underline{S}_x และ \underline{S}_y ให้อยู่ในรูปของตัวแทนแบบของไฮเซนเบิร์ก

$$\underline{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \underline{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

และจงแสดงว่าตัวดำเนินการในตัวแทนแบบของไฮเซนเบิร์ก มีสมการการเคลื่อนที่ดังนี้

$$\dot{\underline{S}}'_x = \omega \underline{S}'_y, \quad \dot{\underline{S}}'_y = -\omega \underline{S}'_x$$

โดยที่ $\underline{S}'_x = \underline{T} \cdot \underline{S}_x \cdot \underline{T}^{-1}$ พึงสังเกตว่าสมการการเคลื่อนที่นี้เทียบได้กับสมการการ

เคลื่อนที่ในกลศาสตร์แบบฉบับของลูกข่าง ซึ่งมีโมเมนตัมเชิงมุมเป็น $\frac{\hbar}{2}$ มีแมกเนติก-
โมเมนต์ $\frac{e\hbar}{2mc}$ หมุนอยู่ในสนามแม่เหล็กซึ่งมีความเข้ม B

11. วัดโมเมนตัมเชิงมุมของอะตอม γ หนึ่งซึ่งมีอิเล็กตรอนเพียงตัวเดียว ได้ผลลัพธ์ดังนี้
 $\ell = 3, j = \frac{7}{2}$ และ $m_j = \frac{1}{2}$

(ก) จงหาความน่าจะเป็นของการวัด S_x ในครั้งถัดมาให้ได้ค่า $\frac{1}{2}$?

(ข) ถ้าหากวัดโมเมนตัมเชิงมุมได้ค่า $\ell = 1, m_\ell = 0$ และ $m_s = \frac{1}{2}$

จงหาความน่าจะเป็นซึ่งการวัดครั้งถัดไปจะได้ค่า $j = \frac{3}{2}$?

12. ตัวดำเนินการยูนิตารี $\exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)$ แปลงตัวดำเนินการโมเมนตัมให้อยู่ในรูป
ตัวแทนตามแบบของไฮเซนเบิร์กดังนี้

$$P'_x = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) P_x \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)$$

$$X' = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) x \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)$$

(ก) จงแสดงว่า X' และ P'_x เป็นไปตามสมการการเคลื่อนที่ในกลศาสตร์แบบฉบับ

(ข) จงแสดงว่าสำหรับฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์ชนิดง่าย

$$X' = x \cos \omega t - \frac{1}{\sqrt{km}} i \hbar \sin \omega t \frac{\partial}{\partial x}$$

$$P'_x = -i \hbar \cos \omega t \frac{\partial}{\partial x} - \sqrt{km} x \sin \omega t$$

13. อิเล็กตรอนตัวหนึ่งอยู่ในสถานะซึ่งแทนได้ด้วยเลขดัชนีควอนตัม j, ℓ และ m_j สมมติ
ว่าเราวัดโมเมนตัมเชิงมุมตามแนวแกน z จงหาความน่าจะเป็นซึ่งจะทำให้เราได้ค่า
 $\frac{\hbar}{2}$

14. จงแสดงว่า $q^n + c_1 q^{n-1} + \dots + c_n = 0$ ซึ่งเป็น characteristic polynomial ของเมทริกซ์

\underline{Q} สามารถจะแทนได้ด้วยเมทริกซ์ \underline{Q} นั่นคือ

$$\underline{Q}^n + c_1 \underline{Q}^{n-1} + \dots + c_n \underline{I} = 0$$

ข้อแนะนำ ให้ตัวดำเนินการ $\underline{Q}^n + c_1 \underline{Q}^{n-1} + \dots + c_n \underline{I}$ กระทำบนเวกเตอร์แนวตั้ง
ใด ๆ ซึ่งกระจายในรูปของฟังก์ชันมูลฐาน (base functions) ที่เหมาะสม