ב.3 דטרמיננטות

פרמוטציה של המספרים $1,2,3,\ldots,N$ היא דרך מסויימת לסדר את N המספרים. סה"כ קיימות $N!$ פרמוטציות שונות לסדר N מספרים (עבור הראשון N אפשרויות, עבור השני $N-1$ אפשרויות, ...).

הדטרמיננטה של מטריצה ריבועית $\hat{A}$ מגודל $N\times N$ הינה מספר שמתקבל ע"י המרשם הבא:

$$\det(\hat{A}) = |\hat{A}| = \begin{vmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1N} \\ \vdots & \ddots & \\ A_{N1} & \cdots & A_{NN} \end{vmatrix} = \sum_{i=1}^{N!} (-1)^{p_i} \hat{P}_i A_{11} A_{22} \ldots A_{NN} \quad (31)$$

כאשר $\hat{P}_i$ הוא אופרטור הפרמוטציה שפועל על אינדקסי העמודה $1,2,\ldots,N$ והסכום לוקח בחשבון את כל $N!$ הפרמוטציות האפשריות. p_i הינו מספר החילופים הנדרשים בכדי להגיע מהפרמוטציה הטבעית $1,2,3,\ldots,N$ לפרמוטציה i: $i_1, i_2, \ldots, i_N$.

כיוון ש-p_i מופיע בחזקה של (-1) יש הבדל רק בין פרמוטציות זוגיות ופרמוטציות אי-זוגיות.

לדוגמא עבור מטריצה מסדר 2×2
$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$$
ישנן שתי פרמוטציות של אינדקסי העמודה:

$p_1=0:(1,2)$ ו- $p_2=1\ (2,1)$

ולכן:

$$\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{vmatrix} = (-1)^0 A_{11} A_{22} + (-1)^1 A_{12} A_{21} = A_{11} A_{22} - A_{12} A_{21}$$

מספר כללים חשובים עבור דטרמיננטות:

1. אם כל האיברים בשורה או בטור של דטרמיננטה מתאפסים אזי הדטרמיננטה כולה מתאפסת.
2. אם המטריצה אלכסונית $(\hat{A})_{ij} = A_{ii}\delta_{ij}$ אזי:
$$|\hat{A}| = \prod_{i=1}^{N} A_{ii} = A_{11} A_{22} \ldots A_{NN}$$
3. חילוף יחיד של 2 שורות או שני עמודות בדטרמיננטה משנה את סימנה.
4. $|\hat{A}| = (|\hat{A}^T|)^*$
5. $|\hat{A}\hat{B}| = |\hat{A}||\hat{B}|$

6.

$$\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \cdots \sum_{k=1}^{M} c_k B_{1k} \cdots A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} \cdots \sum_{k=1}^{M} c_k B_{2k} \cdots A_{2N} \\ \vdots & \\ A_{N1} & A_{N2} \cdots \sum_{k=1}^{M} c_k B_{Nk} \cdots A_{NN} \end{vmatrix} = \sum_{k=1}^{M} c_k \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \cdots B_{1k} \cdots A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} \cdots B_{2k} \cdots A_{2N} \\ \vdots & \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} \cdots B_{Nk} \cdots A_{NN} \end{vmatrix}$$

תוצאה דומה מתקיימת עבור השורות.

3. מרחבים וקטוריים קומפלקסיים ב-N ממדים - הצגת דיראק.

בכדי להכליל את הטיפול שהודגם מן המקרה הממשי ותלת-ממדי למקרה המרוכב וה-N ממדי נשתמש בכלי חשוב שנקרא <u>כתיב דיראק</u>.
באנלוגיה לוקטור הבסיס $\{\hat{e}_i\}$ שהגדרנו, נטפל ב-N וקטורי בסיס להם ניתן את הסימון $|i\rangle$ כאשר: $i=1,2,\ldots,N$. הסימון $|i\rangle$ נקרא "וקטור-קֶט" או "קֶט" בהנחת שלמות הבסיס ניתן לכתוב כל ket $|a\rangle$ כקומבינציה ליניארית של וקטורי הבסיס $|i\rangle$ (פרישה בבסיס):

$$|a\rangle = \sum_{i=1}^{N} |i\rangle a_i \qquad (32)$$

זוהי הכללה של משוואה (1) שרשמנו מקודם עבור וקטורים תלת-ממדיים.
לאחר שהגדרנו את הבסיס השלם $\{|i\rangle\}$ ניתן לתאר את הוקטור $|a\rangle$ במלואו ע"י מקדמי פרישתו בבסיס:

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}$$

כך ש $\vec{a}$ הינו <u>ההצגה המטריציונית</u> של הוקטור האבסטרקטי $|a\rangle$ בבסיס $\{|i\rangle\}$.
כעת ניתן להגדיר את ה- adjoint כ:

$$\vec{a}^\dagger = (a_1^*, a_2^*, \ldots, a_N^*)$$

וקטור זה הוא ההצגה המטריציונית של הוקטור האבסטרקטי $\langle a|$ בבסיס $\{\langle i|\}$ כאשר הסימון $\langle\,|$ נקרא בְּרָה - bra.
המכפלה הסקלרית של הבְּרָה $\langle a|$ עם הקֶט $|b\rangle$ בבסיס $\{|i\rangle\}$ נתונה ע"י:

$$\langle a||b\rangle \equiv \langle a|b\rangle = \vec{a}^\dagger \cdot \vec{b} = (a_1^*, a_2^*, \ldots, a_N^*) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix} = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \ldots a_N^* b_N = \sum_{i=1}^{N} a_i^* b_i \qquad (33)$$

זוהי הכללה של המכפלה הסקלרית שהגדרנו במשוואה (3).

השמות bra ו-ket נבחרו כיוון שהמכפלה הסקלרית $\langle | \rangle$ נראית כמו סוגריים : bracket.

המכפלה הסקלרית של וקטור עם עצמו נתונה:

$$\langle a|a\rangle = \sum_{i=1}^{N} a_i^* a_i = \sum_{i=1}^{N} |a_i|^2 \qquad (34)$$

מספר שהוא ממשי וחיובי שמשמש כהכללה של גודל הוקטור התלת-ממדי.

ניתן להגדיר את בסיס ה-bra: $\langle i|$ השלם אשר ניתן לפרוס באמצעותו את וקטור ה-bra $\langle a|$ באופן הבא:

$$\langle a| = \sum_{i=1}^{N} a_i^* \langle i| \qquad (35)$$

כעת ניתן לרשום את המכפלה הסקלרית באופן הבא:

$$\langle a|b\rangle = \sum_{i,j}^{N} a_i^* \langle i|j\rangle b_j \qquad (36)$$

כך שלמות שביטוי זה יהיה שווה לזה הרשום במשוואה (33) נדרש כי הבסיס יהיה אורתונורמלי:

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \qquad (37)$$

זוהי הכללה של משוואה (6) למקרה הקומפלקסי, N-ממדי.

לסיכום, ה-ket $|a\rangle$ מיוצג ע"י וקטור עמודה $\vec{a}$, ה-bra $\langle b|$ ניתן להצגה ע"י וקטור שורה $\vec{b}^{*T}$, ומכפלתם הסקלרית נתונה ע"י המכפלה המטריציונית של הצגותיהם.

בכדי למצוא את מקדמי הפרישה מבצעים פיתוח אנלוגי לזה שבוצע עבור וקטורים במרחב התלת-ממדי וכופלים את הפיתוח בבסיס (32) ב-$\langle j|$ משמאל ואת הפיתוח (35) ב-$|j\rangle$ מימין:

$$\begin{cases} \langle j|a\rangle = \langle j|\left(\sum_i |i\rangle a_i\right) = \sum_i \underbrace{\langle j|i\rangle}_{\delta_{ij}} a_i = a_j \\ \langle a|j\rangle = \left(\sum_i a_i^* \langle i|\right)|j\rangle = \sum_i a_i^* \langle i|j\rangle = a_j^* \end{cases} \qquad (38)$$

כאשר השתמשנו במושג הכללה ב-$|j\rangle$ מימין משמרת הכללה הסקלרית ע"פ הגדרה (33).

מתוך משוואה (38) ניתן להראות כי מתקיים:

$$\langle j|a\rangle = a_j = (a_j^*)^* = (\langle a|j\rangle)^* = \langle a|j\rangle^* \qquad (39)$$

באמצעות משוואה (38) ניתן כעת לכתוב את המשוואות (32) ו-(35)

באופן הבא:

$$\begin{cases} |a\rangle = \sum_{i=1}^{N} |i\rangle a_i = \sum_{i=1}^{N} |i\rangle\langle i|a\rangle = \underbrace{\sum_{i=1}^{N} (|i\rangle\langle i|)|a\rangle}_{(\ldots)(\vdots)} = \Big(\sum_{i=1}^{N} |i\rangle\langle i|\Big)|a\rangle \\ \langle a| = \sum_{i=1}^{N} a_i^*\langle i| = \sum_{i=1}^{N} \langle a|i\rangle\langle i| = \sum_{i=1}^{N}\langle a|(|i\rangle\langle i|) = \langle a|\Big(\sum_{i=1}^{N} |i\rangle\langle i|\Big) \end{cases} \qquad (40)$$

מכפלה חיצונית

מתוך משוואות אלו ניתן להגדיר את אופרטור היחידה:

$$\hat{1} = \sum_{i=1}^{N} |i\rangle\langle i| . \qquad (41)$$

צורה הכללית של יחס השלמות למקרה הממשי תלת-ממדי שהוצג במשוואה (8).

האופרטור $\hat{O}$ מוגדר כגורם אשר מופעל על ה-ket $|a\rangle$ ומניב ket $|b\rangle$:

$$\hat{O}|a\rangle = |b\rangle \qquad (42)$$

גם במקרה הנוכחי, האופרטור מוגדר באופן מלא באמצעות פעולתו על וקטורי הבסיס של $\{|i\rangle\}$ וגודלה:

$$\hat{O}|i\rangle = |A\rangle = \sum_j |j\rangle O_{ji} \qquad (43)$$

צורה פריסה של ה-ket $[\hat{O}|i\rangle = |A\rangle]$ בבסיס $\{|i\rangle\}$.

בקבוצת O_{ij} הינם אלמנטי מטריצה של ההצגה המטריציונית של האופרטור $\hat{O}$ בבסיס $\{|i\rangle\}$. כפי שרשמנו מעלה, אלמנטים אלו מתקבלים ע"י הכפלת משוואה (43) ב- $\langle k|$ משמאל:

$$\langle k|\hat{O}|i\rangle = \sum_j \underbrace{\langle k|j\rangle}_{\delta_{kj}} O_{ji} = O_{ki} \qquad (44)$$

ניתן להשתמש כעת ביחס היחידה (41) בכדי לחשב את ההצגה המטריציונית של מכפלת אופרטורים: $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$:

$$\langle i|\hat{C}|j\rangle = \langle i|\hat{A}\hat{B}|j\rangle = \langle i|\hat{A}\hat{1}\hat{B}|j\rangle = \langle i|\hat{A}\Big(\sum_k |k\rangle\langle k|\Big)\hat{B}|j\rangle =$$
$$= \sum_k \langle i|\hat{A}|k\rangle\langle k|\hat{B}|j\rangle = \sum_k (\hat{A})_{ik}(\hat{B})_{kj} = \sum_k A_{ik}B_{kj} \qquad (45)$$

נסמן את ה-adjoint של אופרטור $\hat{O}$ ע"י $\hat{O}^\dagger$. אם $\hat{O}$ פועל על ה-ket $|a\rangle$ ליתן את ה-ket $|b\rangle$ אזי $\hat{O}^\dagger$ פועל על ה-bra $\langle a|$ ליתן את ה-bra $\langle b|$:

זוהי הגדרה של $\hat{O}^\dagger$.

$$\langle a|\hat{O}^\dagger = \langle b| \qquad (46)$$

משוואה זו נקראת המשוואה ה-adjoint של משוואה (42). ניתן למצוא יחס בין אלמנטי המטריצה של $\hat{O}$ ושל $\hat{O}^\dagger$ ע"י הכפלת $\langle c|$ של שני צידי משוואה (42) משמאל והכפלת $|c\rangle$ של שני צידי משוואה (46) מימין:

$$\begin{cases} \langle c|\hat{O}|a\rangle = \langle c|b\rangle \\ \langle a|\hat{O}^\dagger|c\rangle = \langle b|c\rangle \end{cases} \qquad \langle c|b\rangle = \langle b|c\rangle^* \qquad (47)$$

מתוך משוואות (39) ו-(47) מתקיים:

$$\langle a|\hat{O}^\dagger|c\rangle = \langle c|\hat{O}|a\rangle^* \qquad (48)$$

כיוון שהסימנים c,b,a הינם כלליים, מצאנו יחס כללי בין אלמנטי המטריצה של $\hat{O}$ ו-$\hat{O}^\dagger$:

$$O^\dagger_{ij} = \langle i|\hat{O}^\dagger|j\rangle = (\hat{O}^\dagger)_{ij} \underset{(48)}{=} \langle j|\hat{O}|i\rangle^* = (\hat{O})_{ji}^* = O_{ji}^* \qquad (49)$$

נוהג כיום להגדיר <u>אופרטור הרמיטי</u> כאופרטור שהוא self-adjoint:

$$\hat{O} = \hat{O}^\dagger \qquad (50)$$

כלומר שאלמנטי המטריצה מקיימים:

$$\langle a|\hat{O}|b\rangle = \langle a|\hat{O}^\dagger|b\rangle = \langle b|\hat{O}|a\rangle^*$$

ה. <u>מעברי בסיס</u>

כפי שראינו בפרק א' הבחירה בבסיס אינה חד-ערכית. בהינתן שני בסיסים שלמים אורתונורמליים $\{|i\rangle\}$ ו-$\{|\alpha\rangle\}$ נרצה למצוא את היחסים ביניהם. נשתמש באותיות לטיניות $i,j,k\ldots$ עבור בסיס אחד ובאותיות $\alpha,\beta,\mu,\ldots$ עבור הבסיס האחר. עבור שני הבסיסים:

$$\begin{cases} \langle i|j\rangle = \delta_{ij} \;;\; \sum_i |i\rangle\langle i| = 1 \\ \langle \alpha|\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta} \;;\; \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = 1 \end{cases} \qquad (51)$$

כיוון שהבסיס $\{|i\rangle\}$ הינו שלם ניתן לבטא כל ket בבסיס $\{|\alpha\rangle\}$ כקומבינציה ליניארית של kets בבסיס $\{|i\rangle\}$ ולהפך:

$$|\alpha\rangle = \underset{\text{יחס השלמות}}{\hat{1}}|\alpha\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\alpha\rangle = \sum_i |i\rangle U_{i\alpha} = \sum_i |i\rangle(\hat{U})_{i\alpha} \qquad (52)$$

כאשר הגדרנו את אלמנטי מטריצת הטרנספורמציה ע"י:

$$\langle i|\alpha\rangle = U_{i\alpha} = (\hat U)_{i\alpha} \qquad (53)$$

הטרנספורמציה ההפוכה ניתנת ע"י:

$$|i\rangle = \hat 1|i\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|i\rangle \underset{(39)}{=} \sum_\alpha |\alpha\rangle U^*_{i\alpha} \underset{(19)}{=} \sum_\alpha |\alpha\rangle(\hat U^\dagger)_{\alpha i} \qquad (54)$$

חשוב להדגיש כי מתוך ההגדרה שניתנה במשוואה (53) מתקיים כי:

$$\langle\alpha|i\rangle = U^*_{i\alpha} \neq U_{\alpha i}$$

ניתן כעת להוכיח כי הטרנספורמציה $\hat U$ הינה אוניטרית:

$$\delta_{ij} = \langle i|j\rangle = \sum_\alpha \langle i|\alpha\rangle\langle\alpha|j\rangle = \sum_\alpha (\hat U)_{i\alpha}(\hat U^\dagger)_{\alpha j} = (\hat U\hat U^\dagger)_{ij}$$

ובכתיב מטריצוני:

$$\hat 1 = \hat U\hat U^\dagger \qquad (55)$$

באופן דומה נקבל כי:

$$\delta_{\alpha\beta} = \langle\alpha|\beta\rangle = \sum_i \langle\alpha|i\rangle\langle i|\beta\rangle = \sum_i (\hat U^\dagger)_{\alpha i}(\hat U)_{i\beta} = (\hat U^\dagger U)_{\alpha\beta}$$

כלומר:

$$\hat 1 = \hat U^\dagger U \qquad (56)$$

כלומר המטריצה $\hat U$ הינה אוניטרית. וקיבלנו כי שני בסיסים אורתונורמליים קשורים האחד לשני דרך טרנספורמציה אוניטרית $\hat U$ דרך המשוואות (52) ו-(54). אלמנטי המטריצה של $\hat U$ ניתנים ע"י המכפלה הסקלרית של וקטורי הבסיס דרך משוואה (53).

ניתן כעת לקשר בין הצגות המטריצוניות של אופרטור $\hat O$ בבסיסים שונים: נניח כי $\hat O$ הינה הצגה המטריצונית בבסיס $\{|i\rangle\}$ ו- $\tilde{\hat O}$ הינה ההצגה המטריצונית בבסיס $\{|\alpha\rangle\}$:

$$\begin{cases} \hat O|i\rangle = \sum_j |j\rangle\langle j|\hat O|i\rangle = \sum_j |j\rangle O_{ji} \\ \hat O|\alpha\rangle = \sum_\beta |\beta\rangle\langle\beta|\hat O|\alpha\rangle = \sum_\beta |\beta\rangle \tilde O_{\beta\alpha} \end{cases} \qquad (57)$$

נמצא את הקשר בין שתי ההצגות ע"י שימוש ביחס השלמות:

$$\tilde O_{\alpha\beta} = \langle\alpha|\hat O|\beta\rangle = \langle\alpha|\hat 1\hat O\hat 1|\beta\rangle = \sum_{i,j}\langle\alpha|i\rangle\langle i|\hat O|j\rangle\langle j|\beta\rangle = \sum_{i,j}(\hat U^\dagger)_{\alpha i}\hat O_{ij}(\hat U)_{j\beta}$$

ובכתיב מטריצוני:

$$\hat{\tilde{\Theta}} = \hat{U}^{\dagger}\hat{\Theta}\hat{U} \qquad (58)$$

ובהכפלה ב- $\hat{U}$ משמאל וב- $\hat{U}^{\dagger}$ מימין תוך שימוש בתכונות האוניטריות נקבל:

$$\hat{\Theta} = \hat{U}\hat{\tilde{\Theta}}\hat{U}^{\dagger} \qquad (59)$$

כלומר המטריצות $\hat{\Theta}$ ו- $\hat{\tilde{\Theta}}$ קשורות בטרנספורמציה אוניטרית.
החשיבות של טרנספורמציה מסוג זה היא שלכל מטריצה הרמיטית, אשר בבסיס $\{|n\rangle\}$ הצגתה אינה אלכסונית, ניתן למצוא טרנספורמציה אוניטרית לבסיס $\{|\alpha\rangle\}$ בו הצגת האופרטור היא אלכסונית:

$$\tilde{\Theta}_{\alpha\beta} = \omega_{\alpha}\delta_{\alpha\beta} \qquad (60)$$

1. בעיית הערך העצמי.

בהשוואה לבעיה האלגברית ע"י הצגת אופרטורים בבסיס סופי, פתרון משוואת שרדינגר הסטציונרית מתורגם למציאת ערכים עצמיים ווקטורים עצמיים של הצגה המטריצונית של ההמילטוניאן.
כאשר אופרטור $\hat{\Theta}$ פועל על הוקטור $|\alpha\rangle$ התוצאה הכללית שונה מ- $|\alpha\rangle$.
עבור המקרה הפרטי בו $\hat{\Theta}|\alpha\rangle$ הוא קבוע כפול $|\alpha\rangle$:

$$\hat{\Theta}|\alpha\rangle = \omega_{\alpha}|\alpha\rangle \qquad (61)$$

נקרא $|\alpha\rangle$ וקטור עצמי של האופרטור $\hat{\Theta}$ עם ערך עצמי ω_{α}.
ללא הגבלת הכלליות ניתן לבחור את $|\alpha\rangle$ ~~[illegible]~~ מנורמל:

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1 \qquad (62)$$

אנו נהיה מעוניינים בוקטורים עצמיים של אופרטורים הרמיטיים $(\hat{\Theta}^{\dagger} = \hat{\Theta})$ שלהם התכונות הבאות:

1. הערכים העצמיים של אופרטורים הרמיטיים הינם ממשיים.

עובדה זו נובעת ממשוואה (48):

$$\left.\begin{aligned} &\langle a|\hat{\Theta}^{\dagger}|a\rangle = \langle a|\hat{\Theta}|a\rangle^{*} \\ &\hat{\Theta}^{\dagger}=\hat{\Theta} \rightarrow \; \langle a|\hat{\Theta}|a\rangle \end{aligned}\right\} \Rightarrow \langle a|\hat{\Theta}|a\rangle = \langle a|\hat{\Theta}|a\rangle^{*} \qquad (63)$$

ובהצבת (61) נקבל:

$$\omega_a = \omega_a\langle a|a\rangle = \overset{\langle a|\omega_a|a\rangle}{\langle a|\hat{\Theta}|a\rangle} = \underset{\langle a|\omega_a|a\rangle^{*}}{\langle a|\hat{\Theta}|a\rangle^{*}} = \langle a|a\rangle^{*}\omega_a^{*} = \omega_a^{*}$$