כלומר:

$$\omega_\alpha = \omega_\alpha^* \qquad (64)$$

2. הוקטורים העצמיים של אופרטור הרמיטי הם אורתוגונליים.

בהינתן $\hat{\Theta}|\beta\rangle = \omega_\beta|\beta\rangle$ המשוואה ה-adjoint הינה: $\langle\beta|\hat{\Theta}^\dagger = \langle\beta|\omega_\beta^*$

כאשר השתמשנו בעובדה שה-adjoint של מספר מרוכב הוא הצמוד הקומפלקסי שלו.

כיוון ש- $\omega_\beta = \omega_\beta^*$ ו- $\hat{\Theta} = \hat{\Theta}^\dagger$ נקבל כי:

$$\langle\beta|\hat{\Theta} = \langle\beta|\omega_\beta \qquad (65)$$

נכפול את משוואה (61) ב- $\langle\beta|$ ואת משוואה (65) ב- $|\alpha\rangle$ ונחסר:

$$\left.\begin{aligned}\langle\beta|\hat{\Theta}|\alpha\rangle &= \omega_\alpha\langle\beta|\alpha\rangle\\ \langle\beta|\hat{\Theta}|\alpha\rangle &= \omega_\beta\langle\beta|\alpha\rangle\end{aligned}\right\} \Rightarrow (\omega_\beta-\omega_\alpha)\langle\beta|\alpha\rangle = 0 \qquad (66)$$

מכאן שכאשר $\omega_\alpha \neq \omega_\beta$ חייב להתקיים כי $\langle\beta|\alpha\rangle = 0$. כלומר וקטורים עצמיים לא מנוונים חייבים להיות ניצבים.

שני וקטורים $|1\rangle$ ו- $|2\rangle$ נקראים <u>מנוונים</u> אם יש להם אותו הערך העצמי:

$$\hat{\Theta}|1\rangle = \omega|1\rangle \;;\; \hat{\Theta}|2\rangle = \omega|2\rangle \qquad (67)$$

במקרה של ניוון ניתן לבחור את הו"ע כאורתוגונליים. כדוגמא נסתכל על המקרה של שני הוקטורים $|1\rangle$ ו- $|2\rangle$ ונבצע להם תהליך <u>גרם-שמידט</u>:

נניח ששני הוקטורים מנורמלים כך ש: $\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1$.

ושהם אינם אורתוגונליים כך ש: $\langle 1|2\rangle = S \neq 0$.

נבחר את הוקטור $|I\rangle = |1\rangle$ כך שהוא מנורמל $\langle I|I\rangle = 1$.

נבחר את הוקטור $|II\rangle = |1\rangle + c|2\rangle$ ונקבע את c כך ש:

$$\langle I|II\rangle = 0 = 1 + cS \Rightarrow c = -S^{-1} \Rightarrow |II\rangle = |1\rangle - S^{-1}|2\rangle$$

והוקטור המנורמל הוא:

$$|II\rangle = (S^{-2}-1)^{-1/2}\left(|1\rangle - S^{-1}|2\rangle\right) \qquad (68)$$

~~נשתמש בדוגמה שבין וקטורים עצמיים~~

נשתמש בדוגמה שקומבינציה לינארית של שני ו"ע מנוונים הוא ו"ע בעצמה:

$$\hat{\Theta}\left(x|1\rangle + y|2\rangle\right) \underset{\text{אופרטור לינארי.}}{=} x\hat{\Theta}|1\rangle + y\hat{\Theta}|2\rangle = x\omega|1\rangle + y\omega|2\rangle = \omega\left(x|1\rangle + y|2\rangle\right) \qquad (68)$$

כעת נניח כי הוקטורים מנורמלים כך: $\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1$ ושהם אינם ניצבים: $\langle 1|2\rangle = s \neq 0$. נבחר שני וקטורים $|I\rangle$ ו- $|II\rangle$ כקומבינציות לינאריות של $|1\rangle$ ו- $|2\rangle$ כך: $|I\rangle = |1\rangle$, $\langle I|I\rangle = 1$ ו- $|II\rangle = |1\rangle + c|2\rangle$ כאשר c יקבע כך:

$$\langle I|II\rangle = 1 + cs = 0 \Rightarrow c = -s^{-1} \Rightarrow |II\rangle = |1\rangle - s^{-1}|2\rangle$$

נדרוש נירמול:

$$\langle II|II\rangle = \overset{1}{\langle 1|1\rangle} - s^{-1}\overset{s}{\langle 1|2\rangle} - s^{-1}\overset{s}{\langle 2|1\rangle} + s^{-2}\overset{1}{\langle 2|2\rangle} =$$

$$= 1 - 2 + s^{-2} = s^{-2} - 1 = N^2$$

ולכן:

$$|II\rangle = \left[s^{-2} - 1\right]^{-1/2}\left(|1\rangle - s^{-1}|2\rangle\right) \qquad (69)$$

כעת הוקטורים $|I\rangle$ ו- $|II\rangle$ שהחליפו את הוקטורים $|1\rangle, |2\rangle$ הינם אורתונורמליים.

כלומר, הוקטורים העצמיים $|\omega_i\rangle$ של אופרטור הרמיטי יכולים להיבחר כבסיס אורתונורמלי:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}. \qquad (70)$$

ההצגה המטריצונית של אופרטור הרמיטי $\hat{\Theta}$ בבסיס הנוצר ע"י הוקטורים העצמיים שלו הינה אלכסונית. ניתן לראות זאת ע"י הכפלת משוואה (61) ב- $\langle\beta|$: ההמחשה בבסיסים...

אלמנט מטריצה.

$$\langle\beta|\hat{\Theta}|\alpha\rangle = \langle\beta|\omega_\alpha|\alpha\rangle = \omega_\alpha\langle\beta|\alpha\rangle \overset{**}{=} \omega_\alpha\delta_{\alpha\beta} \qquad (71)$$

מכאן שפתרון בעיית הערך העצמי (61) שקולה ללכסון ההצגה המטריצונית של האופרטור. אשר בבסיס כלשהו ההצגה המטריצונית של $\hat{\Theta}$ אינה אלכסונית אזי נחפש טרנספורמציה אוניטרית $\hat{U}\hat{\Theta}\hat{U}^\dagger$ שתהפוך את האופרטור $\hat{\Theta}$ לאלכסוני. העמודות של $\hat{U}$ תהיינה הו"ע ואיברי האלכסון של $\hat{\Theta}$ יהוו הע"ע.

אחת הדרכים (הפחות יעילות) למציאת ע"ע וו"ע היא ע"י איפוס הדטרמיננטה הסקולרית. קיימות דרכים רבות לליכסון מלא וחלקי של מטריצה. הפרטים של שיטות אלו הינן מעבר לחומר הנלמד בקורס זה ואנו נשתמש בהן כ"קופסא שחורה" לצורך ביצוע חישובים.

ג. פונקציות אורתונורמליות, אופרטורים ופונקציות עצמיות.

נקשר כעת בין הדברים שלמדנו עבור וקטורים בעלי מימד שלם N לבין פונקציות רציפות.

ידוע מתורת טורי פוריה כי כל פונקציה שמתנהגת היטב (רציפה, נגזרותיה רציפות, ...) ניתנת להצגה במקטע מסויים כצירוף לינארי אינסופי של פונקציות סינוס וקוסינוס עם מקדמים שנקבעים בהתאם לפונקציה. דבר דומה מתקיים עבור פיתוחי טיילור ומקלורן. עובדה זו מזכירה את הרעיונות שדנו בהם ~~לפיתוח וקטור~~ באשר להצגת וקטור באמצעות וקטורי בסיס.

נתייחס לסט אינסופי של פונקציות $\{\psi_i(x);\ i=1,2,\dots\}$ המקיימים את תנאי האורתונורמליות הבאים:

$$\int_{x_1}^{x_2} dx\, \psi_i^*(x)\psi_j(x) = \delta_{ij} \qquad (72)$$

על פני האינטרוול $[x_1,x_2]$. מכאן והלאה נשמיט את גבולות האינטגרציה.

נניח כי כל פונקציה $a(x)$ ניתנת להצגה כקומבינציה לינארית של הפונקציות $\{\psi_i(x)\}$: ל- $a(x)$ אותם תנאי שפה כמו ל- $\psi_i(x)$.

$$a(x) = \sum_i \psi_i(x)\, a_i \qquad (73)$$

כלומר, אנו מניחים כי הבסיס $\{\psi_i(x)\}$ הוא שלם.

בהינתן פונקציה $a(x)$ ניתן לקבוע את המקדמים a_j בנוסחת (73) ע"י הכפלת משוואה (73) ב- $\psi_j^*(x)$ ולבצע אינטגרציה לפי x:

$$\int dx\, \psi_j^*(x)a(x) = \sum_i a_i \underbrace{\int dx\, \psi_j^*(x)\psi_i(x)}_{\delta_{ij}\ (72)} = \sum_i a_i\delta_{ij} = a_j \qquad (74)$$

ובהצבת מקדמים אלו במשוואה (73) נקבל:

$$a(x)=\sum_i \psi_i(x)\underbrace{\int dx'\psi_i^*(x')a(x')}_{a_i}=\int dx'\left[\sum_i \psi_i(x)\psi_i^*(x')\right]a(x') \qquad (75)$$

הגורם שבסוגריים המרובעים הוא פונקציה של x ושל x' והוא בעל התכונה המיוחדת שכאשר הוא מוכפל ב-$a(x')$ ומבוצעת אינטגרציה על x' הוא נותן את $a(x)$. גורם בעל תכונות אלו נקרא <u>פונקצית הדלתא של דיראק</u>.

$$\sum_i \psi_i(x)\psi_i^*(x')=\delta(x-x') \qquad (76)$$

פונקצית הדלתא של דיראק היא ההכללה הרציפה של פונקצית הדלתא של קרוניקר δ_{ij}:

$$a_i=\sum_j \delta_{ij}a_j \longleftrightarrow a(x)=\int dx'\,\delta(x-x')a(x') \qquad (77)$$

בנוסף כפי שמתקיים $\delta_{ij}=\delta_{ji}$ מתקיים גם

$$\delta(x-x')=\delta(x'-x) \qquad (78)$$

אם נציב $x=0$ נקבל מתוך משוואה (75) כי:

$$a(0)=\int dx'\,\delta(x')a(x') \qquad (79)$$

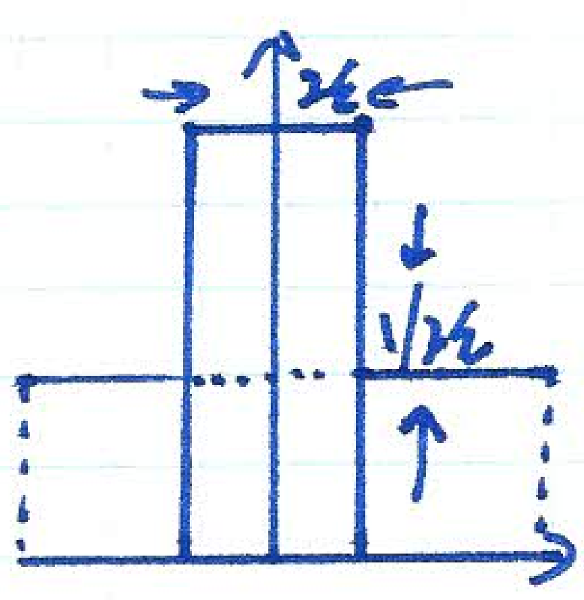
כיוון שמשוואה זו נכונה לכל פונקציה $a(x)$ נבחר $a(x')=1$ ונקבל:

$$1=\int dx'\,\delta(x') \qquad (80)$$

כאשר האינטגרציה כוללת את $x=0$. משוואה (80) מראה כי השטח של $\delta(x)$ הוא יחידה. כאשר הוא מוכפלת בפונקציה $a(x)$ ומבוצעת אינטגרציה על כל המרחב הוא שולה את ערך הפונקציה $a(x)$ ב-$x=0$. ניתן לחשוב על הפונקציה הזו כגבול של פס׳ רבועים שרוחבם קטן והולך תוך שמירה על שטח יחידה.

$$\delta(x)=\lim_{\varepsilon\to 0}\delta_\varepsilon(x)$$

$$\delta_\varepsilon(x)=\begin{cases}\frac{1}{2\varepsilon} & -\varepsilon\le x\le \varepsilon\\ 0 & \text{אחרת}\end{cases} \qquad (81)$$



הפיתוח עד כה דומה מאוד לזה שבוצע עבור וקטורים N ממדיים.
למעשה, ניתן להתייחס לתורת הפונקציות האורתונורמליות השלמות כהכללה של אלגברה לינארית N ממדית.

במקרה הבדיד התבוננו על הבסיס השלם $\{|i\rangle\}$ שמקיים יחס השלמות

$$\sum_i |i\rangle\langle i| = \hat{1} \quad ; \quad \langle i|j\rangle = \delta_{ij} \qquad (82)$$

נתבונן כעת על <u>בסיס אורתונורמלי רציף ושלם</u> של וקטורים שנסמנם $|x\rangle$. האנלוג של משוואה (82) למקרה הרציף הוא:

$$\int dx\, |x\rangle\langle x| = 1 \qquad (83)$$

כלומר הסכום הוחלף באינטגרל רציף.

ניתן כעת לעבור מהבסיס הבדיד $\{|i\rangle\}$ לבסיס הרציף $\{|x\rangle\}$ בעזרת אופרטור היחידה.

$$|i\rangle = \int dx\, |x\rangle\langle x|i\rangle \equiv \int dx\, |x\rangle\, \psi_i(x) \qquad (84)$$

כאשר הגדרנו:

$$\psi_i(x) \equiv \langle x|i\rangle \qquad (85)$$

שהוא ה"היטל" של המצב האבסטרקטי $|i\rangle$ על המרחב הממשי X.
המכפלה הסקלרית כעת ניתנת ע"י:

$$\delta_{ij} = \langle i|j\rangle \overset{(83)}{=} \int \langle i|x\rangle\langle x|j\rangle\, dx = \int \psi_i^*(x)\psi_j(x)\, dx \qquad (86)$$

משוואה זו משחזרת את משוואה (72) שרשמנו למעלה.

מתוך משוואה (82) נקבל כי:

$$\langle x|x'\rangle = \langle x|\hat{1}|x'\rangle = \sum_i \langle x|i\rangle\langle i|x'\rangle \overset{(85)}{=} \sum_i \psi_i(x)\psi_i^*(x') \overset{(76)}{=} \delta(x-x')$$

כלומר:

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x') \qquad (87)$$

שהוא האנלוג הרציף של $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$.

אם נכפיל את משוואה (83) ב- $\langle x'|$ וב- $|i\rangle$ נקבל:

$$\int dx \langle x'|x\rangle\langle x|i\rangle = \langle x'|i\rangle \Rightarrow \int dx\, \delta(x-x')\,\psi_i(x) = \psi_i(x') \qquad (88)$$

משוואה זו זהה למשוואה (77) רק שהפיתוח קונסיסטנטי.

עבור האופרטור האבסטרקטי $\hat{O}$ אלמנטי המטריצה בבסיס הרציף הינם:

$$\langle x|\hat{O}|x'\rangle = \hat{O}(x,x') \qquad (89)$$

את פעולת האופרטור על וקטור אבסטרקטי (או) ניתן לכתוב ע"י:

$$|b\rangle = \hat{O}|a\rangle = \hat{O}\hat{1}|a\rangle = \int dx'\, \hat{O}|x'\rangle\langle x'|a\rangle$$

כעת נכפול ב- $\langle x|$ ונקבל:

$$b(x) = \langle x|b\rangle = \int dx' \langle x|\hat{O}|x'\rangle\langle x'|a\rangle = \int dx'\, \hat{O}(x,x')\, a(x') \qquad (90)$$

האופרטור $\hat{O}$ נקרא <u>לא-לוקאלי</u> שכן בכדי לקבל את b בנקודה x_0 יש לדעת את ערכי a בכל המרחב. אופרטורים לא-לוקליים מכונים לעיתים <u>אופרטורים אינטגרליים</u>.

משוואה (90) היא הכללה של הקשר $b_i = \sum_j O_{ij} a_j$ כלומר $\hat{O}(x,x')$ היא <u>מטריצה רציפה</u>.

האופרטור $\hat{O}$ נקרא <u>לוקאלי</u> אם ניתן לקבל את b בנקודת x_0 מתוך מידע על a בסביבה אינפיניטסימלית של x_0. דוגמא לכך הוא אופרטור הנגזרת.

הקשר בין אלמנטי המטריצה בשני הבסיסים נתון ע"י:

$$\hat{O}(x,x') = \langle x|\hat{O}|x'\rangle = \sum_{i,j} \langle x|i\rangle\langle i|\hat{O}|j\rangle\langle j|x'\rangle =$$
$$= \sum_{i,j} \psi_i(x)\, \hat{O}_{ij}\, \psi_j^*(x') \qquad (91)$$

$$\hat{O}_{ij} = \langle i|\hat{O}|j\rangle = \int dx \int dx' \langle i|x\rangle\langle x|\hat{O}|x'\rangle\langle x'|j\rangle =$$
$$= \int dx \int dx'\, \psi_i^*(x)\, \hat{O}(x,x')\, \psi_j(x') \qquad (92)$$

נתבונן בבעיית הערך העצמי:

$$\hat{O}|\alpha\rangle = \omega_\alpha|\alpha\rangle$$

ונתרגמה למרחב הרציף ע"י יחס השלמות:

$$\hat{O}\hat{1}|\alpha\rangle = \int dx'\, \hat{O}|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \omega_\alpha \int dx' |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \omega_\alpha \hat{1}|\alpha\rangle$$

נכפול ב- $\langle x|$ ונקבל:

$$\int dx' \langle x|\hat{O}|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \omega_\alpha \int dx' \langle x|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \omega_\alpha \int dx' \delta(x-x')\langle x'|\alpha\rangle$$

$$\Rightarrow \int dx' \hat{O}(x,x')\,\alpha(x') = \omega_\alpha\, \alpha(x) \qquad (93)$$

כעת עבור אופרטורים לוקאליים כדוגמת המילטוניאן (אוסצ. הרמוני) והפוטנציאל הקולומבי מתקיים:

$$\hat{O}(x,x') = \underbrace{\hat{O}(x,x)}_{\text{אלמנט אלכסוני.}}\delta(x-x') \equiv \hat{O}(x)\,\delta(x-x') \qquad (94)$$

נציב זאת במשוואה (93) ונקבל:

$$\hat{O}(x)\alpha(x) = \int dx' \hat{O}(x)\delta(x-x')\alpha(x') = \int dx' \hat{O}(x,x')\alpha(x') = \omega_\alpha \alpha(x)$$

כלומר:

$$\hat{O}(x)\,\alpha(x) = \omega_\alpha\, \alpha(x) \qquad (95)$$

כלומר קיבלנו משוואת ערך עצמי עבור אופרטורים לוקאליים.

נוכל לנרמל את הפונקציות העצמיות:

$$1 = \langle\alpha|\alpha\rangle = \int dx \langle\alpha|x\rangle\langle x|\alpha\rangle = \int dx\, \psi_\alpha^*(x)\psi_\alpha(x)$$

את הע"ע במרחב הממשי נוכל לקבל ע"י:

$$\omega_\alpha = \langle\alpha|\hat{O}|\alpha\rangle = \int dx \int dx' \langle\alpha|x\rangle\langle x|\hat{O}|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle =$$

$$= \int dx \int dx'\, \psi_\alpha^*(x)\,\hat{O}(x,x')\,\psi_\alpha(x') =$$

local operators

ועבור אופרטורים לוקאליים מתקיים

$$= \int dx \int dx'\, \psi_\alpha^*(x)\,\hat{O}(x)\,\delta(x-x')\,\psi_\alpha(x') =$$

$$= \int dx\, \psi_\alpha^*(x)\,\hat{O}(x)\,\psi_\alpha(x)$$

כלומר עבור אופרטורים לוקאליים מתקיים:

$$\omega_\alpha = \langle\alpha|\hat{O}|\alpha\rangle = \int dx\, \psi_\alpha^*(x)\,\hat{O}(x)\,\psi_\alpha(x) \qquad (96)$$

ובאופן כללי:

$$\langle a|\hat{O}|b\rangle = \int \psi_a^*(x)\,\hat{O}\,\psi_b(x)\,dx \qquad (97)$$

באופן דומה ניתן להראות כי עבור אופרטורים הרמיטיים מתקיים:

$$\langle a|\hat{O}|b\rangle \underset{\hat{O}=\hat{O}^\dagger}{=} \langle b|\hat{O}|a\rangle^* \Leftrightarrow \int dx\, a^*(x)\,\hat{O}\,b(x) = \int dx\, b(x)\,[\hat{O}a(x)]^* = \left[\int dx\, b^*(x)\,\hat{O}\,a(x)\right]^*$$

אופרטורים הרמיטיים.