

فضاهای برداری و ریاضیات مکانیک کوانتومی

معمارسازی گرام-اشمیت

حسین شناور

گروه فیزیک، دانشکده علوم



دانشگاه هرمزگان

- خواهشمندم هرگونه اشتباه نوشتاری، مفهومی و یا محاسباتی را به آدرس ایمیل من ارسال کنید تا در ویرایش های بعدی تصحیحات لازم اعمال شوند:

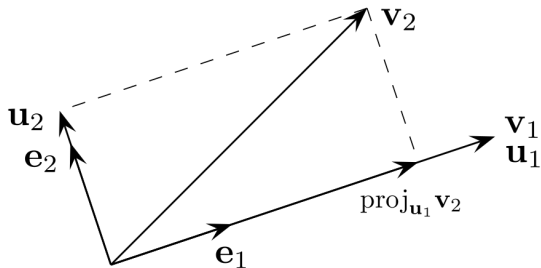
h.shenavar@gmail.com

- از همکاران و دانشجویان محترم در دانشگاه هرمزگان، برای همفکری ها، حمایت ها و گوشزد نمودن نکات مفید سپاسگزارم.
- برای ضبط این درس ها از نرم افزار Camtasia استفاده شده است.

- ۱ متعامدسازی گرام-اشمیت
- متعامدسازی گرام-اشمیت
- مثال هایی از روش متعامدسازی گرام-اشمیت

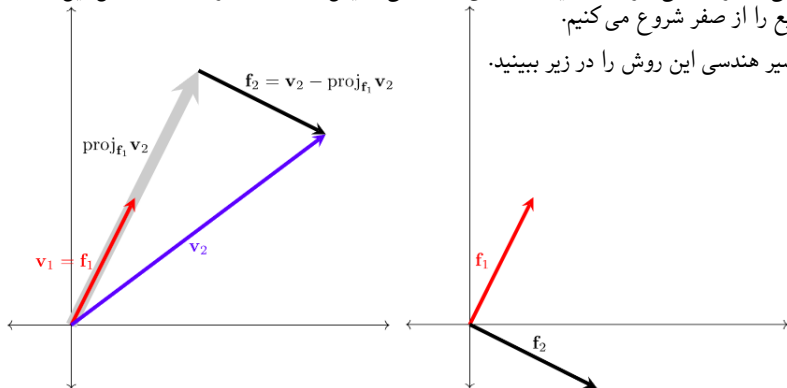
متعامدسازی پایه های فضا در مکانیک کوانتومی

- در مکانیک کوانتومی، حالت یک سیستم بر روی فضای هیلبرت تعریف می شود. برای کار با این فضا، معمولاً نیاز داریم مجموعه ای از بردارهای یکامتعامد (Orthonormal) داشته باشیم. در ادامه از یک مجموعه از بردارها که نه متعامد و نه بهنجارند (ولی مستقل خطی اند) استفاده کرده و یک سیستم پایه های یکامتعامد را خواهیم ساخت. روش توصیف شده در اینجا را روش متعامد سازی گرام-اشمیت (Gram – Schmidt orthogonalization) می نامند.
- در این روش، مجموعه ای از توابع χ_μ و یک تعریف مناسب ضرب داخلی $\langle f | g \rangle$ را فرض کرده و به صورت متوالی (سیستماتیک) بردارهای یکامتعامد φ_ν را از آنها خواهیم ساخت.



متعامدسازی گرام-اشمیت

- توصیف روش: بردار یک φ را از بردار غیر یک χ می سازیم. هیچ فرقی نمی کند که از کدام بردار χ_μ شروع کنیم! سپس بردار یک φ_1 را از بردارهای غیر یک χ و χ_1 می سازیم به صورتی که بر φ عمود باشد. به همین صورت این روش را ادامه می دهیم تا کل فضا پوشش داده شود.
- یک نکته درباره نمادگذاری: روش متعامد سازی گرام-اشمیت در موارد متعددی بر اساس توابع توانی x^i نوشته می شود. در نتیجه، و برای هماهنگی اندیس شمارنده با توان، ما شمارش این توابع را از صفر شروع می کنیم.
- تفسیر هندسی این روش را در زیر ببینید.



جزئیات روش معامدسازی گرام-اشمیت

- ۱- بردار φ_0 را از بردار غیر یکه χ_0 می سازیم. برای اینکار بردار χ_0 را بر اندازه اش تقسیم می کنیم:

$$\varphi_0 = \frac{\chi_0}{\langle \chi_0 | \chi_0 \rangle^{1/2}}$$

بهنجار بودن (نرمال و یا یکه بودن) این بردار را می توان به راحتی نشان داد:

$$\langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle = \left\langle \frac{\chi_0}{\langle \chi_0 | \chi_0 \rangle^{1/2}} \left| \frac{\chi_0}{\langle \chi_0 | \chi_0 \rangle^{1/2}} \right. \right\rangle = 1$$

- ۲- حالا بردار یکه φ_1 را از بردارهای φ_0 و χ_1 می سازیم به صورتی که بر φ_0 عمود باشد. ما از φ_0 به جای χ_0 استفاده می کنیم تا مراحل بعدی آسانتر شوند (یعنی فرمول بهتری پیدا شود). بنابراین می نویسیم:

$$\psi_1 = \chi_1 - a_{1,0} \varphi_0$$

کاری که در اینجا انجام داده ایم این است که تصویر بردار χ_1 در جهت φ_0 را تفریق کرده ایم. در نتیجه، بردار حاصل باید بر φ_0 عمود باشد. توجه کنید که

$$a_{1,0} = \langle \varphi_0 | \chi_1 \rangle$$

و بنابراین ψ_1 بر بردار φ_0 عمود است.

$$\langle \varphi_0 | \psi_1 \rangle = \left\langle \varphi_0 \left| \left(\chi_1 - a_{1,0} \varphi_0 \right) \right. \right\rangle = \langle \varphi_0 | \chi_1 \rangle - a_{1,0} \langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle = 0$$

جزئیات روش متعامدسازی گرام-اشمیت

البته بردار ψ_1 باید بهنجار شود. در نتیجه داریم:

$$\varphi_1 = \frac{\psi_1}{\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle^{1/2}}$$

۳- در ادامه، بردار یکه φ_2 را به کمک بردارهای φ_0 و φ_1 و χ_2 می سازیم به صورتی که بر φ_0 و φ_1 عمود باشد.

$$\psi_2 = \chi_2 - a_{0,2}\varphi_0 - a_{1,2}\varphi_1$$

دو جمله آخر در رابطه بالا تصویر بردار χ_2 در جهت های φ_0 و φ_1 هستند. ضرایب بسط نیز از روابط زیر به دست می آیند:

$$a_{0,2} = \langle \varphi_0 | \chi_2 \rangle, \quad a_{1,2} = \langle \varphi_1 | \chi_2 \rangle$$

حال بردار ψ_2 را بهنجار می کنیم:

$$\varphi_2 = \psi_2 / \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle^{1/2}$$

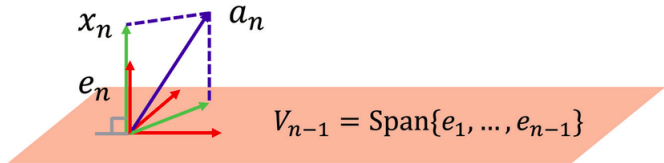
۴- با تعمیم این روش به راحتی می توان نوشت:

$$\psi_n = \chi_n - \sum_{\mu=0}^{n-1} \langle \varphi_\mu | \chi_n \rangle \varphi_\mu$$

$$\varphi_n = \frac{\psi_n}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle^{1/2}}.$$

متعامدسازی گرام-اشمیت

- دقت کنید که ما از یک بردار اولیه خاص x_0 شروع کرده و کار را با x_1 و x_2 و ... ادامه دادیم. اگر با بردار دیگری شروع می کردیم، طبیعتاً پایه های متفاوتی می یافتیم. هرچند، همه این نمایش های متفاوت از پایه های فضا با هم هم ارز هستند.



$$\boxed{x_n} = \boxed{a_n} - \sum_{k=1}^{n-1} (a_n, e_k) e_k \quad \boxed{e_n} = \frac{x_n}{||x_n||}$$

متعامدسازی توابع خاص

• می خواهیم دسته بسیار مهمی از توابع خاص (به نام چندجمله ای های لژاندر) را در نظر گرفته و با استفاده از روش گرام-اشمیت یک مجموعه یکامتعامد از آنها بسازیم.

• به جای حرف x_μ برای توابع پایه از نماد ψ_μ استفاده می کنیم و این توابع را به عنوان توابع توانی x^μ در نظر می گیریم. همچنین، برای تعریف ضرب داخلی دو تابع، تابع وزنی واحد را فرض می کنیم:

$$\langle f | g \rangle = \int_{-1}^1 f^*(x) g(x) dx$$

به علاوه دقت کنید که در اینجا همه توابع و کمیت ها حقیقی اند؛ بنابراین لازم نیست مزدوج مختلط را محاسبه کنیم.

• اولین تابع یکامتعامد به راحتی از تابع $x^0 = 1$ ساخته می شود:

$$\varphi_0(x) = \frac{1}{\langle 1 | 1 \rangle^{1/2}} = \frac{1}{\left[\int_{-1}^1 dx \right]^{1/2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

تمرین: حالا شما ψ_1 و سپس φ_1 را بیابید.

یکامتعامدسازی چندجمله ای های لژاندر

تمرین: حالا شما ψ_1 و سپس φ_1 را بیابید.

پاسخ: در ابتدا ψ_1 را می سازیم:

$$\psi_1(x) = x - \langle \varphi_0 | x \rangle \varphi_0(x) = x$$

ضرب داخلی $\langle \varphi_0 | x \rangle$ صفر می شود زیرا تابع φ_0 زوج و تابع x فرد است و بازه انتگرال گیری متقارن است. حال با استفاده از ψ_1 می توان φ_1 را ساخت:

$$\varphi_1(x) = \frac{x}{\left[\int_{-1}^1 x^2 dx \right]^{1/2}} = \sqrt{\frac{3}{2}} x$$

در مرحله بعد ψ_2 را تشکیل می دهیم:

$$\psi_2(x) = x^2 - \langle \varphi_0 | x^2 \rangle \varphi_0(x) - \langle \varphi_1 | x^2 \rangle \varphi_1(x) = x^2 - \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \middle| x^2 \right\rangle \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) = x^2 - \frac{1}{3}$$

$$\left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \middle| x^2 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{\sqrt{2}}{3} \quad \text{همچنین بنا به تقارن صفر است.}$$

$$\varphi_2(x) = \frac{x^2 - \frac{1}{3}}{\left[\int_{-1}^1 \left(x^2 - \frac{1}{3}\right)^2 dx \right]^{1/2}} = \sqrt{\frac{5}{2}} \left(\frac{3}{2} x^2 - \frac{1}{2} \right)$$

بنابراین می توان نوشت:

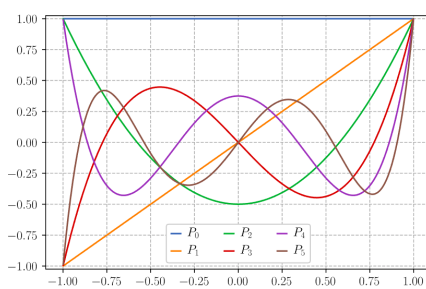
یکامتعامدسازی چندجمله ای های لژاندر

- تمرین: این محاسبات را یک گام دیگر جلو برده و نشان دهید:

$$\varphi_3(x) = \sqrt{\frac{7}{2}} \left(\frac{5}{2} x^3 - \frac{3}{2} x \right)$$

- روش بالا یک روش سرراست، ولی طولانی، برای تولید و بهنجارسازی چندجمله ای های لژاندر به دست می دهد.

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2n+1}{2}} P_n(x)$$



n	$P_n(x)$
0	1
1	x
2	$\frac{1}{2} (3x^2 - 1)$
3	$\frac{1}{2} (5x^3 - 3x)$
4	$\frac{1}{8} (35x^4 - 30x^2 + 3)$
5	$\frac{1}{8} (63x^5 - 70x^3 + 15x)$
6	$\frac{1}{16} (231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5)$
7	$\frac{1}{16} (429x^7 - 693x^5 + 315x^3 - 35x)$
8	$\frac{1}{128} (6435x^8 - 12012x^6 + 6930x^4 - 1260x^2 + 35)$
9	$\frac{1}{128} (12155x^9 - 25740x^7 + 18018x^5 - 4620x^3 + 315x)$
10	$\frac{1}{256} (46189x^{10} - 109395x^8 + 90090x^6 - 30030x^4 + 3465x^2 - 63)$

تولید توابع یکامتعامد دیگر

برای تولید چندجمله ای های لژاندر در بالا ما از متعامدسازی گرام-اشمیت، توان های متوالی x^n و تعریف مشخصی از ضرب داخلی توابع استفاده کردیم. البته این توابع به صورت یکتا به دست نمی آیند و ممکن است در یک ضریب و یا علامت متفاوت باشند.

با استفاده از تعاریف متفاوت

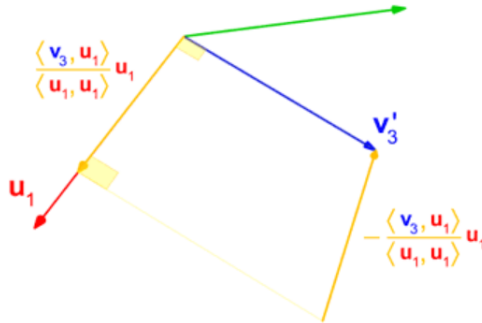
ضرب داخلی می توان مجموعه های یکامتعامد دیگری نیز ساخت. جدول مقابل را

ببینید.

Polynomials	Scalar Products	Table
Legendre	$\int_{-1}^1 P_n(x) P_m(x) dx = 2\delta_{mn} / (2n + 1)$	Table 15.1
Shifted Legendre	$\int_0^1 P_n^*(x) P_m^*(x) dx = \delta_{mn} / (2n + 1)$	Table 15.2
Chebyshev I	$\int_{-1}^1 T_n(x) T_m(x) (1 - x^2)^{-1/2} dx = \delta_{mn} \pi / (2 - \delta_{n0})$	Table 18.4
Shifted Chebyshev I	$\int_0^1 T_n^*(x) T_m^*(x) [x(1 - x)]^{-1/2} dx = \delta_{mn} \pi / (2 - \delta_{n0})$	Table 18.5
Chebyshev II	$\int_{-1}^1 U_n(x) U_m(x) (1 - x^2)^{1/2} dx = \delta_{mn} \pi / 2$	Table 18.4
Laguerre	$\int_0^\infty L_n(x) L_m(x) e^{-x} dx = \delta_{mn}$	Table 18.2
Associated Laguerre	$\int_0^\infty L_n^k(x) L_m^k(x) e^{-x} dx = \delta_{mn} (n + k)! / n!$	Table 18.3
Hermite	$\int_{-\infty}^\infty H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} dx = 2^n \delta_{mn} \pi^{1/2} n!$	Table 18.1

متعامدسازی گرام-اشمیت در بردارها

- می توان از روش متعامدسازی گرام-اشمیت برای متعامدسازی فضای بردارهای معمول هم استفاده کرد. در این مورد فقط کافی است که فرض کنیم ضرب داخلی همان ضرب داخلی معمول بین بردارهاست.
- به انیمیشن زیر دقت کنید که روش متعامدسازی گرام-اشمیت را به صورت شهودی نمایش می دهد.



متعامدسازی گرام-اشمیت در بردارها

مثال: فرض کنید که یک منیفلد دو بعدی در یک فضای سه بعدی توسط دو بردار $\mathbf{a}_1 = \hat{e}_1 + \hat{e}_2 - 2\hat{e}_3$ و $\mathbf{a}_2 = \hat{e}_1 + 2\hat{e}_2 - 3\hat{e}_3$ معرفی شده است. در نمادگذاری براکت دیراک این دو بردار را می توان به صورت زیر نوشت:

$$|\mathbf{a}_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix}, \quad |\mathbf{a}_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -3 \end{pmatrix}$$

می خواهیم دو پایه یکامتعامد در فضای دوبعدی یاد شده را بیابیم. بردار یکامتعامد اول را به راحتی در جهت $\mathbf{a}_1$ فرض می کنیم.

$$|\mathbf{b}_1\rangle = \frac{\mathbf{a}_1}{\langle \mathbf{a}_1 | \mathbf{a}_1 \rangle^{1/2}} = \frac{1}{6^{1/2}} |\mathbf{a}_1\rangle = \frac{1}{6^{1/2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix}$$

بردار عمود بر بردار بالا به راحتی به صورت زیر به دست می آید:

$$|\mathbf{b}'_2\rangle = |\mathbf{a}_2\rangle - \langle \mathbf{b}_1 | \mathbf{a}_2 \rangle |\mathbf{b}_1\rangle = |\mathbf{a}_2\rangle - \frac{9}{6^{1/2}} |\mathbf{b}_1\rangle = \begin{pmatrix} -1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

بردار اخیر بهنجار نیست، ولی به راحتی بهنجار می شود:

$$|\mathbf{b}_2\rangle = \frac{\mathbf{b}'_2}{\langle \mathbf{b}'_2 | \mathbf{b}'_2 \rangle^{1/2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

نکات مهم این درس

انتظار این است که در انتهای این درس شما بتوانید روش متعامدسازی گرام-اشمیت و مهم ترین نتایج و کاربرد آنها را به درستی توضیح دهید. به ویژه انتظار می رود که بتوانید پرسش های زیر را پاسخ دهید:

۱. روش متعامدسازی گرام-اشمیت برای بردارها را توضیح دهید.
۲. روش متعامدسازی گرام-اشمیت برای توابع را توضیح دهید.
۳. روش متعامدسازی گرام-اشمیت برای بردارها را به صورت تصویری توضیح دهید.
۴. اهمیت تعریف ضرب داخلی در تعیین توابع پایه چیست؟

اگر درباره هرکدام از مفاهیم یاد شده بالا مشکلی احساس می کنید، لطفا درس را یک بار دیگر مرور کنید.

فراموش نکنیم که بهترین راه برای درک و ”درونی سازی“ مفاهیم ریاضی و فیزیک، حل مساله است. به همین دلیل سعی کنید دانسته های خود را با حل سوالات محک زده و تقویت کنید. این مساله ها در انتهای هر درس ارائه می شوند.



تمرین

- مسائل بخش دوم از فصل پنجم کتاب آرفکن و همکاران (ویرایش هفتم) را حل کنید.

مبحث بعدی: عملگرها در فضای توابع

- در جلسه بعد با مفهوم عملگرها در فضای توابع آشنا خواهیم شد.

$f(x)$	Any function of position, such as x , or potential $V(x)$	$f(x)$
p_x	x component of momentum (y and z same form)	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$
E	Hamiltonian (time independent)	$\frac{p_{op}^2}{2m} + V(x)$
E	Hamiltonian (time dependent)	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
KE	Kinetic energy	$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$
L_z	z component of angular momentum	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$

منابع

- ❶ Mathematical Methods for Physicists: A Comprehensive Guide (7th Edition) by George B. Arfken, Hans J. Weber, Frank E. Harris, Academic Press (2012)
- ❷ Mathematical Methods for Physicists (6th Edition) by George B. Arfken, Hans J. Weber, Academic Press (2012)
- ❸ Mathematical Methods for Physics and Engineering, 3rd Edition, by K. F. Riley, M. P. Hobson, S. J. Bence , Cambridge University Press (2006)
- ❹ Mathematical Physics: A Modern Introduction to Its Foundations, 2nd ed, by Sadri Hassani (2013)
- ❺ Methods of Theoretical Physics I, II, Morse, Philip M. and Feshbach, Herman, McGraw-Hill (1953)
- ❻ <https://math.libretexts.org/>
- ❼ <https://www.youtube.com/@eigenchris>

با سپاس از توجه شما

