

# Kémiai matematika

## 10. gyakorlat

### Kiegészítés

Busai Ágota  
agota.busai@gmail.com  
www.math.bme.hu/~bgotti

2016.11.24.

5. A  $\varphi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}$  és  $\varphi_2(x) = \sqrt{\frac{3}{2}}x$  függvények ortonormáltak  $L_2[-1, 1]$ -en.

(a) Bontsuk fel az  $f(x) = \sin(\pi x)$  függvényt  $\varphi_2$ -vel párhuzamos és merőleges komponensekre!

**HF** (b) Adjuk meg a  $\widehat{D} = \imath \frac{d}{dx}$  operátort ábrázoló mátrixot a  $\varphi_1(x), \varphi_2(x)$  bázisán! Mit tudunk a mellékát-  
lóbeli elemek viszonyáról?

**Állítás:** A  $\widehat{D} = \imath \frac{d}{dx}$  operátor általában nem hermitikus  $L_2[a, b]$ -n.

**Ugyanis:** Legyenek  $f(x), g(x) \in L_2[a, b]$  függvények, azaz  $\left( \int_a^b f^2(x) dx \right)^{\frac{1}{2}} < \infty$ .

$$\begin{aligned} \langle f(x) | \widehat{D}g(x) \rangle &= \int_a^b f^*(x) \widehat{D}g(x) dx = \int_a^b f^*(x) \imath g'(x) dx \stackrel{\uparrow}{=} \text{parc. int.} \\ &= \imath [f^*(x)g(x)]_a^b - \int_a^b \imath (f^*(x))' g(x) dx = \\ &= \imath [f^*(x)g(x)]_a^b + \int_a^b (\imath f'(x))^* g(x) dx = \\ &= \imath \underbrace{[f^*(x)g(x)]_a^b}_{\text{általában } \neq 0} + \langle \widehat{D}f(x) | g(x) \rangle. \end{aligned}$$