構造化学特論2016

理学部化学科　岡林潤
（スペクトル化学研究センター）
2017.2.25

【1】《Pauli 行列》
2 行 2 列の行列 I, σ_x, σ_y, σ_z を

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

と定義する。これらを Pauli 行列とよぶ。一般に、任意の 2 行 2 列の行列は、これらの Pauli 行列と単位行列 I の 1 次結合で表されることを示せ。

【2】《Pauli 行列》
任意の 3 次元ベクトル $\vec{a}$, $\vec{b}$ に対して、Pauli 行列を用いた以下の関係式が成り立つことを示せ。ただし、$\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ とする。

$$(\vec{\sigma}, \vec{a})(\vec{\sigma}, \vec{b}) = (\vec{a}, \vec{b})I + i(\vec{\sigma}, \vec{a}\times\vec{b})$$

【3】《Pauli 行列》
任意の 3 次元ベクトル $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$ に対して、以下を定義する。

$$\vec{v}\cdot\vec{\sigma} \ \equiv \ v_x\sigma_x + v_y\sigma_y + v_z\sigma_z = \begin{pmatrix} v_z & v_x - iv_y \\ v_z + iv_y & -v_z \end{pmatrix}$$

1. 半径 1 の単位球上の任意の点を表す 3 次元単位ベクトルを $\vec{e}$ とするとき、極座標 θ, ϕ を用いて $\vec{e}$ を表せ。θ, ϕ の定義域も示せ。
2. 2 行 2 列の行列 $A = \vec{e}\cdot\vec{\sigma}$ 　を θ, ϕ を用いて表せ。
3. 行列 A の固有値、固有ベクトルを求めよ。ただし、固有ベクトルは、$\theta = 0$ において $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ となるように決定せよ。

【4】《演算子の交換関係》
二つの演算子の交換関係を次のように定義する。$[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

1. 以下の関係を示せ。
   $[\hat{x}, \hat{p_x}] = [\hat{y}, \hat{p_y}] = [\hat{z}, \hat{p_z}] = i\hbar$
2. 中心力ポテンシャル中の粒子のハミルトニアン $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$ に対して、$[\hat{H}, L] = 0$ を示せ。そのために、$[\hat{p}^2, L] = 0$, $[V(r), L] = 0$ を示せ。
3. 角運動量演算子に対して、$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\hat{L}_k$, $[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$ を示せ。

【5】《角運動量の固有値》

角運動量の 2 乗の固有値を $L^2 = \hbar^2\lambda$ とすると、λ は以下の方程式を解いて得られる。

$$\left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \lambda \right\} Y(\theta, \phi) = 0$$

また、積 $u = r^l Y(\theta, \phi)$ を考えると、$\nabla^2 u = 0$ を満たすことが知られている。このことから λ のとりうる値を求めよ。
