

[化学物理 I (基礎)] (全 2 題)

[問題 1]

以下の文章を読み、下線部(1)-(6)を証明せよ。

行列要素の間に $A_{ik}^* = A_{ki}$ の関係がある行列 \mathbf{A} はエルミート行列とよばれる。

(1)エルミート行列 \mathbf{A} は、ユニタリー行列 \mathbf{U} を用いて、 $\mathbf{B}=\mathbf{U}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{U}$ の変換を行うと、行列 \mathbf{B} もエルミート行列になる。また、(2)エルミート行列 \mathbf{A} を用いてユニタリー行列を $\exp(i\mathbf{A})$ のように表現することができる。

エルミート行列は、ユニタリー変換により対角化することができるが、(3)そのときの固有値は実数となり、(4)異なる固有値に対する固有ベクトルは直交する。今、(5)2つのエルミート行列 \mathbf{A} 、 \mathbf{B} の間に $\mathbf{AB}-\mathbf{BA}=\mathbf{0}$ の関係があるとき、行列 \mathbf{A} 、 \mathbf{B} は同じ固有ベクトルをもつ。また、(6) $\mathbf{AB}-\mathbf{BA}=\mathbf{C}\neq\mathbf{0}$ の場合、行列 \mathbf{C} の固有値は虚数となる。