

以下の設問 1 から 3 に解答せよ。ただし、設問ごとに解答用紙を分けること。設問において、 $\hbar = 2\pi\hbar$  はプランク定数、 $m$  は電子の質量、 $e$  は素電荷、 $c$  は光速、 $\epsilon_0$  は真空の誘電率、 $i = \sqrt{-1}$  である。

1. (a) から (e) に示す量子力学に関する概念のうち、2 つ以上について 例を挙げて説明せよ。

- (a) 軌道・スピン角運動量
- (b) 演算子の交換関係
- (c) 平均場近似
- (d) 結晶場

2. 非摂動ハミルトニアン

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (1)$$

の固有状態として  $L^2, S^2, J^2, J_z$  をとることができるとする。ここで、 $L, S$  はそれぞれ軌道角運動量、スピン角運動量であり、 $J = L + S$ 、 $J_z$  は  $J$  の  $z$  成分である。スピン軌道相互作用による摂動ハミルトニアンを

$$H_{LS} = \lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (2)$$

としたとき、以下の問に答えよ。

- (a)  $J^2, J_z$  は  $H_{LS}$  の固有状態であることを示せ。
- (b)  $L \cdot S$  を固有状態の線形結合で表し（すなわちそれも固有状態）、摂動ハミルトニアンの行列要素  $\langle jls | L \cdot S | jls \rangle$  を求めよ。
- (c) 水素原子の  $n = 2, l = 1$  の状態を考えたとき、微細構造分裂 ( $j = 1/2$  と  $3/2$  のエネルギー差) を計算せよ。ただし、 $V(\mathbf{r})$  を中心力ポテンシャルとして、

$$\lambda = \frac{1}{2m^2 c^2 r} \frac{d}{dr} V(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m^2 c^2 r^3} \quad (3)$$

とおき、

$$R_{21}(r) = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{\sqrt{3}a_0}\right) e^{-r/2a_0} \quad (4)$$

を使用すること。なお、摂動  $H_{LS}$  によるエネルギー補正  $E_{LS}$  は、

$$E_{LS} = \langle jls | H_{LS} | jls \rangle = \int_0^\infty R_{nl}^*(r) \lambda R_{nl}(r) r^2 dr \quad (5)$$

より求めることができる。

3. 水素分子  $H_2$  を考える。

- (a) 水素分子が形成され、基底状態において 2 電子のスピンが反平行 (1 重項状態) になる理由を説明せよ (定性的で良い)。
- (b) 2 電子系の 1 重項状態 ( $S = 0$ )、3 重項状態 ( $S = 1$ ) のエネルギーをそれぞれ  $E_s, E_t$  においてスピンハミルトニアンを導き、ハイゼンベルグハミルトニアン  $H = -J\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2$  との関係を議論せよ。また、水素分子では  $S = 0$  が基底状態であることから、 $J < 0$  であることを示せ。