

8月4日までに提出の場合は、試験結果への加点として評価する（前半部演習問題も含む）。

提出先: akeya@kuee.kyoto-u.ac.jp

1. 運動量 \mathbf{p} とベクトルポテンシャル \mathbf{A} に関する正準交換関係 $[\mathbf{p}, \mathbf{A}(\mathbf{r})] = -i\hbar\nabla\mathbf{A}$ を証明せよ。
2. 2次元ポテンシャル

$$U_0(x, y) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x, y \leq L) \\ +\infty & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad (1)$$

の中の粒子を考える。このとき、Schrödinger 方程式は以下のように表される。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} \right\} + U_0(x, y) \right] \psi(x, y) = E\psi(x, y) \quad (2)$$

- (a) 基底状態および第1励起状態の規格化された固有関数を示せ。ヒント：1次元での同様の問題については、境界条件から $\psi_n(x) \propto \sin(n\pi x/L)$ と置ける。
- (b) ここで、

$$U_1(x, y) = \begin{cases} \lambda xy & (0 \leq x, y \leq L) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad (3)$$

の時間に依らない摂動を加えたときの基底状態に対する1次のエネルギー変化を求めよ。

- (c) 非摂動状態で2重に縮退した第1励起状態は、摂動 $U_1(x, y)$ により縮退が解ける。縮退した第1励起状態に関する 2×2 摂動行列の各成分を求めよ。
3. 水素様原子における電子軌道（前半部演習式(1)の解）では、 $n=2$ の状態は4重に縮退している。一様な電場を z 方向に加えたときのエネルギーの変化（シュタルク効果）を1次の摂動で求めよ。なお、このとき l, m の変化がそれぞれ $\pm 1, 0$ の時だけ行列要素が有限になることを利用して良い（選択則）。
 4. 磁束密度 B を与える一様磁場中にある水素様原子における電子について考える。このとき、スピン軌道相互作用 $\lambda \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ とゼーマン効果 $\mu_B(\mathbf{L} + g\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B}$ を水素様原子ハミルトニアン H_0 の摂動として取り扱い、以下に解答せよ。ここで、 \mathbf{S}, \mathbf{L} はそれぞれスピン角運動量、軌道角運動量であり、 λ, μ_B, g はそれぞれスピン軌道相互作用係数、ボア磁子、電子の g 因子である。
 - (a) 電子がスピンによる磁気モーメントを有しているとして、スピン軌道相互作用の起源について簡潔に説明せよ。
 - (b) 磁場中の自由電子のエネルギー準位について、量子論の観点から説明せよ。
 - (c) ナトリウム (Na) 原子における電子の $3s$ および $3p$ 軌道のエネルギー準位の磁場依存性の概形を図示し、説明せよ。また、エネルギーの原点、磁場のスケールは任意に取るものとする。
 5. 電子数 N 、核の電荷が Ze である原子を記述するハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i>j}^N \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (4)$$

と表すことができる。ここで、 Δ_i は電子 i に関するラプラシアン、 r_i は原子核から電子 i までの座標、 r_{ij} は電子 i と j の間の距離である。このような電子の多体問題を解く際に用いられる近似法についてその原理と性質を説明せよ。

6. 水素分子イオン H_2^+ を考える。

- (a) 分子に属する電子についてのハミルトニアンを与えよ。
- (b) 水素分子イオンが分子を形成する（結合状態が孤立状態よりエネルギーが低い）理由を説明せよ。

7. 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。
- (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 $\mathcal{H} = -J\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2$ 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。

8. Landé の g 因子

$$g_L = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \quad (5)$$

を導け。

9. 体積 V で N 個の磁性イオン（スピン J ）を含む系において高温・低磁場で磁化率 $\chi = \partial M / \partial B$ が以下のようになることを示せ。

$$\chi = \frac{N (g\mu_B)^2 J(J+1)}{V 3k_B T}. \quad (6)$$

ここで、 g, μ_B はそれぞれイオンの g 因子、ボーア磁子である（Curie の法則）。

10. 結晶中において、陰イオンが 8 面体配位された Mn^{2+} イオンおよび Cu^{2+} イオンの電子状態を考える。なお、Mn, Cu の原子番号はそれぞれ 25, 29 である。

- (a) 陰イオンが正 8 面体配位された結晶場ポテンシャルによる d 軌道のエネルギー分裂について説明せよ。
- (b) 立方晶から対称性を低くした正方晶および斜方晶結晶場における d 軌道エネルギー分裂と Mn^{2+} イオンおよび Cu^{2+} イオンの電子状態を考え、それぞれのイオンを含む物質の磁性について議論せよ。また、低温で結晶構造の対称性が低くなる構造相転移（Jahn-Teller 効果）が起きやすいのは、どちらのイオンの場合か、理由と共に答えよ。

以上