

量子論電子工学 2012 年後半部 (掛谷担当) 演習問題

2012/07/10

8月3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: kakeya@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. 一様磁場中の電子のエネルギーについて、ゼーマン効果がスピン軌道相互作用に対して比較的小さい場合について議論せよ。

3. Landé の g 因子

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

を示せ。

4. 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

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

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。

5. 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。

6. 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 と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 $\mathcal{H} = -J\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2$ との関係性を議論せよ。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。

7. 陰イオンが8面体配位された結晶場中の Cu^{2+} イオンおよび Ni^{2+} イオンの電子状態について議論せよ。

以上