

[問題] 水素分子の基底状態は、電子間相互作用が原子間移動積分に比べて十分大きければ ($U \gg t$) Heitler-London 法が、十分小さければ ($U \ll t$) 分子軌道法が適切である。それぞれの場合のスペクトル関数 $A(\epsilon)$ を求め、それらの間の関係を論ぜよ。消滅演算子は、 $a_{1,\uparrow}^\dagger$ (水素原子 1 上の上向きスピン電子を消すもの) を用いよ。ここで、 U は原子内クーロン積分、 t は原子間移動積分で、水素原子 $1s$ 軌道エネルギーを ϵ_s とする。Heitler-London 法での波動関数は、

$$\Psi_{2,g} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{1,\uparrow}^\dagger a_{2,\downarrow}^\dagger - a_{1,\downarrow}^\dagger a_{2,\uparrow}^\dagger)|0\rangle$$

で、分子軌道法での波動関数は、

$$\Psi_{2,g} = \frac{1}{2}(a_{1,\uparrow}^\dagger + a_{2,\uparrow}^\dagger)(a_{1,\downarrow}^\dagger + a_{2,\downarrow}^\dagger)|0\rangle$$

で与えられることを用いよ。基底状態を分子軌道法で扱うときは、 $U = 0$ としてよい。

(ヒント) $\sigma = \uparrow, \downarrow$ とすると、1 電子状態の固有状態は、

$$\Psi_{1,\pm,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{1,\sigma}^\dagger \pm a_{2,\sigma}^\dagger)|0\rangle$$

で、3 電子状態の固有状態は、

$$\Psi_{3,+,\sigma} = \frac{1}{2\sqrt{2}}(a_{1,\sigma}^\dagger - a_{2,\sigma}^\dagger)(a_{1,\uparrow}^\dagger + a_{2,\uparrow}^\dagger)(a_{1,\downarrow}^\dagger + a_{2,\downarrow}^\dagger)|0\rangle$$

$$\Psi_{3,-,\sigma} = \frac{1}{2\sqrt{2}}(a_{1,\uparrow}^\dagger - a_{2,\uparrow}^\dagger)(a_{1,\downarrow}^\dagger - a_{2,\downarrow}^\dagger)(a_{1,\sigma}^\dagger + a_{2,\sigma}^\dagger)|0\rangle$$

与えられる。

提出は、PDF 等の電子ファイルで、藤森 (fujimori@phys.s.u-tokyo.ac.jp) に ~~11~~ 月 ~~30~~ 日 (丹) までに送って下さい。

1 末