物質科学基礎 期末試験問題 解答

[問題 1]

1.

$$|\psi_{a\downarrow}\psi_{b\uparrow}| = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{a\downarrow}(\tau_1)\psi_{b\downarrow}(\tau_2) - \psi_{b\uparrow}(\tau_1)\psi_{a\uparrow}(\tau_2)]$$

等を用いて、

$$\int d\tau_1 d\tau_2 |\psi_{a\uparrow}\psi_{b\downarrow}| \frac{e^2}{r_{12}} |\psi_{a\downarrow}\psi_{b\uparrow}| = \frac{1}{2}[-\langle ab||ba\rangle - \langle ba||ab\rangle] = -j$$

2. 次の 2 つに分裂する。

準位	エネルギー	$\mathbf{S}^2$ の固有値	縮退度
IIa	$2\varepsilon_0 + u' + j$	0	10
IIb	$2\varepsilon_0 + u' - j$	2	10（I と併せて 30）

[問題 2]

1. $a_k = 0, \pm1, \pm2, \pm3, ..., \pm I$。最高占有軌道は、実数化した時に最も節の多い $a_k = \pm I$。

2. $a_k = \pm(I+1)$

3. エネルギーの原点を X とすると、

$$H_{\mathrm{HF}} = \begin{pmatrix} X & t & 0 & .. & 0 & 0 & t \\ t & X & t & .. & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t & X & .. & 0 & 0 & 0 \\ : & : & : & & : & : & : \\ 0 & 0 & 0 & .. & X & t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & .. & t & X & t \\ t & 0 & 0 & .. & 0 & t & X \end{pmatrix}$$

4. Hartree-Fock 方程式のエネルギー固有値 ε、$a_k = I$ とすると、

$$(H_{\mathrm{HF}} - \varepsilon I)\begin{pmatrix} 1 \\ e^{\frac{2\pi i I}{N}} \\ e^{\frac{4\pi i I}{N}} \\ e^{\frac{3\pi i I}{N}} \\ : \\ : \end{pmatrix} = 0$$

（I：単位行列）より、

$$\varepsilon - X + t(e^{\frac{2\pi i I}{N}} + e^{-\frac{2\pi i I}{N}}) = 0$$

よって

$$\varepsilon = X + 2t\cos\left(\frac{2\pi I}{N}\right)$$