

量子力学 III, 物質設計学 I レポート課題 I 解答例

p.8 二粒子フェルミオンのスレーター行列式

$$\begin{aligned}
 & \int d\xi_1 \int d\xi_2 \Phi_{m_1, m_2}^*(\xi_1, \xi_2) \Phi_{n_1, n_2}(\xi_1, \xi_2) \\
 &= \frac{1}{2} \int d\xi_1 \int d\xi_2 (\Phi_{m_1}^*(\xi_1) \Phi_{m_2}^*(\xi_2) - \Phi_{m_2}^*(\xi_1) \Phi_{m_1}^*(\xi_2)) (\Phi_{n_1}(\xi_1) \Phi_{n_2}(\xi_2) - \Phi_{n_2}(\xi_1) \Phi_{n_1}(\xi_2)) \\
 &= \delta_{m_1, n_1} \delta_{m_2, n_2} - \delta_{m_1, n_2} \delta_{m_2, n_1}
 \end{aligned}$$

$m_1 > m_2, n_1 > n_2$ であるので $\delta_{m_1, n_2} \delta_{m_2, n_1} = 0$. よってよって上式は

$$\delta_{m_1, n_1} \delta_{m_2, n_2}$$

に等しい。

p.11 N 粒子フェルミオンのスレーター行列式

$$\begin{aligned}
 & \int d\xi_1 \cdots \int d\xi_N \Phi_{\mathbf{m}}^*(\xi_1, \dots, \xi_N) \Phi_{\mathbf{n}}(\xi_1, \dots, \xi_N) \\
 &= \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} \sum_{P' \in S_N} (-1)^P (-1)^{P'} \int d\xi_1 \cdots \int d\xi_N \Phi_{m_{P'(1)}}^*(\xi_1) \cdots \Phi_{m_{P'(N)}}^*(\xi_N) \Phi_{m_{P(1)}}(\xi_1) \cdots \Phi_{m_{P(N)}}(\xi_N) \\
 &= \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} \sum_{P' \in S_N} (-1)^P (-1)^{P'} \delta_{m_{P'(1)}, n_{P(1)}} \cdots \delta_{m_{P'(N)}, n_{P(N)}}
 \end{aligned}$$

最右辺の和の後ろの部分は、 \mathbf{m} が \mathbf{n} の並び替えでない限りゼロである。今は、 $m_1 > m_2 > \cdots > m_N, n_1 > n_2 > \cdots > n_N$ の条件があるので、 $\mathbf{m} = \mathbf{n}$ かつ $P = P'$ のときのみが、和に寄与する。よって上式は

$$\frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} \sum_{P' \in S_N} (-1)^P (-1)^{P'} \delta_{P, P'} \delta_{\mathbf{m}, \mathbf{n}} = \delta_{\mathbf{m}, \mathbf{n}}$$

に等しい。

p.19 一次元井戸型ポテンシャル中の 3 電子系のエネルギー準位と縮退度

最低エネルギー状態 (二重縮退)

$$E = 2\varepsilon_0 + \varepsilon_1, \quad \Phi_{1\uparrow, 0\uparrow, 0\downarrow}, \quad \Phi_{1\uparrow, 0\uparrow, 0\downarrow}$$

第一励起状態 (二重縮退)

$$E = \varepsilon_0 + 2\varepsilon_1, \quad \Phi_{1\uparrow, 1\downarrow, 0\uparrow}, \quad \Phi_{1\uparrow, 1\downarrow, 0\downarrow}$$

第二励起状態 (二重縮退)

$$E = 2\epsilon_0 + \epsilon_2, \quad \Phi_{2\uparrow,0\uparrow,0\downarrow}, \quad \Phi_{2\uparrow,0\uparrow,0\downarrow}$$

p.22 間違い探し

$\hat{s}_{1z}, \hat{s}_{2z}$ はフォック空間上の演算子ではないから、エネルギー固有状態をこれらの固有状態にとることはできない。

p.22 2電子系に働く相互作用に関する一次摂動の計算
基底状態

$$\phi_0(x_1)\phi_0(x_2)\chi_s(\sigma_1, \sigma_2)$$

は縮退がないので、相互作用エネルギーの期待値をとれば、エネルギー準位のシフト ΔE_g が得られる。

$$\Delta E_g = \int dx_1 \int dx_2 U \delta(x_1 - x_2) |\phi_0(x_1)|^2 |\phi_0(x_2)|^2 \sum_{\sigma_1, \sigma_2} |\chi_s(\sigma_1, \sigma_2)| = U \int dx |\phi_0(x)|^4 = \frac{3U}{4a}$$

非摂動状態における第一励起状態は4重縮退しているが、スピン一重項と三重項にあらかじめ分けておけば、それらは摂動がかかった後でもエネルギー固有状態である。一重項状態

$$\frac{\phi_1(x_1)\phi_0(x_2) + \phi_1(x_2)\phi_0(x_1)}{\sqrt{2}} \chi_s(\sigma_1, \sigma_2)$$

のエネルギーシフト $\Delta E_{1st, S=0}$ は

$$\begin{aligned} \Delta E_{1st, S=0} &= \int dx_1 \int dx_2 U \delta(x_1 - x_2) \left| \frac{\phi_1(x_1)\phi_0(x_2) + \phi_1(x_2)\phi_0(x_1)}{\sqrt{2}} \right|^2 |\chi_s(\sigma_1, \sigma_2)| \\ &= 2U \int dx |\phi_0(x)|^2 |\phi_1(x)|^2 = \frac{U}{a} \end{aligned}$$

三重項状態については、 $x_1 \rightarrow x_2$ のとき波動関数がゼロになるので相互作用によるエネルギーシフトはない。

まとめると、 $U > 0$ (短距離斥力相互作用) のとき

$$E = 2\epsilon_0 + \frac{3U}{4a}, \quad \text{基底状態、縮退なし}$$

$$E = \epsilon_0 + \epsilon_1, \quad \text{第一励起状態、三重縮退}$$

$$E = \epsilon_0 + \epsilon_1 + \frac{U}{a}, \quad \text{第二励起状態、縮退なし}$$

となる。