

10章 He 原子

問題：(8)式の波動関数で表されるエネルギーを(14)(15)式から計算せよ。次の定義を使ってよい。

$$\begin{aligned}\varepsilon_1 &= \int \phi_{100}^*(\mathbf{r}) \hat{h}(\mathbf{r}) \phi_{100}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \\ J_{11} &= \iint \phi_{100}^*(\mathbf{r}_1) \phi_{100}^*(\mathbf{r}_2) \hat{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \phi_{100}(\mathbf{r}_1) \phi_{100}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2\end{aligned}$$

(8)式、(14)(15)式は以下の通り。

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{100}(\mathbf{r}_1) \alpha(\sigma_1) \times \phi_{100}(\mathbf{r}_2) \beta(\sigma_2) - \phi_{100}(\mathbf{r}_1) \beta(\sigma_1) \times \phi_{100}(\mathbf{r}_2) \alpha(\sigma_2)] \quad (8)$$

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \phi_{100}(\mathbf{r}_1) \phi_{100}(\mathbf{r}_2) [\alpha(\sigma_1) \beta(\sigma_2) - \beta(\sigma_1) \alpha(\sigma_2)]$$

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = E \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \quad (14)$$

$$\begin{aligned}\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1|} \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_2|} \right] + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \\ &= \hat{h}(\mathbf{r}_1) + \hat{h}(\mathbf{r}_2) + \hat{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\end{aligned} \quad (15)$$

エネルギーは次式で計算すればよい。

$$E = \int \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)^* \hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2$$

結果は、

$$E = 2\varepsilon_1 + J_{11}$$

となる。