

#### 第 4 問 固体物理：結晶場分裂・禁制遷移

[1]

(a)

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{5}{4}}(3 \cos^2 - 1) = \sqrt{\frac{5}{4}} \frac{3r^2 \cos^2 - r^2}{r^2} \propto 3z^2 - r^2 \quad (1.1)$$

より (ii)

(b)

$$Y_{22} + Y_{2-2} = \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{2\pi}} \sin \theta (e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}) = \frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}} \frac{r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi - r^2 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi}{r^2} \propto x^2 - y^2 \quad (1.2)$$

より (v)

(c)

$$Y_{21} + Y_{2-1} = -\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}} \cos \theta \sin \theta (e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}) = -i\sqrt{\frac{15}{2\pi}} \frac{r \cos \theta r \sin \theta \sin \varphi}{r^2} \propto yz \quad (1.3)$$

より (iii)

(d)

$$Y_{21} - Y_{2-1} = -\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}} \cos \theta \sin \theta (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) = -\sqrt{\frac{15}{2\pi}} \frac{r \cos \theta r \sin \theta \cos \varphi}{r^2} \propto zx \quad (1.4)$$

より (iv)

(b)

$$Y_{22} - Y_{2-2} = \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{2\pi}} \sin \theta (e^{2i\varphi} - e^{-2i\varphi}) = i\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}} \frac{r \sin \theta \cos \varphi \times r \sin \theta \cos \varphi}{r^2} \propto xy \quad (1.5)$$

より (i)

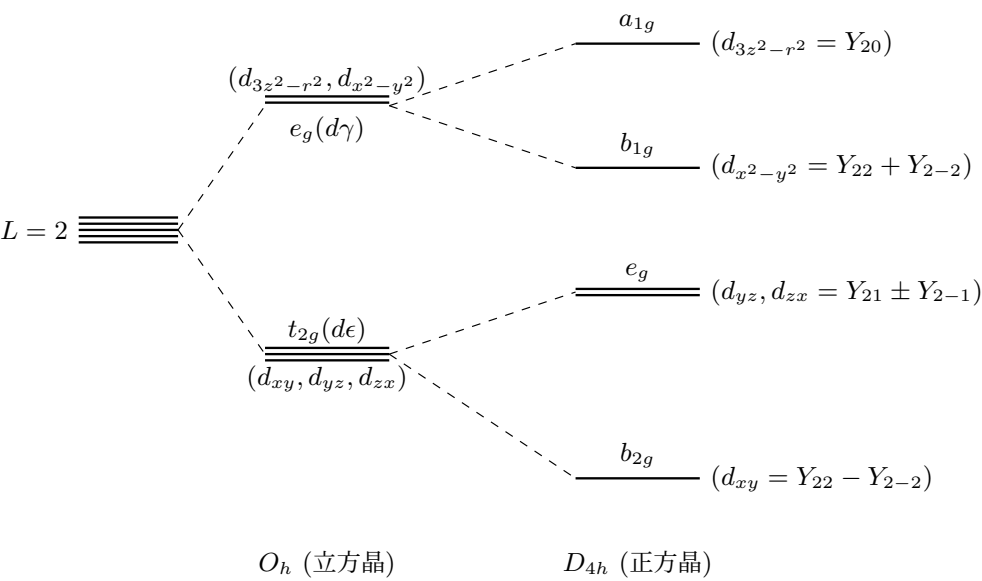


図: 結晶場分裂による軌道準位の変化

感想

私の専門なのでニコニコしながら解いてた。そのまま卒論に使いたいので、必要以上に記述している。