

2005年7月27日

## 平成17年度 問題

1. 変分原理を用いて、軌道  $\phi_i(\mathbf{r})$  に対する Hartree-Fock 方程式

$$\begin{aligned} H_1 \phi_i(\mathbf{r}_1) + \left[ \sum_j \int |\phi_j(\mathbf{r}_2)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} d\mathbf{r}_2 \right] \phi_i(\mathbf{r}_1) \\ - \sum_j \left[ \int \phi_j^*(\mathbf{r}_2) \phi_i(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{r_{12}} d\mathbf{r}_2 \right] \phi_j(\mathbf{r}_1) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}_1) \end{aligned} \quad (1)$$

を導いたのと同様にして、 $\phi_k^*(\mathbf{r})$  に対する Hartree-Fock 方程式を導け。

2. 次の文はある人の述懐（意識）である。

「私がそのことを考え始めたとき、一番の問題は、電子がどうやって金属内のイオンをすり抜けて進んでいけるのかを説明することである、と感じた。原子間距離程度の平均自由行程では抵抗を説明するのに短すぎたからである。私は話を簡単にするために、1次元の周期ポテンシャル中の波動関数から考え始めた。フーリエ解析から直接、波動関数が自由電子平面波とは周期的変調分だけ異なることを発見して、とてもうれしかった。」

彼の発見は現在何と呼ばれているか。またそれについて簡潔に説明せよ。

3. 結晶内の価電子の状態を1電子方程式をもとにして記述することを考える。この場合に行なわれる近似や仮定のうち、重要と考えられるもののいくつかについて簡潔に述べよ。

4. Fermi (交換) 正孔について説明せよ。

5. NFE モデルなどでよく近似できる物質では、価電子の相対運動（電子相関）があまり重要ではないように見える。その理由を説明せよ。

提出期限は8月4日木曜日12時、提出はB11棟（工学部7号館）117号室で手渡しのみ。