

平成 11 年度 固体電子論特論 レポート問題

・ Hartree-Fock 方程式を満たす 1 電子スピン軌道関数が互いに直交していることを示せ。

・ 交換 (Fermi) 正孔密度 $n_x^\sigma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ が、

$$\int n_x^\sigma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 = -1$$

を満たすことを示せ。

・ Bloch 関数の直交性を示せ。

・ bcc 格子に対して、tight binding 近似を用いて S バンドのエネルギー表式を求めよ。結果のみは不可とする。

・ G 個の準位を持つあるバンド全体が、初めは $2G$ 個の電子で全て満たされていた。このバンドから 1 つ電子を、もともとは完全に空いていた上のエネルギーバンドへ励起した。その時できる 1 重項状態および 3 重項状態の全電子エネルギーを求めよ。