固体電子論特論　レポート問題

提出先　7 号館 117 号室ドア前レポート BOX　　　　　　提出期限　2000 年 9 月 13 日 午前 10 時

.　2 電子の座標に依存する演算子 $\hat{L}_{1,2}$ の Slater 行列式による期待値は、

$$L=\sum_{i<j}\int\phi_i^*(\boldsymbol{r}_1)\phi_j^*(\boldsymbol{r}_2)\,\hat{L}_{1,2}\,\phi_i(\boldsymbol{r}_1)\phi_j(\boldsymbol{r}_2)\,d\boldsymbol{r}_1\,d\boldsymbol{r}_2-\sum_{i<j}{}^{\parallel}\int\phi_i^*(\boldsymbol{r}_1)\phi_j^*(\boldsymbol{r}_2)\,\hat{L}_{1,2}\,\phi_i(\boldsymbol{r}_2)\phi_j(\boldsymbol{r}_1)\,d\boldsymbol{r}_1\,d\boldsymbol{r}_2$$

で与えられることを示せ。(配点 20 点)

.　式 (3.28)

$$\rho_X^{i\sigma}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=-\frac{\phi_i^*(\boldsymbol{r}_1)\phi_i(\boldsymbol{r}_2)\sum_j^{\parallel}\phi_j^*(\boldsymbol{r}_2)\phi_j(\boldsymbol{r}_1)}{|\phi_i(\boldsymbol{r}_1)|^2}$$

によって定義される交換電荷密度 $e\rho_X^{i\sigma}$ は、

$$\int\rho_X^{i\sigma}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\,d\boldsymbol{r}_2=-1$$

の性質を持つことを示せ。(配点 20 点)

.　Slater 行列式に変分原理を適用して、1 電子函数に対する Hartree Fock 方程式を導いた。粒子の交換を考慮しない全電子波動函数

$$\Psi=\psi_1(\boldsymbol{\tau}_1)\psi_2(\boldsymbol{\tau}_2)\cdots\psi_N(\boldsymbol{\tau}_N)$$

に対して変分原理を適用して、Hartree 方程式

$$H_1\phi_i(\boldsymbol{r}_1)+\left[\sum_j{}'\int|\phi_j(\boldsymbol{r}_2)|^2\,\frac{e^2}{r_{12}}\,d\boldsymbol{r}_2\right]\phi_i(\boldsymbol{r}_1)=\epsilon_i\phi_i(\boldsymbol{r}_1)$$

を導け。また、この Hartree 方程式を満たす $\phi_i(\boldsymbol{r})$ は互いに直交しないことを示せ。(配点 30 点)

.　物理系または化学系を専攻する者は必ず (a) を、その他の者は (a) または (b) を選択せよ。(配点 30 点)

(a)　Na や Al などの伝導電子状態は、NFE モデルによって大変良く近似される。イオン殻 (原子核) 近傍の強いポテンシャルや電子間相互作用が、これらの金属においてあまり重要でないように見える理由 (NFE モデルと 1 電子近似の妥当性) について説明せよ。前者については例えば OPW (orthogonalized plane wave) 法について調べてみよ。後者については「電子の集団運動」の節を思い出してみよ。

(b)　Bloch 函数が格子の周期をもつ「$\boldsymbol{k}$ に依存しない」$u(\boldsymbol{r})$ によって、

$$\phi_k(\boldsymbol{r})=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\,u(\boldsymbol{r})$$

と表される場合には、Wannier 函数は、

$$w(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_j)=\frac{\sin\pi(x-R_{jx})\cdot\sin\pi(y-R_{jy})\cdot\sin\pi(z-R_{jz})}{\pi^3(x-R_{jx})(y-R_{jy})(z-R_{jz})}\,u(\boldsymbol{r})$$

と書けることを示せ。