

固体電子論レポート問題

締め切り：8月2日（金）17:00（時間厳守）

以下の3問のうち、問題1は全員解答すること。問題2と問題3はいずれか1問を選択して答えること。

問題1（必修）

図1のように4つの原子からなる1次元系を周期的境界条件で考える。各原子は1個のs軌道のみを持つとする。この系の強結合形式のハミルトニアン行列要素は、オンサイト成分は0で、オフサイト成分は再隣接原子間のみ-1で他は0とすると、行列表示のハミルトニアンは、

$$H = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

で与えられる。このハミルトニアンの固有値、

固有ベクトルは Mathematica を用いると、

```
In[1]:= H = {{0, -1, 0, -1}, {-1, 0, -1, 0}, {0, -1, 0, -1}, {-1, 0, -1, 0}}
```

```
Out[1]= {{0, -1, 0, -1}, {-1, 0, -1, 0}, {0, -1, 0, -1}, {-1, 0, -1, 0}}
```

```
In[2]:= Eigensystem[H]
```

```
Out[2]= {{-2, 2, 0, 0}, {1, 1, 1, 1}, {1, 1, -1, 1}, {0, -1, 0, 1}, {-1, 0, 1, 0}}
```

と求められる。最後の結果は、最初の{}内が固有値の組で続く4つの{}が対応する固有ベクトルを示す。今の例では、固有値-2に対応する固有ベクトルが(1,1,1,1)ということである。

以上を参考にして、s軌道のみを持つ4つの原子からなる2次元系に図2のように周期境界条件を課した場合に以下の問いに答えよ。

- (1) 上の例と同様に、オンサイト成分は0で、オフサイト成分は再隣接原子間のみ-1で他は0とした時の行列表示のハミルトニアンを求めよ。
- (2) Mathematica を用いて、このハミルトニアンの固有値、固有ベクトルを求めよ。
- (3) (2)の結果を物理的に説明せよ。必要であれば、縮退した固有値の固有ベクトルを適当に線形結合し直すこと。

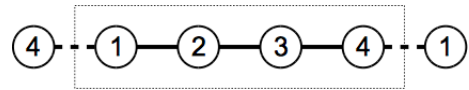


図1

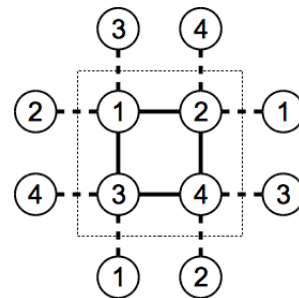


図2

問題 2 (選択)

配布プリントの 26 ページの式,

$$\sum_{m'} \left[\left\{ \varepsilon_k - \frac{\hbar^2}{2m} (k - G_m)^2 \right\} \delta_{mm'} - v_{mm'} \right] c_{m'}(k) = 0$$

但し,

$$v_{mm'} = (2\pi)^3 \int e^{-i(k-G_m)r} v(r) e^{i(k-G_{m'})r} dr = v(G_m - m')$$

を導け.

問題 3 (選択)

以下の点を考慮して, ハートリー近似とハートリー・フォック近似の違いを述べよ.

- 近似の違い
- 近似の限界 (何が言えて何が言えないか)