1 物質概論

って書いて何が分かるというのだ

しけたい４　(地底人)

1　謝辞

無断転載禁止です

・アイコンは**夏蛍様**のものを転載しています
・レポート問題の答えどこが違うんだと尋ねられると答えに困ります
・だって家電が来たりで忙しくて授業出てないんだも n
・間違ってても責任はとれません
・間違い見つけましたらご連絡ください
・あくまで参考資料として扱ってください。レポートは自力で解くのをお勧めします
・特に画像はしけたい４がレポートで使うので wiki から直接引用したもの以外は使用を勧めません

2　夢枕で素励起総立ち

最近見ないともっぱらの噂の某研究室の工作員ズの一人、みんなのしけたい４ですコンニチハ。何をしていたってずっと地下で実験していたわけですよ。そろそろメルトダウンが始まりそうですが、ノイズは今日も元気です。

５円玉見ただけで無意識がアパーチャー[*1]を想像する時点で末期だよね。可哀そうだからレポートの解説は私とペットがしてあげるよ。

もし実験の途中で力尽きても・・・
みんな大丈夫だよ♪
私が居るからっ♪

[*1] レーザーが定点を通過しているかを調べる器具。穴の大きさを変えることができ、それを用いてレーザーが穴の中心を通るようにする。

3 問 8

これはシュレディンガー方程式とブロッホ関数の復習だね。シュレディンガー方程式から、定常状態 $|\Psi>$ のエネルギーの期待値は
$\frac{<\Psi|\hat{H}|\Psi>}{<\Psi||\Psi>}$
とすることができるということと、そのポテンシャルと $|\Psi>$ をブロッホ関数の概念を用いて決めつけるということが解れば解けるよ♪

ブロッホ関数の概念を用いて波動関数を決めつける前に、この決めつけには以下のルールがあるってことを覚えておいて！
・格子の単位ベクトル $\vec{l}$ に対し、周期的という条件 $|\Psi(\vec{r})>=|\Psi(\vec{r}+\vec{l})>$ がある
・原子一つの場合の波動関数 $\psi_a(\vec{r})$ の線形結合で書ける
・というわけで、運動量 $\vec{k}$ は逆格子ベクトルを用いて $n_1\vec{b}_1+n_2\vec{b}_2+n_3\vec{b}_3$ である

以上から運動量 k のブロッホ関数の形は
$|\Psi_k(\vec{r})>=\sum_a C_a \sum_l e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\psi_a(\vec{r}-\vec{l})$
と書けるわけね。ちゃんと上の条件をすべて満たしていることを確認してちょうだい。

ここから更にイオンの芯に近い電子はある一つの状態 a である孤立原子と同じような振る舞いをすると仮定することで C_a を落として
$|\Psi_{a,k}(\vec{r})>=\sum_l e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\psi_a(\vec{r}-\vec{l})$
と書くことにするわ。

ここまで来ればあとはただの計算ね。各原子の軌道の直行性
$\int \psi_a(\vec{r}-\vec{l})^*\psi_a(\vec{r}-\vec{l'})dr=\delta_{ll'}$
ポテンシャルの重なり積分
$\int \psi_a(\vec{r})^*V(r)\psi_a(\vec{r}-\vec{l})=drJ(l)$
として全体のポテンシャルを
$V=\sum_l \psi_a(\vec{r}-\vec{l})$ とすれば・・・

【解答】
波動関数の形を以下のような形とする。
$|\Psi_{a,k}(\vec{r})>=\sum_l e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\psi_a(\vec{r}-\vec{l})$
エネルギーの期待値は
$\frac{<\Psi_{a,k}|\hat{H}|\Psi_{a,k}>}{<\Psi_{a,k}||\Psi_{a,k}>}=\epsilon_a+\frac{<\Psi_{a,k}|\hat{V}|\Psi_{a,k}>}{<\Psi_{a,k}||\Psi_{a,k}>}$
$\hat{V}=\sum_l V(\vec{r})+V_a(\vec{r}-\vec{l})$（V は全体のポテンシャル $V(\vec{r}+\vec{l})=V(\vec{r})$ を満たす）
となる。

$\int \psi_a(\vec{r}-\vec{h})^*\psi_a(\vec{r}-\vec{h}')dr = \delta_{hh'}$
$J(\vec{h}) = \int \psi_a(\vec{r})^* V(\vec{r})\psi_a(\vec{r}+\vec{h})dr$
として、上記の式の第二項を考えると（$N=\sum_{\vec{h}} 1$）
$\frac{<\Psi_{a,k}|\hat{V}|\Psi_{a,k}>}{<\Psi_{a,k}||\Psi_{a,k}>} = \frac{\sum_{\vec{h},\vec{h}'} J(\vec{h}-\vec{h}')}{N}$
$J(\vec{h}-\vec{h}')-J(-\vec{h}+\vec{h}')$ とすれば

$\frac{<\Psi_{a,k}|\hat{V}|\Psi_{a,k}>}{<\Psi_{a,k}||\Psi_{a,k}>} = \frac{NJ(0)+N\sum_{\vec{h}\neq 0} J(\vec{h})(e^{i\vec{k}\cdot\vec{h}}+e^{-i\vec{k}\cdot\vec{h}})}{N}$
最近接の原子のみ J が値を持つとすると
$J(\vec{h}) = C\ (\vec{h}=(0,0,0))$
$J(\vec{h}) = J\ (\vec{h}=(0,\pm\frac{a}{2},\frac{a}{2}),(\pm\frac{a}{2},0,\frac{a}{2}),(\pm\frac{a}{2},\frac{a}{2},0))$

以上より
$\epsilon = \epsilon_a + C + J(e^{i\frac{a}{2}k_x+\frac{a}{2}k_y} + e^{i\frac{a}{2}k_x-\frac{a}{2}k_y} + ...)$
$= \epsilon_a + C + J((e^{i\frac{a}{2}k_x} + e^{-i\frac{a}{2}k_x})(e^{i\frac{a}{2}k_y} + e^{-i\frac{a}{2}k_y}) + ..$ $= \epsilon_a + C + 4J(\cos(\frac{1}{2}ak_x)\cos(\frac{1}{2}ak_y)) + 4J(\cos(\frac{1}{2}ak_y)\cos(\frac{1}{2}ak_z)) + 4J(\cos(\frac{1}{2}ak_z)\cos(\frac{1}{2}ak_x))$

4　問9

これはただの波動関数の決めつけ方に関する計算問題だね。先ほどは一つの電子の問題だったから、波動関数を
$|\Psi_{a,k}(\vec{r}) >= \sum_l e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\psi_a(\vec{r}-\vec{l})$
としたわけだけど、今度は多電子系について考えるよ。

イオンの芯に近い電子は先ほど同様
$|\Psi_{a,k}(\vec{r}) >= \sum_l e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\psi_a(\vec{r}-\vec{l})$
として、イオンの芯から遠い電子はほぼ自由電子
$|\Psi_{b,k}(\vec{r}) >= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \sum_a \beta_a|\Psi_{a,k} >$
と決めつけるのがミソ。ちゃんとブロッホ関数としての性質も満たしているのにも注目！

先生が配った教材に近い形で書きなおすと（書きなおす意味はないんだが）

芯から近い電子
$|b_{t,k}(\vec{r}) >= \sum_l e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}b_t(\vec{r}-\vec{l})$
芯から遠い電子
$|X_k(\vec{r}) >= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \sum_t \beta_t|b_{t,k} >$

$|X>$ も $|b>$ も同じハミルトニアンの固有ベクトルだから直行しなければいけないということから
$\beta_{tk}=-<b_{t,k}||e^{i\vec{k}\cdot r}>$
となるのだけど、この β を採用した時に直行することを確認する問題ね。

【解答】
$<b_{tk'}||X_k>=<b_{tk'}|(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}+\sum_{t'}\beta_{t'}|b_{t,k}>) \quad =\sum_{t'}\beta_{t'}\delta_{tt'}\delta_{kk'}+<b_{tk'}||e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}>$
$=\beta_t\delta_{kk'}+<b_{tk'}||e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}>=-<b_{t,k}||e^{i\vec{k}\cdot r}>\delta_{kk'}+<b_{tk'}||e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}>$
　$k\neq k'$ のとき $<b_{tk'}||e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}>=0$ より
$<b_{tk'}||X_k>=0$