大学院：固体物理1

内容

1. **結晶の周期性と電子の振舞い**
2. **多電子波動関数とハートレー・フォック近似**
3. **温度グリーン関数**
4. **電子ガス**
5. **密度汎関数理論**
6. **フェルミ液体**
7. **電子相関**
8. **金属・絶縁体転移**

http://fujimac.t.u-tokyo.ac.jp/FujiwaraLab/index-j.html

このページから、講義資料などがダウンロードできる．

２．多体波動関数とHartree-Fock近似

多電子波動関数とハートリー・フォック近似

フェルミ統計――パウリの排他律

$$\xi_i = (\boldsymbol{r}_i, \sigma_i) \qquad \Psi(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_N)$$

$$P_{ij} \quad : \quad \xi_i \quad \Leftrightarrow \quad \xi_j$$

$$P_{ij}\Psi(\xi_1 \cdots, \xi_i, \cdots \xi_j \cdots \xi_N) = \Psi(\xi_1 \cdots, \xi_j, \cdots, \xi_i, \cdots \xi_N)$$

多電子ハミルトニアン H

$$\begin{aligned} H &= \sum_i (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + v(\xi_i)) + \sum_{i<j} \frac{e^2/(4\pi\varepsilon_0)}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|} \\ &= \sum_i f_i + \sum_{i<j} g_{ij} \end{aligned}$$

$$[P_{ij}, H] = P_{ij}H - HP_{ij} = 0$$

波動関数の反対称性

$$P_{ij}\Psi(\cdots\xi_i,\cdots\xi_j\cdots) = p\Psi(\cdots\xi_i\cdots\xi_j\cdots)$$

$$P_{ij}^2 = 1$$

$p^2 = 1$, すなわち $p = \pm 1$

$$\Psi(\cdots\xi_j\cdots\xi_i\cdots) = \pm\Psi(\cdots\xi_i\cdots\xi_j\cdots)$$

$p = -1$: フェルミ粒子

$p = +1$: ボーズ粒子

波動関数の反対称性:スレーター行列式

$$\Psi_N(\xi_1\cdots\xi_N) \;=\; A_N \begin{vmatrix} \phi_{a_1}(\xi_1) & \phi_{a_2}(\xi_1) & \cdots & \phi_{a_N}(\xi_1) \\ \phi_{a_1}(\xi_2) & \phi_{a_2}(\xi_2) & \cdots & \phi_{a_N}(\xi_2) \\ \vdots & & & \\ \phi_{a_1}(\xi_N) & \phi_{a_2}(\xi_N) & \cdots & \phi_{a_N}(\xi_N) \end{vmatrix}$$

$$\equiv \; |\phi_{a_1}\phi_{a_2}\cdots\phi_{a_N}|$$

$$\langle\phi_a|\phi_b\rangle = \sum_\sigma \int d\boldsymbol{r}\phi_a^*(\xi)\phi_b(\xi) = \delta_{ab}$$

$$A_N = (N!)^{-1/2}$$

$$\langle\Psi_N|\Psi_N\rangle = \sum_{\sigma_1}\cdots\sum_{\sigma_N}\int d\boldsymbol{r}_1\cdots\int d\boldsymbol{r}_n\Psi_N^*(\xi_1\cdots\xi_N)\Psi_N(\xi_1\cdots\xi_N) = 1$$

波動関数の反対称性:エネルギー期待値

$$
\begin{aligned}
E_N &= \langle \Psi_N | H | \Psi_N \rangle \\
&= \sum_a \langle \phi_a | f | \phi_a \rangle + \frac{1}{2} \sum_{a \neq b} \{ \langle \phi_a \phi_b | g | \phi_a \phi_b \rangle - \langle \phi_a \phi_b | g | \phi_b \phi_a \rangle \}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle \phi_a | f | \phi_a \rangle &= \sum_\sigma \int d\boldsymbol{r} \phi_a^*(\xi) (-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + v(\xi)) \phi_a(\xi) \ , \\
\langle \phi_a \phi_b | g | \phi_c \phi_d \rangle &= \sum_{\sigma\sigma'} \int d\boldsymbol{r} \int d\boldsymbol{r}' \phi_a^*(\xi) \phi_b^*(\xi') (\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}) \cdot \frac{1}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|} \phi_c(\xi) \phi_d(\xi')
\end{aligned}
$$

スピン波動関数

$\phi_a(\xi) = \varphi_{a_r}(\boldsymbol{r})\alpha(\sigma)$　または　$\phi_a(\xi) = \varphi_{a_r}(\boldsymbol{r})\beta(\sigma)$

$$\alpha(1) = 1, \quad \alpha(-1) = 0, \quad \beta(1) = 0, \quad \beta(-1) = 1$$

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\sum_\sigma \alpha(\sigma)\alpha(\sigma) = 1, \quad \sum_\sigma \beta(\sigma)\beta(\sigma) = 1,$$
$$\sum_\sigma \alpha(\sigma)\beta(\sigma) = 0, \quad \sum_\sigma \beta(\sigma)\alpha(\sigma) = 0$$

交換相互作用

$$\langle \phi_a \phi_b | g | \phi_c \phi_d \rangle = \delta_{\sigma_a \sigma_c} \delta_{\sigma_b \sigma_d} \langle \phi_a \phi_b | g | \phi_c \phi_d \rangle$$

$$E_N = \sum_a \langle \phi_a | f | \phi_a \rangle + \frac{1}{2} \sum_{a \neq b} \langle \phi_a \phi_b | g | \phi_a \phi_b \rangle - \frac{1}{2} \sum_{a \neq b\ (\uparrow\uparrow)} \langle \phi_a \phi_b | g | \phi_b \phi_a \rangle$$

第 2 項:(静電的) クーロン相互作用 (ハートリー項)

第 3 項:交換相互作用

$$h(\xi)\phi_a(\xi) = \sum_b \varepsilon_{ab} \phi_b(\xi) \ , \quad \varepsilon_{ab} = \varepsilon_{ba}^* \ , \quad \varepsilon_{ab} = \varepsilon_{ab} \delta_{\sigma_a \sigma_b}$$

$$h(\xi) = f(\xi) + \sum_b \sum_{\sigma'} \int d\boldsymbol{r}' [\phi_b^*(\xi')\phi_b(\xi')g(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}) - \phi_b^*(\xi')g(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r})\phi_b(\xi)P_{\xi\xi'}]$$

$$h(\xi)\phi_a(\xi) = \varepsilon_a \phi_a(\xi)$$

クープマンスの定理

$$\Psi_N = \left|\phi_1\phi_2\cdots\phi_{N-1}\phi_a\right| \,, \quad \Psi_{N-1} = \left|\phi_1\phi_2\cdots\phi_{N-1}\right|$$

$$\varepsilon_a = \langle\phi_a|f|\phi_a\rangle + \sum_b \{\langle\phi_a\phi_b|g|\phi_a\phi_b\rangle - \langle\phi_a\phi_b|g|\phi_b\phi_a\rangle\}$$

$$\varepsilon_a = \langle\Psi_N|H|\Psi_N\rangle - \langle\Psi_{N-1}|H|\Psi_{N-1}\rangle$$