2013年度固体物理学III・物性物理学IIレポート課題

高田　康民

平成26 年1 月13 日

概 要

成績評価は解いた課題の総数とそれぞれの解の質、どのような課題を選んでいるか、また、どれくらいの時間をかけて解いたか（すなわち、提出時期）などを総合的に判断しながら決定する。なお、課題は難易度を考慮したポイント制になっていて、合計６点が単位取得のためのミニマムである。課題レポートの提出は随時受け付ける（問題提出後、２週間以内の提出にはボーナス点を与える）が、**最終締め切りは** 2014 **年**1 **月**31 **日（金）**である。レポートは1 月29 日（水）の最終講義時までは直接受け取るが、それ以降は解答を pdf ファイルにまとめてメール (takada@issp.u-tokyo.ac.jp) に添付して提出してもよいし、学内便（物性研究所高田康民宛）で郵送してもよい。

1　10月2日出題：１ポイント

長さの尺度の微小な変換に対する（規格化された）基底状態の安定性からビリアル（Virial）定理を証明せよ。

2　10月2日出題：１ポイント

カスプ定理「２つの粒子がそれぞれ、質量が m_1 と m_2 で電荷が z_1e と z_2e、のとき、２つの粒子が近づく極限、すなわち相対距離 x がゼロの極限で波動関数の動径方向の対数微分が

$$\lim_{x\to 0}\frac{\partial}{\partial x}\Big[\ln \Psi_0(\mathbf{x})\Big] = \lim_{x\to 0}\frac{\partial \Psi_0(\mathbf{x})}{\partial x}\frac{1}{\Psi_0(\mathbf{x})} = \frac{z_1 z_2}{a_{\mathrm{B}}}\frac{\mu_{12}}{m}$$

の条件を満たす。ここで、$\mu_{12} = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$ である。」を証明せよ。また、スピンが同じ電子同志の場合は上の関係式は変化するが、それを求めよ。

3　10月2日出題：１ポイント

ヘリウム原子を一体近似で変分的に解く場合、自己無撞着の方程式を解く代わりに、試行 1s 軌道関数 $\phi_{1s}(r)$ を

$$\phi_{1s}(r) = \sqrt{\frac{\lambda^3}{\pi}}e^{-\lambda r}$$

として、変分パラメータ λ を最適化することも考えられる。この場合の λ を最適化せよ。また、このときの基底状態エネルギーはどのようになるか。そして、$\lambda = Z^* a_B^{-1}$ と書くと、$1 < Z^* < 2$ であるが、その物理的な理由を述べよ。

4　10月2日出題：2ポイント

コヒーレントポテンシャル近似（CPA: Coherent Potential Approximation）、あるいは、動的平均場理論（DMFT: Dynamical Mean-Field Theory）についてレビュー・レポートを書くこと。

5　10月9日出題：1ポイント

水素分子において、電子２つが同時に一つの陽子の側の半空間に存在する確率 p をハイトラー・ロンドン・杉浦の試行関数 Ψ_{HL}、および、分子軌道の試行関数 Ψ_{MO} の場合のそれぞれについて、元になる水素原子の 1s 状態の波動関数を $\phi_{1s}(r) = \sqrt{\lambda^3/\pi} e^{-\lambda r}$ として、求めよ。得られた p の結果について、その λR 依存性を議論せよ。

$$p = \frac{2}{1+S^2}\Big[T(1-T) + \frac{S^2}{4}\Big], \quad S = \Big(1 + \lambda R + \frac{\lambda^2 R^2}{3}\Big)e^{-\lambda R}, \quad T = \frac{2+\lambda R}{4} e^{-\lambda R}$$

すると、$\lambda = a_B^{-1}$ と取ろうが、λ を最適化しようが、$p = 0.35$ 程度である。（詳しくいえば、前者では $p = 0.354$、後者では $p = 0.358$ である。）これは $p : q \approx 1 : 2$ を意味する。一方、分子軌道型の試行関数 Ψ_{MO} では，ϕ_{1s} の形によらず，$p = q = 0.5$、すなわち、$p : q = 1 : 1$ となる．Ψ_{HL-MO} では、$A_1 = 0.455$，$A_2 = 0.137$ 程度、すなわち、$A_1 : A_2 \approx 3 : 1$ ということになる。これは分子軌道型のように無相関でもないが、ハイトラー・ロンドン型ほどには強相関でもないという実情を示している。

6　10月9日出題：2ポイント

２サイト・ハバード模型の固有状態と固有エネルギーを求めよ。また、水素分子の凝集機構の本質を捉えるように、この２サイト・ハバード模型を改良せよ。

7　10月9日出題：1ポイント

超高圧下の水素固体研究の現状を調べて、レポートを書け。

8　10月23日出題：1ポイント

４体クーロン系 $(M^+M^+m^-m^-)$ において、電子質量 m と陽子質量 M との比 $\sigma(\equiv m/M)$ の関数として基底状態エネルギーをハートレー単位（27.21eV）で $E_0(\sigma)$ と書くと、電子陽子対称性から $\sigma E_0(\sigma) = E_0(1/\sigma)$ が得られることを示せ。また、これから $E_0(\sigma) \equiv \varepsilon_0(\sigma)/(1+\sigma)$ として $\varepsilon_0(\sigma)$ を定義すると、$\sigma = 1$ では $\partial\varepsilon_0(\sigma)/\partial\sigma = 0$ となること、そして、その結果として、$\sigma = 1$ の近傍では $E_0(\sigma) \approx -1.03212/(1+\sigma)$ となることを議論せよ。

9　10月23日出題：1ポイント

４体クーロン系 $(M^+M^+m^-m^-)$ で、基底エネルギー E_0 を $E_0 = \langle T_n \rangle + \langle T_e \rangle + \langle V_{nn} \rangle + \langle V_{en} \rangle + \langle V_{ee} \rangle$ と書いた場合、　ビリアル定理、　$m/M > 0.4$ では電子 "陽子" 対称性から $\langle V_{nn} \rangle \approx \langle V_{ee} \rangle$ であること、　図に示すように m/M のほぼ全域で $\langle V_{en} \rangle \approx 3E_0$ である。これらを用いて、$m/M > 0.4$ では各粒子間の平均距離の比が $\langle r_{en} \rangle : \langle r_{ee} \rangle : \langle r_{nn} \rangle \approx 1 : \sqrt{2} : \sqrt{2}$ であることを議論せよ。

10　10月23日出題：1ポイント

$E \otimes e$ 系の動的ヤーンテラー効果におけるシュレディンガー方程式を解け。また、ベリー位相の効果がその結果にどのように、そして、なぜ反映されているかを議論せよ。

11　10月30日出題：1+1ポイント

１サイトのハバード・ホルスタイン模型のグリーン関数を
(i)　低温でハーフフィルド、$U = 2\alpha$ のときに求めよ。（ここまで１ポイントで、これでやめてもよい。）
(ii)　低温だが、一般の場合に求めよ。そして、スペクトル関数を図示して得られる物理描像を議論せよ。（1 ポイント追加）

12　10月30日出題：1ポイント

講義で与えた２サイトのホルスタイン模型を考えて、その強結合極限での有効ホッピング積分 $\tilde{t}$ は $t\exp(-2\alpha)$ であることを、各サイトの基底状態を出発点にして、２サイト間でそれらの結合・反結合軌道を作り、それらのエネルギー差を計算することによって示せ。

13　10月30日出題：2ポイント

前問と同じことを２サイトのヤーン・テラー模型について行って、$\tilde{t}$ を求めよ。

14　11月6日出題：1ポイント

Bloch-de Dominicis の定理を証明せよ。

15　11月6日出題：1ポイント

$T_e + \lambda V_{ee}$ に対して動径分布関数 $g_{\sigma\sigma'}(r:\lambda)$ を与えると、$T_e + V_{ee}$ の1電子あたりの基底状態エネルギー ε_0 はフェルミ球の運動エネルギーの1電子あたりの量 $\varepsilon_{\mathrm{KE}}$ とポテンシャルエネルギーの寄与の和の形として、次のように書けることを示せ。

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_{\mathrm{KE}} + \frac{n}{8}\sum_{\sigma\sigma'}\int_0^1 d\lambda \int d\mathbf{r}\frac{e^2}{r}[g_{\sigma\sigma'}(r:\lambda) - 1]$$

ここで、λ についての積分が波動関数の変形による運動エネルギーの変化を取り込んでいることに注意せよ。

16　11月6日出題：1ポイント

電子ガス系について、
(i) $g^{\mathrm{HF}}_{\uparrow\uparrow}(r)$ と $g^{\mathrm{HF}}_{\uparrow\downarrow}(r)$ を求めよ。
(ii) (i) で得られた $g^{\mathrm{HF}}_{\uparrow\uparrow}(r)$ の結果を前問で得られた公式に代入して電子ガス系の1電子当たりの交換エネルギーが $\varepsilon_{ex} = -0.916/r_s\mathrm{Ry}$ で与えられることを確かめよ。

17　11月13日出題：1+1ポイント

(i) 自由電子の温度グリーン関数 $G^{(0)}_{\mathbf{p}}(i\omega_p) = 1/(i\omega_p - \varepsilon_{\mathbf{p}})$ を用いると、自由電子の分極関数 $\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_q)$ は

$$\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_q) = -T\sum_{\omega_p}\sum_{\mathbf{p}\sigma} G^{(0)}_{\mathbf{p}}(i\omega_p)G^{(0)}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}(i\omega_p + i\omega_q)$$

で与えられる。この時、松原振動数 ω_p の和を取ると、$\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_q)$ は講義で与えた形

$$\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_q) = \sum_{\mathbf{p}\sigma}\frac{f(\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) - f(\varepsilon_{\mathbf{p}})}{i\omega_q + \varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}}$$

になることを示せ。また、これは

$$\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_q) = 2\sum_{\mathbf{p}\sigma} f(\varepsilon_{\mathbf{p}})\frac{\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}}}{\omega_q^2 + (\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}})^2}$$

と書き直せることを示せ。
(ii) $T = 0$ での $\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, 0)$ を、１次元系、２次元系、３次元系のそれぞれについて、具体的に q の関数として求めよ。

18　11月13日出題：2ポイント

スピンに依存する局所場補正 $G_\pm(\mathbf{q})$ を使って、交換相関効果の入った電子間有効相互作用を求めよ。なお、この場合、２つの電子間に働く力は、　直接のクーロン斥力、　電荷揺らぎを介した引力、　スピン揺らぎを介した力、の三つの項の和になり、その結果、２つの電子のスピンが平行か反平行か（あるいは、スピン１重項か３重項か）によって違う電子間有効相互作用になることに注意せよ。

19　11月20日出題：1ポイント

ハリマン (Harriman) の構成法によって、任意の電子密度 $n(\mathbf{r})$ を再現する "スレーター型行列式" が無限個存在することを明示的に示すことができる。なお、"スレーター型行列式" とは1電子状態の基底を N 個持ってきて、一つの行列式の形に書いた波動関数のことである。ここでは簡単のために1次元の（スピンが揃っていると仮定した）場合のハリマンの構成法を考えよう。

いま、$-\infty < x < \infty$ で $n(x)$ が与えられたとしよう。（簡単のために $n(x)$ が恒等的にゼロになる区間はないと仮定しよう。）そこで、1電子波動関数 $\phi_k(x)$ として、

$$\phi_k(x) = p(x)^{1/2} \exp[2\pi ikq(x) + i\xi(x)]$$

を考えよう。ここで、

$$p(x) = n(x)/N, \quad q(x) = \int_{-\infty}^{x} dyp(y)$$

とする。そして、k は任意の整数で、$\xi(x)$ は任意の実関数である。

このとき、関数系 $\{\phi_k(x)\}$ は完備正規直交系を形成していることを示せ。そして、N 電子系のスレーター型行列式 Ψ として、

$$\Psi_{k_1,\ldots,k_N}(x_1,\ldots,x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\det\left(\phi_{k_i}(x_j)\right)$$

を定義すると、$n(\mathbf{r})$ は $\langle\Psi|\psi^+(x)\psi(x)|\Psi\rangle$ であることを示せ。

20　11月20日出題：2ポイント

普遍汎関数 $F_\lambda[n(\mathbf{r})]$ を

$$F_\lambda[n(\mathbf{r})] = \frac{3(3\pi^2)^{2/3}}{10m}\int d\mathbf{r}\ n(\mathbf{r})^{5/3} + \lambda J[n(\mathbf{r})]$$

と近似すると、これはトーマス・フェルミ (Thomas-Fermi) 近似に対応する。ここで、$J[n(\mathbf{r})]$ はハートリーポテンシャルを表す汎関数で、

$$J[n(\mathbf{r})] \equiv \frac{1}{2}\int d\mathbf{r}\int d\mathbf{r}'\frac{e^2}{|\ \mathbf{r}-\mathbf{r}'\ |}n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')$$

のように定義される。

水素原子をこのトーマス・フェルミ近似で解け。また、同じ近似では水素分子は記述できない（すなわち、分子の凝集エネルギーはゼロである）ことを示せ。

21　11月20日出題：1ポイント

電子密度が n_0 である一様密度電子ガスに電荷 Ze の試験電荷（$|Z| \ll 1$）を座標原点に置いた系では、この試験電荷によって誘起された電子密度 $n_{\rm ind}(\mathbf{r})$ は

$$n_{\rm ind}(\mathbf{r}) = \frac{Z}{\Omega_t}\sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\frac{V(\mathbf{q})\Pi(\mathbf{q},0)}{1+V(\mathbf{q})\Pi(\mathbf{q},0)}$$

で与えられる。このとき、全電子密度は $n(\mathbf{r}) = n_0 + n_{\rm ind}(\mathbf{r})$ で、それはカスプの定理を満たす。すなわち、

$$\lim_{r\to 0}\frac{1}{n(\mathbf{r})}\frac{\partial n(\mathbf{r})}{\partial r} \approx \frac{1}{n_0}\frac{\partial n_{\rm ind}(\mathbf{r})}{\partial r}\Big|_{r=0} = -\frac{2Z}{a_{\rm B}}$$

である。これを確かめよ。

なお、$q(=|\mathbf{q}|) \to \infty$ での分極関数 $\Pi(\mathbf{q},0)$ の極限形は

$$\lim_{q\to\infty}\Pi(\mathbf{q},0) = \lim_{q\to\infty}\Pi^{(0)}(\mathbf{q},0) = 2n_0\Omega_t\,\frac{2m}{q^2}$$

であることに注意せよ。また、必要なら、

$$\int_0^\infty dx\frac{j_0(x)}{x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{2}}\int_0^\infty dx\,x^{-5/2}J_{1/2}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{2^{-5/2}\Gamma(-1/2)}{\Gamma(2)} = -\frac{\pi}{4}$$

という積分公式を使ってよい。

22　11月27日出題：1ポイント

１次元のクローニッヒ・ペニー (Kronig-Penny) 模型を運動量空間のシュレディンガー方程式で解いてみよう。１次元系で解くべき方程式は

$$\frac{k^2}{2m}f(k) + \sum_G V_G f(k-G) = \varepsilon(k)f(k)$$

である。これに１次元の周期ポテンシャル $V(x)$ として、

$$V(x) = V_0 a\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x-na)$$

という形を与えよう。すると、逆格子ベクトルは $G = \frac{2\pi}{a}\times m$（$m$ は整数）ということになり、$V(x)$ のフーリエ成分 V_G は

$$V(G) = \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2}dx\,e^{-iGx}V(x) = V_0$$

である。これをシュレディンガー方程式に代入し、

$$F(k) \equiv \sum_G f(k-G)$$

に関して自己無撞着な方程式を導け。そして、その方程式が解を持つ条件式を書き下せ。なお、

$$\cot(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty}\frac{1}{\pi m + x}$$

という関係に注意せよ。

23　11月27日出題：2ポイント

有効質量公式

$$\frac{\partial^2\varepsilon_\nu(\mathbf{k})}{\partial k_i\partial k_j}=\frac{\delta_{ij}}{m}+\sum_{\nu\neq\nu'}\frac{\langle\phi_{\nu\mathbf{k}}|v_i|\phi_{\nu'\mathbf{k}}\rangle\langle\phi_{\nu'\mathbf{k}}|v_j|\phi_{\nu\mathbf{k}}\rangle+\langle\phi_{\nu\mathbf{k}}|v_j|\phi_{\nu'\mathbf{k}}\rangle\langle\phi_{\nu'\mathbf{k}}|v_i|\phi_{\nu\mathbf{k}}\rangle}{\varepsilon_\nu(\mathbf{k})-\varepsilon_{\nu'}(\mathbf{k})}$$

は「**f-sum rule**」とも呼ばれる。その理由を知るために次のような計算をしてみよう。

久保公式からベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ の中で誘起される電流は (cgs 単位系で考え、かつ、$\mathrm{div}\mathbf{A}=0$ のゲージで考えて）

$$\begin{aligned}
j_i(\mathbf{q},\omega) &= -\frac{c}{4\pi}\sum_{j=x,y,z}K_{ij}(\mathbf{q},\omega)A_j(\mathbf{q},\omega)\\
K_{ij}(\mathbf{q},\omega) &= -\frac{4\pi i}{c^2}\int_0^\infty dte^{i\omega t}\langle[j_i^{(P)}(\mathbf{q},t),j_j^{(P)}(-\mathbf{q})]\rangle+\frac{4\pi e^2}{mc^2}\delta_{ij}\int d\mathbf{r}\langle\Psi^+(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})\rangle\\
j_i^{(P)}(\mathbf{q}) &= -\frac{e}{2m}\int d\mathbf{r}e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\Big(\Psi^+(\mathbf{r})[-i\nabla_i\Psi(\mathbf{r})]+[-i\nabla_i\Psi(\mathbf{r})]^+\Psi(\mathbf{r})\Big)
\end{aligned}$$

で与えられる。（ここで、$j_i^{(P)}$ は常磁性電流演算子と呼ばれる。）

そこで、$H=H_{\mathrm{KS}}$ として一体近似で考え、

$$\Psi(\mathbf{r})=\sum_{\nu\mathbf{k}}c_{\nu\mathbf{k}}\phi_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

のように展開すると、

$$\begin{aligned}
K_{ij}(\mathbf{0},0) &= \frac{4\pi e^2}{c^2}\sum_{\nu\mathbf{k}}\langle\phi_{\nu\mathbf{k}}|v_i|\phi_{\nu\mathbf{k}}\rangle\langle\phi_{\nu\mathbf{k}}|v_j|\phi_{\nu\mathbf{k}}\rangle\frac{\partial f[\varepsilon_\nu(\mathbf{k})]}{\partial\varepsilon_\nu(\mathbf{k})}\\
&\quad+\sum_{\nu\mathbf{k}}\sum_{\nu\neq\nu'}\langle\phi_{\nu\mathbf{k}}|v_i|\phi_{\nu'\mathbf{k}}\rangle\langle\phi_{\nu'\mathbf{k}}|v_j|\phi_{\nu\mathbf{k}}\rangle\frac{f[\varepsilon_\nu(\mathbf{k})]-f[\varepsilon_{\nu'}(\mathbf{k})]}{\varepsilon_\nu(\mathbf{k})-\varepsilon_{\nu'}(\mathbf{k})}+\frac{\delta_{ij}}{m}\sum_{\nu\mathbf{k}}f[\varepsilon_\nu(\mathbf{k})]
\end{aligned}$$

であることを示せ。これと有効質量公式を使って、$H=H_{\mathrm{KS}}$ の場合は金属・絶縁体に拘わらず（すなわち、フェルミ準位の位置によらずに)、マイスナー効果がないこと（すなわち、$K_{ij}(\mathbf{0},0)=0$）を証明せよ。そして、その証明において有効質量公式の役割を物理的に説明せよ。

24　12月4日出題：1ポイント

1次元（$\varepsilon(k)=-2t\cos k$)、2次元（$\varepsilon(k_x,k_y)=-2t(\cos k_x+\cos k_y)$)、3次元コサインバンド（$\varepsilon(k_x,k_y,k_z)=-2t(\cos k_x+\cos k_y+\cos k_z)$) の状態密度を求めよ。

25　12月4日出題：2ポイント

3次元の自由電子系を再帰法で解こう。ハミルトニアンは動径方向だけを考えると

$$H=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}=-\frac{1}{2m}\Big(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\Big)$$

である。そして、出発点の波動関数 $u_0(r)$ を

$$u_0(r) = \Big(\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}\Big)^{3/2} e^{-\lambda^2 r^2/2}$$

ととる。すると、再帰的に決められる基底 $\{u_n(r)\}$ はラゲル多項式でかけることを示せ。そして、エネルギーの単位を $\varepsilon = \lambda^2/2m$ とすると、その基底における H の3重対角行列表現の対角成分 a_n は $(2n+3/2)\varepsilon$ であり、非対角成分 b_n は $[n(n+1/2)]^{1/2}\varepsilon$ であることを示せ。

26　12月11日出題：3ポイント

マーデルングエネルギーを求めるエバルト (Ewald) の方法を考える。今、$+Z$ の電荷を持つイオンが sc、bcc、fcc のいずれかの結晶構造で格子を組んでいるとする。（格子の単位胞の体積を Ω_a、単位胞の総数を N_a とする。）そして、このイオンの電荷を丁度打ち消すだけの（一様密度と考えた）価電子の海（電子密度は $n = Z/\Omega_a$ となる）にこの正イオン格子系が浸っていたとする。すると、系全体の静電エネルギー U は、正イオン同士間、正イオンと電子間、電子同士間のクーロンエネルギーを足し合わせると、

$$U = \frac{1}{2}\sum_{n\neq n'} \frac{Z^2 e^2}{|\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}|} - \frac{n}{2}\sum_n \int d\mathbf{r} \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{R}_n|}$$

となる。したがって、１電子あたりの静電エネルギー $C_{\mathrm{M}} \equiv U/ZN_a$ は

$$C_{\mathrm{M}} = \frac{Ze^2}{2}\Big(\sum_{n\neq 0}\frac{1}{|\mathbf{R}_n|} - \frac{1}{\Omega_a}\int d\mathbf{r}\frac{1}{|\mathbf{r}|}\Big)$$

となる。この式を更に変形して、

$$C_{\mathrm{M}} = \frac{Ze^2}{2}\Big[\frac{4\pi}{\Omega_{\mathrm{a}}}\sum_{\mathbf{K}\neq\mathbf{0}}\frac{e^{-\mathbf{K}^2/4K_0^2}}{\mathbf{K}^2} + \sum_{n\neq 0}\frac{1}{|\mathbf{R}_n|}\mathrm{erf}(K_0|\mathbf{R}_n|) - \frac{2K_0}{\sqrt{\pi}} - \frac{\pi}{\Omega_{\mathrm{a}}}\frac{1}{K_0^2}\Big]$$

と書けることを示せ。ここで、$\mathbf{K}$ は逆格子ベクトル、K_0 は任意に選んだカットオフパラメータ、$\mathrm{erf}(x)$ は誤差関数であり、

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_x^\infty e^{-t^2}dt$$

で定義される。これは x が大きくなると急激に減少する関数である。なお、

$$\frac{1}{|\mathbf{R}|} = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty e^{-|\mathbf{R}|^2 x^2}dx$$

及び、

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}}\sum_n e^{-|\mathbf{R}_n|^2 x^2} = \frac{2\pi}{\Omega_{\mathrm{a}}}\sum_{\mathbf{K}}\frac{1}{x^3}e^{-|\mathbf{K}|^2/4x^2}$$

の関係式に注意せよ。

更に、sc、bcc、fcc の各場合について、K_0 を最適な値に選んで数値計算し、以下のような結果を確かめよ。なお、立方体の基本格子定数を a_0 とすると、電子間の平均的な距離 r_0 は a_B を単位として測った量 $r_s = r_0/a_\mathrm{B}$ として、

$$\frac{4\pi}{3}r_0^3 = \frac{4\pi}{3}a_\mathrm{B}^3 r_s^3 = \begin{cases} a_0^3/Z & \text{sc の場合} \\ a_0^3/2Z & \text{bcc の場合} \\ a_0^3/4Z & \text{fcc の場合} \end{cases}$$

で与えられる。この r_s を使い、$\mathrm{Ry} = e^2/2a_\mathrm{B} = 13.6\ \mathrm{eV}$ をエネルギーの単位とすると、各結晶構造について１電子あたりのマーデルングエネルギー C_M は

$$C_\mathrm{M} = \begin{cases} -1.76011884 Z^{2/3}/r_s & \text{sc の場合} \\ -1.79185851 Z^{2/3}/r_s & \text{bcc の場合} \\ -1.79174723 Z^{2/3}/r_s & \text{fcc の場合} \end{cases}$$

である。

27　12月11日出題：3ポイント

グランドポテンシャル Ω

$$\Omega = -k_B T \ln(\mathrm{Tr} e^{-\beta(H-\mu N)})$$

において、z 方向を向いた強磁場中の１電子問題を考えよう。このとき、電子軌道の量子化（ランダウ準位）を考慮するが、ゼーマン分裂は考慮しない。すると、各電子のエネルギー準位は

$$\varepsilon(n, k_z) = \hbar\omega_c(n + 1/2) + \hbar^2 k_z^2/2m$$

である。ここで、$\omega_c = eH/mc$、$x - y$ 面内のサイクロトロン運動をするランダウ準位のインデックスを n とした。なお、このインデックスが n で、z 方向の自由運動を規定する波数 k_z が区間 $(k_z, k_z + dk_z)$ にある状態の数は単位体積あたり、

$$\frac{2}{(2\pi)^3}d\mathbf{k} \to 2\frac{2\pi}{\ell^2}\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{dk_z}{2\pi} = \frac{eH}{2\pi^2\hbar c}dk_z$$

である。ここで、$\ell = \sqrt{\hbar c/eH}$ はランダウ軌道半径である。すると、Ω は、

$$\Omega = -k_B T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{eH}{2\pi^2\hbar c} dk_z \sum_{n=0}^{\infty} \ln\{1 + \exp[\mu - \varepsilon(n, k_z)]\}$$

となる。

そこで、n についての和を任意の関数 $F(x)$ に対するポアソンの和公式

$$\sum_{n=0}^{\infty} F(n + 1/2) = \int_0^{\infty} F(x)dx + 2\sum_{m=1}^{\infty}(-1)^m \int_0^{\infty} F(x)\cos(2\pi m x)dx$$

を用いて書き直すと、

$$
\begin{aligned}
\Omega &= -k_BT\int_{-\infty}^{\infty}\frac{eH}{2\pi^2\hbar c}dk_z\int_0^{\infty}dx\ln\{1+\exp[\mu-\varepsilon(x-1/2,k_z)]\} \\
&\quad -2k_BT\sum_{m=1}^{\infty}(-1)^m\int_{-\infty}^{\infty}\frac{eH}{2\pi^2\hbar c}dk_z\int_0^{\infty}dx\ln\{1+\exp[\mu-\varepsilon(x-1/2,k_z)]\}\cos(2\pi mx)
\end{aligned}
$$

となるが、各積分項は部分積分によって

$$
\int_0^{\infty}dx\ln\{1+\exp(\mu-\varepsilon)\}\cos(2\pi mx)=\frac{\beta}{4\pi^2m^2}\Big[f(\varepsilon)\frac{\partial\varepsilon}{\partial x}\Big]_{x=0}
+\frac{\beta}{4\pi^2m^2}\int_0^{\infty}dx\cos(2\pi mx)\Big[f(\varepsilon)\frac{\partial^2\varepsilon}{\partial x^2}+\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial x}\frac{\partial\varepsilon}{\partial x}\Big]
$$

となる。ここで、$f(\varepsilon)$ はフェルミ分布関数である。しかるに、$\varepsilon=\hbar\omega_c x+\hbar^2k_z^2/2m$ なので、$\partial\varepsilon/\partial x=\hbar\omega_c$、$\partial^2\varepsilon/\partial x^2=0$ を使うと、

$$
\begin{aligned}
\int_0^{\infty}dx\ln\{1+\exp(\mu-\varepsilon)\}\cos(2\pi mx) &= \frac{\beta}{4\pi^2m^2}\hbar\omega_c f(\hbar^2k_z^2/2m) \\
&\quad +\frac{\beta}{4\pi^2m^2}\hbar\omega_c\int_0^{\infty}dx\cos(2\pi mx)\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial x}
\end{aligned}
$$

が得られる。

さて、低温では $\partial f(\varepsilon)/\partial x$ は $\varepsilon=\mu$ を満たす x の値 X で最大になるので、$x=X+y$ とし、積分変数を y に書き換えると、

$$
\begin{aligned}
\int_0^{\infty}dx\ \cos(2\pi mx)\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial x} &\approx \int_{-\infty}^{\infty}dy\cos[2\pi m(X+y)]\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial y} \\
&= \cos(2\pi mX)\int_{-\infty}^{\infty}dy\cos(2\pi my)\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial y} \\
&= -\pi\frac{2\pi m}{\hbar\omega_c\beta}\mathrm{cosech}(2\pi^2m/\hbar\omega_c\beta)\cos(2\pi mX)
\end{aligned}
$$

となる。なお、この際、

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty}dx\ \cos(ax)\,\frac{-e^x}{(e^x+1)^2} &= 2[\cos(ax)/(e^x+1)]_0^{\infty}+2\int_0^{\infty}dx\,\frac{a\sin(ax)}{1+e^x} \\
&= -1+2a\sum_{m=1}^{\infty}(-1)^{m-1}\int_0^{\infty}dx\ \sin(ax)e^{-mx} \\
&= -1-2a\sum_{m=1}^{\infty}(-1)^m\frac{a}{a^2+m^2}=-\pi a\,\mathrm{cosech}(\pi a)
\end{aligned}
$$

を用いた。

以上の数学的準備の下でドハース・ファンアルフェン効果を説明せよ。

28　12月18日出題：2ポイント

sd 模型に基づいて２次の散乱振幅を求め、電気伝導率に対する近藤の結果を再現せよ。

29　12月18日出題：2ポイント

不純物アンダーソン模型 $H_{\rm A}$ から出発して、伝導電子と d 電子の間の混成相互作用について 2 次摂動を行うことにより、$H_{\rm A}$ の強結合極限での有効模型ハミルトニアンとして sd 模型を導出せよ。

30　1月8日出題：1ポイント

単純金属結晶中のフォノンに関連して、縦波、横波各音波の速度公式を求めよ。

31　1月8日出題：1ポイント

フレーリッヒ・ポーラロンの最低次の自己エネルギー $\Sigma^{(0)}_{\mathbf{p}\sigma}(p^2+i0^+)$ を計算せよ。

32　1月8日出題：1ポイント

ランダウ・ペカー理論の厳密解を求めるときに $E_0=e_0\alpha^2$ と書き表したとき、最適化された波動関数 $\phi(\mathbf{r})$ を数値的に決めるオイラー・ラグランジェ方程式の未定係数が $3e_0$ でよいことを、ビリアル定理を参考にしながら、証明せよ。

33　1月8日出題：1ポイント

フレーリッヒ・ポーラロンの強結合領域で重要になるエネルギー汎関数 $E_0[\phi]$ は

$$E_0[\phi]=-\int d\mathbf{r}\phi(\mathbf{r})^*\Delta\phi(\mathbf{r})-\alpha\int d\mathbf{r}\int d\mathbf{r}'\frac{|\phi(\mathbf{r})|^2|\phi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

で与えられるが、この $E_0[\phi]$ の最適化問題に対して、

$$\phi(\mathbf{r})=\sqrt{\frac{\beta^3}{8\pi}}e^{-\beta r/2}$$

という 1s 波動関数型の試行関数で最適のパラメータ β を求めて、そのときの $E_0[\phi]$ の値を求めよ。

34　1月22日出題：1ポイント

複素経路積分法を使って積分

$$\int_0^\infty dx\,\frac{\ln x}{\cosh^2 x}=\ln\frac{\pi}{4}-\gamma$$

を証明せよ。ただし、$\gamma(=0.57721\cdots)$ はオイラー数である。

35　1月22日出題：2ポイント

１次元、２次元、３次元のそれぞれについて、２電子系の相対運動に対するシュレディンガー方程式

$$\Big(-\frac{\Delta}{m} - g\delta(\mathbf{r})\Big)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

の基底状態エネルギーを求めよ。特に、$g > 0$ として、$E < 0$ の束縛状態が存在するかどうかを調べよ。

36　1月22日出題：1ポイント

$T < T_c$ だが $T \approx T_c$ において、超伝導状態の熱力学ポテンシャル Ω は対応する正常状態でのそれを Ω_n と書くと、

$$\Omega = \Omega_n + D_\sigma(0)\frac{T - T_c}{T_c}|\Delta|^2 + \frac{1}{2}D_\sigma(0)\frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 T_c^2}|\Delta|^4$$

と展開できることを示せ。

37　1月22日出題：1ポイント

２つの超伝導体（$x < 0$ に超伝導１，$x > 0$ に超伝導２として、その GL パラメータを、それぞれ、(a_1, b_1)、(a_2, b_2) とする）が $x = 0$ にあるごく薄い絶縁層を通して接しているとする。この場合、GL の秩序変数 $\Psi(x)$ が $\Psi(0) = 0$、$\Psi(x \to \infty) = \sqrt{|a_2|/b_2}$、$\Psi(x \to -\infty) = \sqrt{|a_1|/b_1}\, e^{i\theta_1}$ という境界条件を満たす GL 方程式の定常解を求めよ。ただし、θ_1 は任意の位相とする。

38　1月22日出題：3ポイント

常伝導金属において、ランダウの反磁性帯磁率を久保公式から計算せよ。

39　1月22日出題：1ポイント

正常金属相において成り立つコリンハの関係式、$T_1 T =$（一定)、を導け。

40　1月22日出題：2ポイント

SQUID(Superconducting Quantum Interference Deice) について、その原理と応用を述べよ。