

目次

まえがき	iii	3.4 金属からの熱電子放出	115
第1章 1次元周期ポテンシャル中の電子	1	付録A 統計力学の概略と熱力学との関係	118
1.1 1次元周期系におけるブロッホの定理	2	A1 小正準集団と熱力学量	118
1.2 周期的に配列した量子井戸のエネルギー準位	6	A2 正準集団と熱力学量	120
1.3 電子のトンネリングとエネルギーバンド	11	A3 大正準集団と熱力学量	123
1.4 強束縛近似 (tight-binding approximation)	20	付録B 独立粒子におけるフェルミ-ディラック統計とボー ズ-アインシュタイン統計	125
1.5 平面波とほとんど自由な電子の近似	32	付録C 相関効果の模型における修正フェルミ-ディラック 統計	130
1.6 バンド理論における電子の力学的な性質	38	第4章 1電子近似と近似を越えて	134
第2章 結晶の幾何学的な記述：結晶格子と逆格子	49	4.1 多電子問題についての前置き	135
2.1 単純格子と複合格子	49	4.2 ハートリー方程式	137
2.2 いくつかの結晶構造の幾何学的な記述	56	4.3 同種粒子と行列式で表された波動関数	139
2.3 ウィグナー-ザイツ単位胞	69	4.4 行列式状態間の行列要素	141
2.4 逆格子	70	4.5 ハートリー-フォック方程式	145
2.5 ブリルアンゾーン	76	4.6 1電子近似を越えた方法の概略	160
2.6 並進対称性と量子力学の性質	80	4.7 一様な電子ガスの電子的な性質と位相ダイヤグラム	162
2.7 状態密度と臨界点	92	4.8 密度汎関数理論とコーン-シャム方程式	172
第3章 ゾンマーフェルトによる金属の自由電子理論	101	付録A スピン-軌道の2電子積分	181
3.1 自由電子ガスの量子論	101	付録B 同種フェルミ粒子に対する第2量子化の概要	184
3.2 フェルミ-ディラック分布関数と化学ポテンシャル	107	付録C フェルミ球における積分	188
3.3 金属の電子比熱と熱力学関数	112	第5章 結晶のバンド理論	191
		5.1 バンド理論の基本的な仮定	191
		5.2 強束縛法 (LCAO 法)	193
		5.3 直交化した平面波法 (OPW 法)	205
		5.4 擬ポテンシャル法	216

5.5	セルラー法	225
5.6	補強された平面波 (APW) 法	228
5.7	グリーン関数法 (KKR 法)	236
5.8	電子構造の計算における他の方法と発展	246
第 6 章	いくつかの結晶の電子的性質	264
6.1	希ガス固体のバンド構造と凝集エネルギー	264
6.2	イオン結晶の電子状態	274
6.3	ダイヤモンド構造の共有結晶	289
6.4	いくつかの金属のバンド構造とフェルミ面	293
索引		302