# 3章

共有結合結晶や、その  $\mathrm{sp}3$  混成軌道、また、強束縛近似によるハミルトニアンの対角化、バンド図が主な話題となる。

## sp3 混成軌道

 ${
m sp3}$  混成軌道について話せそうなこと挙げると、まず結晶の配置から  ${
m p}$  軌道の向きを考え、波動関数の重ね合わせを考える。

波動関数の重ね合わせから sp3 のエネルギーの概略を説明することになる。

### 強束縛近似

強束縛近似の概要をまず述べる (一次元鎖について考えればよさそう)。すなわち、ハミルトニアンのうち、どの項を捨て、どの項を用いるかを説明する。

その後、対角化によりバンドが得られることを確認する。

ダイヤモンドのほうを対角化するのはダイジェストでいいと思う。

# 4章

自由電子近似による金属結合の仕組みや、パウリ排他律の効き方について話す。

### 自由電子近似

自由電子近似の妥当性をまず話してから、近似の概要を喋る。

#### 相関係数周りの話

話せたら話したいなあ