[物理学標準]

以下の問（１）～（８）に答えよ.

一次元かつ周期的に原子が並んだ固体を考える．N個の同種原子が等間隔aで並んでいる．$N+1$番目の原子は，１番目の原子と同じとなる周期的境界条件が成り立つ．結晶中の電子の運動を一電子近似により考える．下記の周期性をもつポテンシャル場中を運動する.

$$U(x+a)=U(x)$$

n番目$(1 \le n \le N)$の規格化された原子軌道関数を$\phi_n(x)$とし，結晶中を波数kで運動する電子の波動関数$\psi_k(x)$は，以下の式のように$\phi_n(x)$を用いて表される．隣り合う原子軌道関数の間の重なりは小さく，nの異なるものは互いに直交する近似を用いる．プランク定数を$\hbar$とする.

$$\psi_k(x)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N} e^{inka}\phi_n(x) \qquad \text{（式１）}$$

（１）質量m，エネルギーEの電子の定常状態における Schrödinger 方程式を記せ.

（２）波動関数に関する関係式$\psi_k(x+a)=C\psi_k(x)$が成り立つとき，周期的境界条件により複素数Cを求めよ.

（３）以下の関係式が成り立つ.

$$\psi_k(x+a)=e^{ika}\psi_k(x)$$

kの取り得る値を求めよ.

（４）（式１）の$\psi_k(x)$が規格化されていることを示せ.

（５）$\psi_k(x+a)$を Taylor 展開することにより，以下の関係式を示せ．ここで，$\hat{p}$は運動量演算子とする.

$$\psi_k(x+a)=\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{p}a\right)\psi_k(x)$$

次に，（式１）の波動関数に対する外殻電子のエネルギー$E(k)$を考える．ここで，n番目の原子に局在する電子には，最近接原子間の相互作用のみがはたらく．$\hat{H}$は電子のハミルトニアンを表す．また，以下の実数パラメータα，βを導入する．ここで，Nは十分大きいとする.

$$\alpha=\left\langle \phi_n \middle| \hat{H} \middle| \phi_n \right\rangle, \qquad \beta=-2\left\langle \phi_{n+1} \middle| \hat{H} \middle| \phi_n \right\rangle=-2\left\langle \phi_{n-1} \middle| \hat{H} \middle| \phi_n \right\rangle$$

（６）$E(k)=\left\langle \psi_k \middle| \hat{H} \middle| \psi_k \right\rangle$を$\alpha$，$\beta$，$k$，$a$を用いて表せ．また，$k$と$E(k)$の関係をグラフに図示せよ．ただし，$\alpha>0$，$\beta>0$とする.

（７）$k \cong 0$近傍における$E(k)$の曲率より，固体中の電子の有効質量m^*を求めよ.

（８）問（６）における$E(k)$に，さらに第二近接原子との相互作用として，実数パラメータ $\gamma=-2\left\langle \phi_{n+2} \middle| \hat{H} \middle| \phi_n \right\rangle=-2\left\langle \phi_{n-2} \middle| \hat{H} \middle| \phi_n \right\rangle$ を導入する．このとき，$E(k)$を α，β，γ，k，aを用いて表せ.