Bloch(ブロッホ) の定理について

簡単のため，1 次元で考える．N 個の正電荷が図のように間隔 a で並んでいる場合，周期境界条件を考えると（1 次元では円周状にすることに対応する），

$$\psi(x+Na)=\psi(x) \tag{1}$$

となる．

さらに，この波動関数は，正電荷の周期性を反映する必要がある．つまり，位置を a だけずらしても，電子密度は不変でないといけない．従って，

$$|\psi(x+a)|^2=|\psi(x)|^2 \tag{2}$$

を満足しなければならない．これは，波動関数 ψ が次のように書けることを意味する．

$$\psi(x+a)=\mu\psi(x) \tag{3}$$

ただし，μ は，$|\mu|^2=\mu^*\mu=1$ を満足する複素数である．従って，(1) と (3) 式から，$\mu^N=1$ となるので，

$$\mu=\exp(2\pi ip/N) \tag{4}$$

となる．ただし，p は整数である．

ここで，自由独立電子論の波数 k を思い出してみると，結晶の長さ L に対して，x 方向成分は，$k_xL=2\pi n_x(n$ は整数) であった．$L=Na$ の関係，および，k_x を k，n_x を p と書き換えると，$k=2\pi p/(Na)$ となる．よって，$\mu=\exp(ika)$ となるので，(3) 式は次のように書ける．

$$\psi(x+a)=\exp(ika)\psi(x) \tag{5}$$

この式を満たす波動関数 $\psi(x)$ は，次のように書くことができる．

$$\psi(x)=\exp(ikx)u(x) \tag{6}$$

ただし，$u(x)$ は，$u(x+a)=u(x)$ を満たす，どんな関数でもよい．周期的な正電荷，すなわち結晶中の波動関数が (6) 式のように書けることを，Bloch の定理といい，(6) 式を Bloch 関数という．