Bloch の定理

2012 年 3 月 12 日

1　イントロ

一般に、ハミルトニアンがある対称性を持つと、波動関数やその固有値に対しある条件が付く。ハミルトニアンが離散空間並進対称性を持つ時に波動関数がどのような性質を持つかの代表的なものがブロッホの定理である。

2　Bloch の定理

空間並進対称演算子とは

$$T_a \left| r \right\rangle = \left| a + r \right\rangle$$

基本結晶ベクトルを a_i とする。
つまり、a_i 方向に $|a_i|$ の距離進むごとに単位胞進むとする。(1 辺の結晶の大きさは $N_i|a_i|$ とする。)
結晶の端では周期的境界条件を用いる。
この演算子に対してハミルトニアンが可換であるとすると、同時固有状態 $\left| \alpha \right\rangle$ が存在し、

$$\begin{aligned} H \left| \alpha \right\rangle &= \varepsilon \left| \alpha \right\rangle \\ T_{a_i} \left| \alpha \right\rangle &= C_i \left| \alpha \right\rangle \end{aligned}$$

となる。
ここで

$$\begin{aligned} T_{a_i} \left| \alpha \right\rangle &= \int \mathrm{d}r T_{a_i} \left| r \right\rangle \left\langle r | \alpha \right\rangle \\ &= \int \mathrm{d}r \left| r + a_i \right\rangle \left\langle r | \alpha \right\rangle \\ &= \int \mathrm{d}r \left| r \right\rangle \left\langle r - a_i | \alpha \right\rangle \end{aligned}$$

これを N_i 回繰り返すと、周期的境界条件より、

$$\begin{aligned} T_{a_i}^N \left| \alpha \right\rangle &= \int \mathrm{d}r \left| r \right\rangle \left\langle r - N_i a_i | \alpha \right\rangle \\ &= \int \mathrm{d}r \left| r \right\rangle \left\langle r | \alpha \right\rangle = \left| \alpha \right\rangle = C_i^N \left| \alpha \right\rangle \end{aligned}$$

より、$1 = e^{2p_i\pi i}, n \in \mathrm{Z}$ なので、

$$C_i = \exp\frac{2p_i\pi}{N}i$$

これより、

$$T_{a_i}\left|\alpha\right\rangle = \int \mathrm{d}r\left|r\right\rangle\left\langle r - a_i|\alpha\right\rangle = \int \mathrm{d}r\left|r\right\rangle C_i\left\langle r|\alpha\right\rangle$$

より

$$\left\langle r - a_i|\alpha\right\rangle = \exp(\frac{2p_i\pi}{N_i}i)\left\langle r|\alpha\right\rangle$$

同様に、$R = \sum n_i a_i$ に対し

$$\begin{aligned}\left\langle r - R|\alpha\right\rangle &= \exp\left(\sum\frac{2p_i n_i\pi}{N_i}i\right)\left\langle r|\alpha\right\rangle \\ &= \exp\left(\sum\frac{2p_i\pi}{|a_i|N_i}|a_i|i\right)\left\langle r|\alpha\right\rangle \\ &= \exp(ik\cdot R)\left\langle r|\alpha\right\rangle\end{aligned}$$

ただし、$R = \sum n_i a_i, k = \sum 2\pi\frac{p_i}{N_i}\frac{a_i}{|a_i|}$
ここで、$u_k(r) = e^{-ik\cdot r}\left\langle\alpha|r\right\rangle$ とおくと、

$$\begin{aligned}u_k(r - R) &= e^{-ik\cdot(r-R)}\left\langle\alpha|R\right\rangle \\ &= e^{-ik\cdot r}\left\langle\alpha|R\right\rangle = u_k(r)\end{aligned}$$

より、$u_k(r)$ は格子並進に対して不変
以上より

$$\begin{aligned}\left\langle\alpha|r\right\rangle &= e^{ik\cdot r}u_k(r) \\ k &= \sum 2\pi\frac{n_i}{N_i}\frac{a_i}{|a_i|}\end{aligned}$$

とかける。ただし、$u_k(r)$ は格子並進に対して不変。
これが Bloch の定理

3 疑問点とか

特に疑問とかは無い。
tight-binding モデルでワニエ状態を作るのとかに使う。
Bloch の定理に限らず対称性だけで波動関数の形や固有空間の形がかなり限定されるということは知ってるし、一般的な定理とかも導けるけど、具体的な知識とかはあんまないな・・・
昔一度空間群の分類とかしたけど機械的にやってただけでなにも覚えてないし (笑)