で与えられることは明らかであろう。とくに同一の形の局在ポテンシャルが $x=0$ と $x=\Delta>0$ に存在する場合、つまり、Δ だけの距離をおいて局在ポテンシャルが繰り返される場合は

$$M = M_1 \begin{pmatrix} e^{-ik\Delta} & 0 \\ 0 & e^{ik\Delta} \end{pmatrix} M_1 \begin{pmatrix} e^{ik\Delta} & 0 \\ 0 & e^{-ik\Delta} \end{pmatrix} \tag{C.23}$$

となる。

D　ブロッホの定理

周期 a の周期的ポテンシャル

$$V(x+a) = V(x) \tag{D.1}$$

のもとでの 1 次元量子力学を考える。時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$Eu(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right] u(x) \tag{D.2}$$

の遠方で発散しない解 $u(x)$ は

$$u(x+a) = e^{iKa} u(x) \tag{D.3}$$

の形で表される周期性を持つことが知られている（ブロッホの定理）。ここで K は x に依らない実数である。

この定理を証明するには、波動関数を a だけ移動させる演算子

$$\begin{aligned} \hat{D} &= \exp\left(i\frac{a}{\hbar}\hat{p}\right) \\ &= 1 + i\frac{a}{\hbar}\hat{p} - \frac{1}{2!}\left(\frac{a}{\hbar}\right)^2 \hat{p}^2 + \cdots \end{aligned} \tag{D.4}$$

の状態

$$|u\rangle = \int dx |x\rangle u(x) \tag{D.5}$$

への作用を考察すればよい。実際に演算子 $\hat{D}$ が波動関数を a だけ移動させることは

$$\begin{aligned} \hat{D}|u\rangle &= \int dx|x\rangle \left(1 + a\frac{d}{dx} + \frac{1}{2!}a^2\frac{d^2}{dx^2} + \cdots\right) u(x) \\ &= \int dx|x\rangle \left(u(x) + au'(x) + \frac{1}{2!}a^2 u''(x) + \frac{1}{3!}a^3 u'''(x) + \cdots\right) \\ &= \int dx|x\rangle u(x+a) \end{aligned}$$

により示される。一方、ポテンシャル $V(x)$ が周期 a の周期関数であることから、

$$[\hat{D}, \hat{H}] = 0 \tag{D.6}$$

であることがわかり、エネルギー固有状態 $|u\rangle$ は演算子 $\hat{D}$ の固有状態でもあることが示される。

状態 $|u\rangle$ における $\hat{D}$ の固有値を κ とおくと

$$\hat{D}|u\rangle = \kappa|u\rangle. \tag{D.7}$$

つまり、

$$u(x+a) = \kappa u(x), \qquad u(x-a) = \kappa^{-1} u(x) \tag{D.8}$$

が示される。このことから $\hat{D}$ をかける操作を n 回繰り返すと

$$u(x+na) = \kappa^n u(x), \qquad u(x-na) = \kappa^{-n} u(x) \tag{D.9}$$

となることがわかり、$|\kappa| \neq 1$ の場合には、x の無限遠方で波動関数が発散してしまう。逆にいえば、κ の絶対値が 1 であること、つまり x に依らない実数 K を用いて

$$u(x+a) = e^{iKa} u(x) \tag{D.10}$$

と書けることが証明できるのである。

ブロッホの定理の応用として、周期的デルタ関数ポテンシャル

$$V(x) = \sum_n \frac{\hbar^2 \lambda}{2ma} \delta(x+na) \tag{D.11}$$

のもとでの質量 m の粒子の 1 次元量子力学を考えよう。ここで $\sum_n$ はすべての整数 n についての和を表す。この周期的デルタ関数ポテンシャルはクローニッヒ・ペニー模型として知られており、この模型を研究することで、周期的な結晶構造中の電子状態の定性的な振る舞いを理解することができる。

波数 k を

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{D.12}$$

とすると、このポテンシャルの下での領域 $-a < x < 0$ でのシュレディンガー方程式の解は、一般に

$$u(x) = Ae^{+ikx} + Be^{-ikx}, \qquad \text{for } -a < x < 0 \tag{D.13}$$

で与えられる。一方、ブロッホの定理より、領域 $0 < x < a$ での解は

$$\begin{aligned} u(x) &= e^{iKa} u(x-a) \\ &= Ae^{i(K-k)a} e^{+ikx} + Be^{i(K+k)a} e^{-ikx}, \qquad \text{for } 0 < x < a \end{aligned} \tag{D.14}$$

とならねばならない。

ブロッホの定理に表れる実数パラメータ K は、一般にエネルギー E に依存して決定されるパラメータである。周期的なポテンシャルは、結晶中で典型的に生じるため K は結晶波数と呼ばれる。次に、どのように結晶波数 K が決定されるかを考えよう。いまのポテンシャルの場合は、波数 k に応じてエネルギー E が決まるので、波数 k と結晶波数 K に関係をつければよい。そのために、点 $x = 0$ における（デルタ関数ポテンシャルの存在の下での）波動関数の接続条件

$$\lim_{x \downarrow 0} u = \lim_{x \uparrow 0} u, \qquad \lim_{x \downarrow 0} u' = \lim_{x \uparrow 0} u' + \frac{\lambda}{a} u(0)$$

を考える。解 (D.13) と (D.14) を上式に代入すると、

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} e^{i(K-k)a} & 0 \\ 0 & e^{i(K+k)a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \tag{D.15}$$

が得られる。ここで、行列 M は

$$M \equiv \begin{pmatrix} 1+i\alpha & i\alpha \\ -i\alpha & 1-i\alpha \end{pmatrix}, \qquad \alpha \equiv \frac{\lambda}{2ka} \tag{D.16}$$

で定義される行列である。式 (D.15) で、係数 A, B が非自明な解を持つためには、行列

$$M \begin{pmatrix} e^{i(K-k)a} & 0 \\ 0 & e^{i(K+k)a} \end{pmatrix} - 1 = \begin{pmatrix} (1+i\alpha)e^{i(K-k)a}-1 & i\alpha e^{i(K+k)a} \\ -i\alpha e^{i(K-k)a} & (1-i\alpha)e^{i(K+k)a}-1 \end{pmatrix}$$

の行列式

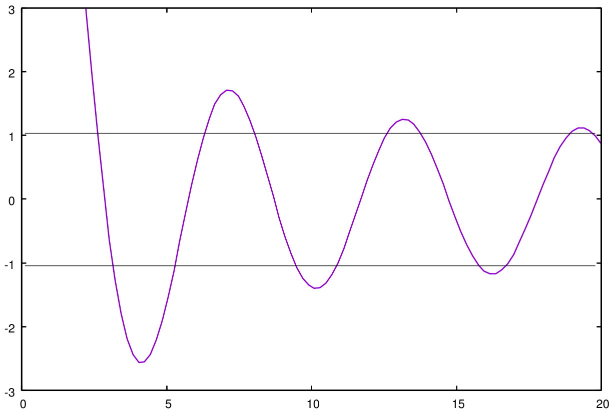
$$2e^{iKa}\left[\cos Ka - \cos ka - \alpha \sin ka\right]$$

がゼロでならねばならない。この条件から

$$\cos(Ka) = \cos(ka) + \frac{\lambda}{2ka}\sin(ka) \tag{D.17}$$

が得られ、実数パラメータ K が波数 k に応じて決定されることが見て取れる。

式 (D.17) を吟味すると、波数 k の値によっては、対応する結晶波数 K が存在しない場合があることがわかる。実際、$\lambda = 20$ のときに式 (D.17) の右辺を $z = ka$ についてプロットすると次ページに示すようなグラフが得られる。式 (D.17) の左辺が $-1 < \cos(Ka) < 1$ の範囲に制限されることより、このグラフの縦軸の値が 1 を超える領域や -1 よりも小さくなる領域では、波数 k に対応する結晶波数が存在せず、結果として、可能なエネルギー E にエネルギーギャップを生じる。これは、周期的なポテンシャルをもつ結晶中の電子状態にしばしば生じる現象である。



E　直交多項式

量子力学の具体的問題を計算するためには、ハミルトニアン演算子の固有値問題（時間に依存しないシュレディンガー方程式）を解くことが必要である。これらの固有状態はお互いに直交することから、波動関数がなんらかの直交多項式で表されることが多い。また、波動関数の言葉では、ハミルトニアン演算子が 2 階微分演算子であることから、これらの直交多項式を微分方程式の解として表現しておくことが必要である。最後に、これらの直交多項式を生成する母関数 (生成関数) を知っていると、具体的な計算が著しく簡単になることが多い。

ここでは、調和振動子の計算で現れるエルミート多項式、角運動量の量子化で重要なルジャンドル多項式（およびその拡張としてのゲーゲンバウアー多項式）、水素原子の動径方程式の解を記述するラゲール多項式について、その母関数はなにか、それらの具体的な形、満たすべき微分方程式、直交性の性質をまとめておく。