数理解析研究所講究録
第30巻 1967年 75-90

Bloch関数の解析性

京大 理　長谷川

§1 序

格子振動の振動数分布について述べられたVan Hove-Phillipsの臨界点理論の基礎にあるMorseの定理は，いわば組合せ位相幾何学的な数学形式であるから，それは結晶の周期性を反映する他の力学系にも適用される。その代表的なものに固体電子のエネルギー・スペクトル（electron energy band — E.B.と略記）があり，ここではその数学的側面を考察する。対象として取り扱うスペクトルが解析的に明瞭な形で定義されるならば，組合せ位相幾何に解析的な手法の導入が可能となり臨界点理論を再構成することが出来ると思われる。実際の（物理的）固体電子エネルギー・スペクトルはそのようなことを許さぬ程複雑な対象であるが，問題の本質が失われない範囲でモデルを簡単化すればそのような要求を満すようにすることが不可能ではない。

今固体内の一電子の定常状態に対応するシュレディンガー方程式が次のように書かれるものとする。

$$\Delta\psi + \left(E - V(x_1, x_2, \cdots x_s)\right)\psi = 0 \qquad (1\cdot1)$$

ここに△はラプラシアン $\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+\cdots+\frac{\partial^2}{\partial x_s^2}$ を表わし，$s=3$（3次元）であるが当然 $s=1$，2 も考察の対象となる。又 $V(x_1, x_2, \cdots x_s)$ は座標ベクトル $\boldsymbol{x}(x_1, \cdots x_s)$ の関数で，その実変数関数論的な性質には何らかの制限がなければならない．ここでは有界，且つ有限個の点を除き連続と假定する．結晶に対する周期性は s 次元平行移動群 $g^{(s)}$ に対する $V(\boldsymbol{x})$ の不変性

$$V(T\boldsymbol{x}) \equiv V(\boldsymbol{x}+\sum_{\nu=1}^{s} n_\nu a_\nu) = V(\boldsymbol{x}) \qquad (1\cdot2)$$

$$T \in g^{(s)} = \{T \mid T\boldsymbol{x} = x+\sum_{\nu=1}^{s} n_\nu a_\nu\ ;\ n_\nu = \text{整数}\}$$

として規定される．即ち S 個の 1 次独立なベクトル $\{a_1, a_2, \cdots a_s\}$ が形成する平行多面体 $\mathfrak{D}$（単位胞）に関して V は周期関数であり，その場合 $\mathfrak{D}$ はそのような「最小単位」である．以上のようなポテンシャル関数 $V(x)$ とパラメタ E とによって定義される二階楕円型偏微分方程式の解 $\psi(x)$，及びそれから導かれる連続スペクトル E とがわれわれの考察の対象であり，それぞれ Bloch 関数及びエネルギー帯（E. B.）と呼ばれるものである．

$V(x)$ が（1·2）のような不変性をもつことにより解 $\psi(x)$ は一般に

$$T\psi \equiv \psi(Tx) = \lambda(T)\psi(x) \qquad (1\cdot3)$$

（ここに $\lambda(T)$ は T のみに関係し，x に依存しない定数）

のような phase 関係を満足する．T の属する平行移動群 $g^{(s)}$ を S 個の 1 次元平行移動群の直積に分解して考えれば

$$T\psi = \prod T^{n_\nu}\cdot\psi = \prod \lambda^{n_\nu}(T_\nu)\cdot\psi$$

であるから（1·3）のphase因子に対し

$$\lambda(T) = e^{ik\cdot(n_1a_1+n_2a_2+\cdots+n_sa_s)} \qquad (1\cdot4)$$

のように表示することが出来，ここにs次元ベクトル$\mathbf{k}(k_1,\cdots k_s)$は操作Tに無関係な，解$\psi(x)$に固有の定数でなければならない．これを波数ベクトルと呼び，波数ベクトル$\mathbf{k}$によって特徴付けられるψを$\psi_{\mathbf{k}}$と書く．即ち

$$T\psi_{\mathbf{k}} = e^{ik\cdot a_T}\psi_{\mathbf{k}}. \qquad (1\cdot3')$$

かくして方程式（1·1）の解$\psi_{\mathbf{k}}(x)$の任意の点での値は，一つの閉領域即ち特定にえらばれた単位胞内及びその境界での値から（1·3）又は（1·3'）によって完全に定められ，従って楕円型偏微分方程式（1·1）の求められるべき解を構成する基本領域を，任意にえらばれた単位胞$\mathfrak{D}$にとることが出来る．今偏微分方程式（1·1）を，$\mathfrak{D}$及びその境界$\mathfrak{B}$においてのみ考察するならば，phase関係（1·3'）は（1·1）に対する附加条件となり，しかも$x\in\mathfrak{B}$においてのみ有意義である（何となれば$\mathfrak{D}$の内部の点xに対して如何なるTも外部の点にしか移し得ないから）．従って（1·3）は偏微分方程式（1·1）の解に対する充分な境界条件と見做すことが出来る．一方（1·1）の解$\psi(x)$は方程式のパラメタEに依存するからこの境界条件はλとEとの間の或る関数関係，従って又（1·4）より波数ベクトル$\mathbf{k}$とEとの間の関数関係を与えることになる．これを

$$E = E(\mathbf{k}) \tag{1·5}$$

と書くとき，これが即ち求めるE.B.に他ならない．

$s \geqq 2$ のとき，関数 $E(\mathbf{k})$ は多変数の（解析）関数でありその呈示は上述の境界値問題が解析的に表示されなければわれわれの目的を達するほど充分なものとならない．現在このことが成功しているのは $s=1$，即ち1次元のBloch関数とそのE.B.に対してである．その結果1次元のE.B.については臨界点の分類に関し単純且つ definite な結論が得られる．

§2　1次元問題に対する結果

§2·1　1次元 Bloch関数及びそのE.B.は常微分方程式

$$\begin{aligned} &\frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - V(x))\psi = 0 \\ &V(x+a) = V(x) \qquad -\infty < x < \infty \end{aligned} \tag{2·1}$$

の解で，前節に述べた周期境界条件（1·3），即ち今の場合

$$\psi(x+a) = \lambda\psi(x) = e^{ika}\psi(x) \tag{2·2}$$

を満足するものとして定められる．境界値問題（2·2）は常微分方程式の初期値問題の助けにより著しく簡単化され，その結果 $E=E(k)$ の解析的表示が可能となること以下の通りである．

基本領域 $\mathfrak{D}$ は閉区間（0 a），その境界 $\mathfrak{B}$ は二点 0 及び a にえらばれる．点 0 に対する初期条件

$$\psi_1(0)=1 \qquad \psi_1'(0)\left(=\frac{d\psi_1}{dx}_{(x=0)}\right)=0 \tag{2·3a}$$

及び

$$\psi_2(0)=0 \qquad \psi_2'(0)=1 \tag{2·3b}$$

を満す一次独立な解 $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ を base とし，一般解を

$$\psi(x)=\psi_1(x)\alpha+\psi_2(x)\beta$$

で与えるとき，条件 (2·2) は固有値問題

$$\begin{pmatrix} t_{11}(E) & t_{12}(E) \\ t_{21}(E) & t_{22}(E) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}=\lambda(E)\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \tag{2·4}$$

に還元される．何となれば，基本解 $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ に対し平行移動 T_a ($x\to x+a$) を施した結果は再び ψ_1, ψ_2 の線型結合であり，従って ψ_1, ψ_2 の張る二次元線型空間は平行移動群 $\mathcal{G}^{(1)}$ の二次元表現空間，行列 $t=(t_{ij}, E)$ はその表現，そして条件 (2·2) はその一次元既約表現への分解を意味するものであるから。そして $T_a\psi_j=\psi_j(x+a)=\sum\psi_i(x)t_{ij}$ 及びその微分において $x=0$ とすることにより

$$t=(t_{ij}(E))=\begin{pmatrix} \psi_1(a|E) & \psi_2(a|E) \\ \psi_1'(a|E) & \psi_2'(a|E) \end{pmatrix} \tag{2·5}$$

なる表示が得られる．これらの量は，明らかに点 0 に対する初期[illegible] (2·3 ab) を平行移動 T_a により点 a に移した結果と見る [illegible]

微分方程式の解の一義性からパラメタ E の関数として (2·5 a) [illegible]

一意に定められる．次に T_a の二次元表現 t 及びその既約表現の基本的性質を要約しよう．

(1) 基本領域 $\mathfrak{D}(0,a)$ のえらび方は明らかに一義的でない．その任意の平行移動 $\mathfrak{D}(\xi,\xi+a)$ も又基本領域となり得，そこでの基本解 ψ_1^ξ, ψ_2^ξ を base とする表現 $t^{(\xi)}$ は初めの t に対しその相似変換

$$t^{(\xi)} = s^{(\xi)-1}\, t\, s^{(\xi)} \qquad \det s^{(\xi)} = 1 \tag{2·6}$$

である†．表現 t 及びそれに同値な表現すべてに関する不変量は $\mathrm{tr}\, t(E) = t_{11}(E) + t_{22}(E)$, $\det t(E) = t_{11}(E)t_{22}(E) - t_{12}(E)t_{21}(E)$ の二つであり，基本領域のえらび方によらない．

(2) 特に

$$\det\ t(E) = 1 \tag{2·7}$$

何となれば Wronskian $W(\psi_1 \psi_2) \equiv \psi_1 \dfrac{d\psi_2}{dx} - \dfrac{d\psi_1}{dx}\psi_2$ とすれば (2·1) の任意の二つの解に対しそれは定数で，一方 T_a によって $\det t$ 倍されるから．

(3) 表現 t の要素 $t_{ij}(E)$ はパラメタ E の整関数である．（パラメタを含む常微分方程式の初期値問題に関する定理（吉田 1））

(4) 既約化 (2·2) の解析的表示は，以上のことより

---

† 逆に $\det S = 1$ なる任意の正則行列 S を与えるとき，$S^{-1} t S$ がある領域 $\mathfrak{D}(\xi,\xi+a)$ での基本解に関する T_a の表現になるか否かは明らかでない．

$$\lambda^2 - 2\mu(E)\lambda + 1 = 0 \qquad (2\cdot8)$$

$$\mu(E) = \frac{1}{2}\left(t_{11}(E) + t_{22}(E)\right) \quad \cdots$$ $\mathfrak{D}$のえらび方に不変なEの整関数

又は

$$\cos ka = \mu(E). \qquad (2\cdot8')$$

従って二次元表現(2·5)の既約化された結果は，一般に

$$\begin{pmatrix} \lambda(E) & 0 \\ 0 & 1/\lambda(E) \end{pmatrix} \qquad (2\cdot9)$$

と表わされるが，それは(2·8)によって代数的に拡大された整関数である．

(5) 既約化された表現(2·9)の各成分に対応する ψ_1, ψ_2 の線型結合が Bloch 関数に他ならない．それを $\psi(x|E)$, $\tilde{\psi}(x|E)$ で表わし，互いに共役な成分と呼ぶ．即ち

$$T_a\psi = \lambda\psi \qquad T_a\tilde{\psi} = \frac{1}{\lambda}\tilde{\psi} \qquad (2\cdot10)$$

それらは一般に(2·9)と同様な意味で拡大された整関数であり，例えば

$$\begin{aligned} \psi(x|E) &= t_{12}(E)\,\psi_1(x|E) + \left(\lambda(E) - t_{11}(E)\right)\psi_2(x|E) \\ \tilde{\psi}(x|E) &= t_{12}(E)\,\psi_1(x|E) + \left(1/\lambda(E) - t_{11}(E)\right)\psi_2(x|E) \end{aligned} \qquad (2\cdot11)$$

と表わされる．それに対し積 $\tilde{\psi}(x|E)\psi(x|E)$ は最初の意味での整関数である．実際(2·11)の表示のもとに

$$\tilde{\psi}(x|E)\,\psi(x|E)$$

$$= t_{12}(E)\left\{\begin{array}{l} t_{12}(E)\,\psi_1^2(x|E) \\ \quad -(t_{11}(E)-t_{22}(E))\,\psi_1(x|E)\,\psi_2(x|E) \\ \qquad -t_{21}(E)\,\psi_2^2(x|E) \end{array}\right\}. \qquad (2.12)$$

(ロ) 同じく(2.11)の表示のもとに

$$W(\tilde{\psi}\,\psi) = (\lambda(E) - 1/\lambda(E))\,t_{12}(E). \qquad (2.13)$$

§2.2　以下 $E=E(k)$ の関数論に関する基本定理をあげる.

$\lambda = e^{ika}$ は E の整関数 $\mu(E)$ を係数の一つとする代数関数 —(2.8)— である. 逆に λ(又は k)を変数とし, その関数としての $E=E(\lambda)$(又は $E=E(k)$)を考える.

$$\lambda \longrightarrow E: \quad \lambda \longrightarrow \mu = \frac{1}{2}(\lambda + 1/\lambda) \quad (= \cos ka)$$

$$\mu \longrightarrow E = E(\mu)$$

ここに E は整関数 $\mu(E)$ の逆関数として多価解析関数である.

定理 1　λ-平面上の単位円(又は k の実軸)上の各点に対し, E の実数値が対応する. このとき共役成分 $\tilde{\psi}$ は ψ の複素共役 ψ^* に一致する.

証明.　次の公式から結論される.

$$\boxed{(|\lambda|^2 - 1)\,W(\psi\,\psi^*) = (E - E^*)\int_{\xi}^{\xi+a} |\psi(x|E)|^2 dx \qquad (2.14)}$$

これは ψ, ψ^* がそれぞれ微分方程式(2.1)及びその複素共役を満すことから導かれる.(ポテンシャル $V(x)$ は実!)

なお公式(2.14)は E の代数的整関数 $\lambda(E)$, $\psi(x|E)$ に対しても一定の結果を与える.

$\boxed{\text{定理 2.}}$　E の実軸上の各点に対し

(A)　$|\lambda(E)| = 1$ （又は $k = \text{real}$） $\rightleftarrows$ $\mu^2(E) \leq 1$

であるか，又は

(B)　$\psi(x, E) = \text{real}$ 且つ $\mu^2(E) > 1$

$\rightleftarrows$ $\lambda(E) = \text{real} \neq \pm 1$ 即ち $k = \text{pure imaginary}$

のいずれかである．実 E-軸は (A) を満す閉区間と (B) を満す開区間によって掩われる．

$|\lambda| = 1$ に対する実 E-軸上の閉区間は物理的に許されたエネルギースペクトル（許容帯），又 $|\lambda| \neq 1$ なる実 E-軸上の開区間はいわゆる禁止帯を意味する．

$\boxed{\text{定理 3}}$　実 E-軸において許容帯と禁止帯の境界は $\lambda = 1$ （$k = 0$）又は $\lambda = -1$ （$k = \pm\frac{\pi}{a}$）においてのみ起り得る．

$\boxed{\text{定理 4}}$　許容帯の内部において整関数 $\frac{d\mu}{dE}$ は零点をもたない．

$|\lambda(E)| = 1$ 且つ $\frac{d\mu}{dE} = 0$ となるのは $\lambda(E) = \pm 1$（即ち許容帯の境界）の場合に限る．

証明．　次の公式から結論される．

$$\boxed{\int_{\xi}^{\xi+a} \tilde{\varphi}(x|E)\, \psi(x|E)\, dx = -2t_{12}(E) \frac{d\mu}{dE} \qquad (2\cdot15)}$$

導出．

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + (E - V(x))\right]\psi = 0$$

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + (E - V(x))\right]\frac{\partial\psi}{\partial E} = -\psi$$

又

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + (E - V(x))\right]\tilde{\varphi} = 0$$

第二式 × $\tilde{\psi}$ − 第三式 × $\frac{\partial\psi}{\partial E}$

$$\longrightarrow \quad \tilde{\psi}\,\psi = -\frac{d}{dx} W\left(\tilde{\psi}\ \frac{\partial\psi}{\partial E}\right)$$

両辺を $[\xi, \xi+a]$ において積分

$$\int_{\xi}^{\xi+a} \tilde{\psi}\,\psi\, dx = -W\left(\tilde{\psi}\ \frac{\partial\psi}{\partial E}\right)_{\xi+a} + W\left(\tilde{\psi}\ \frac{\partial\psi}{\partial E}\right)_{\xi}$$

$$= -\frac{1}{\lambda}\frac{d\lambda}{dE} W(\tilde{\psi}\,\psi) = -2\frac{d\mu}{dE}\cdot t_{12}(E).$$

以上

公式 (2·15) において $|\lambda| = 1$ とすれば定理1 により $\tilde{\psi} = \psi^*$. その結果, (2·15) の左辺は $|\psi(x|E)|^2$ が恒等的に 0 ならぬ限り 0 でない. ところが $\tilde{\psi}\,\psi$ に対する表式 (2·12) を参照すれば $t_{12}(E) \neq 0$ ならば $\tilde{\psi}\,\psi$ は恒等的に 0 ではない. 故に許容帯において $t_{12}(E) \neq 0$ なる限り $\frac{d\mu}{dE} \neq 0$.
定理の後半は, $|\lambda| = 1$ 且つ $\frac{d\mu}{dE} = 0$ とすれば上述より $t_{12}(E) = 0$ でなければならないが, このとき $\lambda = t_{11}$ 又は t_{22} (real) だから $|\lambda| = 1$ を満すには $\lambda = \pm 1$ 以外にはあり得ない.

証明終

E の或る区間において $\frac{d\mu}{dE} \neq 0$ ならば, 整関数 $\mu(E)$ の逆関数 $E(\mu)$ のその区間における分枝は一価正則となる. 従って

$\boxed{\text{定理 5}}$ 許容帯は整関数 $\mu(E)$ の逆関数の各分枝であり, λ-平面 (又は k-平面) 上 λ の単位円 (k の実軸) を含む一定の領域で一価正則である.

多価解析関数 $E\{\mu(\lambda)\}$ (又は $E\{\mu(k)\}$) の分枝の連結の構造は整関数 $\frac{d\mu(E)}{dE}$ の零点の位置及びその位数から定まる. これについて Kramers (2), Kohn (3), Titchmarsh (4) によれば次のように述べられる.

$\boxed{\text{定理 6}}$ $\frac{d\mu(E)}{dE}$ の零点は E の実軸上にあり, 単純である (一位の零).
その実軸上の位置について

Ⅰ. 二つの隣切する許容帯の中間にある禁止帯（即ち定理2に云うB型の開区間）のそれぞれに一つづつあるか，又は

Ⅱ. 許容帯の境界にある

かのいづれかである．

Ⅰの場合，その零点 E_0 に対する μ-平面上の μ_0 及び λ-平面上の λ_0, $1/\lambda_0$（又は k-平面上の $\pm k_0$）を分枝点として，$\mu(E)$ の逆関数の二分枝 $E_\pm$ が連結する．分枝点の近傍で

$$E_\pm - E_0 = \frac{\pm}{\left(\frac{1}{2}\frac{d^2\mu}{dE^2}\right)_{E_0}^{1/2}}(\mu-\mu_0)^{1/2}$$

$$= \pm\left(\frac{\left(\frac{d\mu}{d\lambda}\right)_{\mu_0}}{\frac{1}{2}\left(\frac{d^2\mu}{dE^2}\right)_{E_0}}\right)^{1/2}(\lambda-\lambda_0)^{1/2}\left(= \pm\alpha(k-k_0)^{1/2}\quad \alpha\neq 0\right) \tag{2·16}$$

Ⅱの場合，二つの許容帯は μ-平面上 $+1$（又は -1）でⅠと同じ連結の構造をもつが，λ-平面又は k-平面では如何なる特異性も示さず

$$E_\pm - E_0 = \pm\frac{1}{\left(\frac{1}{2}\frac{d^2\mu}{dE^2}\right)_{E_0}^{1/2}}(\lambda-1)\quad(=\pm\alpha k) \tag{2·17}$$

即ち連結点において交叉する．Ⅱは禁止帯が0に収縮し，従って二つの許容帯が接触した特別の場合と見ることが出来る．

定理7　方程式（2·1）の解をパラメタ E に対する固有関数と見るならば，共役成分 $\psi(x|E)$ と $\tilde{\psi}(x|E)$ とは $\lambda\neq\pm1$ なる限り二重に縮重して固有関数である．即ち ψ と $\tilde{\psi}$ とは一次独立である．$\lambda=\pm1$ に対しては $\frac{d\mu}{dE}=0$, $\neq 0$ に従って二重縮重，或いは単一（ψ と $\tilde{\psi}$ とが一致）となる．

証明. Eを固定したときのT_aの表現行列$t(E)$(2・5)を対角化する場合, $\lambda \neq \pm 1$ならばその固有ベクトルは一次独立. $\lambda = \pm 1$且つ$\frac{d\mu}{dE} = 0$ならば公式(2・12), (2・15)より$t_{12} = 0$でなければならない. 従って行列tの固有値$\lambda (= 1/\lambda)$はtの対角成分に一致し$\lambda = t_{11} = t_{22} = \pm 1$となるが, それを(2・12), (2・15)に代入すれば

$$2\frac{d\mu}{dE} = -t_{21}\int_{\xi}^{\xi+a} \psi_2^2(x|E)\,dx = 0$$

となるから$t_{21} = 0$でもある. これは$\psi_1(x|E)$, $\psi_2(x|E)$が独立に(2・1)の固有関数且つ$T_a\psi_i = \pm\psi_i$ $(i = 1, 2)$を満すことを示す. 又, $\lambda = \pm 1$且つ$\frac{d\mu}{dE} \neq 0$ならば$t_{21} = 0$とはなり得ず, 従ってψ_1, ψ_2の一方だけが$T_a\psi_i = \pm\psi_i$を満す. 以上

定理 8 一つの許容帯$E_1(k)$ $\left(-\frac{\pi}{a} < k \leqq \frac{\pi}{a}\right)$のスペクトル分布は

$$\rho(E) = \frac{a}{2\pi}\frac{dk(E)}{dE}, \qquad \int_{E_1} \rho(E)\,dE = 1 \tag{2・18}$$

で与えられる. その特異点はE_1の境界にのみ現われ

$$(E - E_l)^{-1/2} \ (M_0\text{-型}), \quad (E_u - E)^{-1/2} \ (M_1\text{-型})$$

の二種類である. Van Hove-Phillips の分類に従えば

$$N_0 = 1, \quad N_1 = 1 \tag{2・19}$$

の場合に相当する. なお二つの許容帯$E_1(k)$, $E_2(k)$が接触する定理6 II

の場合には，両方を一緒にしたものに対し上述のことが成立する．

証明．

$$\rho(E)=\frac{1}{2\pi}\frac{-\frac{d\mu(E)}{dE}}{\sqrt{1-\{\mu(E)\}^2}} \tag{2·20}$$

から明らかである．

§2·3　Bloch 関数の phase に関する解析性

ψ は線型同次微分方程式の解としてその phase に任意性がある．それは k の任意の関数でありうる．それに対し，固体論の立場から，その phase を如何に最も合理的にえらぶべきかという問題が生ずる．（トンネル現象・磁場の問題等．）以下その問題点を略述し一次元の場合の解答を記そう．

$\psi_k(x)$ はしばしば $\psi_k(x)=u_k(x)e^{ikx}$ と書かれ $u_k(x)$（$=x$ の周期関数）は modulating part と呼ばれる．今固体に電場，磁場等の非週期的外場が作用する場合，その dynamics を記述するのにしばしば座標 x を $\psi_k(x)$ の base の上に表示する必要が生ずる． x の k-空間での表示が微分演算子 $i\frac{\partial}{\partial k}$ であるのと同様，x の非週期性は $u_k(x)$ に対する k-微分を含む量として現れる．特に

$$\begin{aligned}X(k)&=i\left(\tilde{u}_k\,\frac{\partial}{\partial k}u_k\right)\\&=i\int_0^a\tilde{u}_k(x)\frac{\partial}{\partial k}u_k(x)\,dx\end{aligned} \tag{2·21}$$

で定義される量が，理論の展開上必要になることが多い．この量は，しかし，Bloch 関数の phase によって変り得る量である．

今 Bloch 関数の一つの取り方（例えば前節（2·11）式）を $\psi_k(x)$，そしてこ

らばれた原点(例えば前節の初期値を与える点)に対し $\psi_k(x)=e^{ikx}u_k(x)$ から作られる(2・21)の量を $X(k)$ とする. phase の変換

$$\psi_k(x)\longrightarrow \Psi_k(x)=\psi_k(x)\,e^{if(k)} \tag{2・22}$$

により, $\Psi_k(x)=e^{ikx}U_k(x)$ から作られる(2・21)の量は

$$i\left(\tilde{U}_k\frac{\partial}{\partial k}U_k\right)=X(k)-\frac{df}{dk} \tag{2・23}$$

で与えられる. 更に原点のえらび方の変更をも許せば, (2・22)で定義される同じ $\Psi_k(x)$ を

$$\Psi_k(x)=e^{ik(x-x_0)}U_k(x,x_0) \tag{2・24}$$

と書くならば

$$i\left(\tilde{U}_k\frac{\partial}{\partial k}U_k\right)=X(k)-x_0-\frac{df}{dk} \tag{2・25}$$

となる. そこで(2・25)の右辺$=0$ という条件を課せばそれにより phase $f(k)$ が(定数を度外視し)固定される. これに関して次の定理が成り立つ.

$\boxed{\text{定理 9}}$ 微分方程式

$$\frac{df}{dk}=X(k)-x_0 \tag{2・26}$$

の解

$$f(k)=\int^k X(k')dk'-x_0k$$

によって変換された Bloch 関数 $\Psi_k(x)$ は k-平面上 $E(k)$ の特異点(前節より多価関数 $E(\mu)$ の分岐点)以外には特異点を持たない.

$\boxed{\text{定理 10}}$ 原点 x_0 の値を適当にえらぶことにより $f(k)$ は逆格子空間に関し

週期的
$$f(k+\frac{2\pi}{a}) = f(k) \tag{2.27}$$

とすることが出来る．従って最初にえらばれたBloch関数 $\psi_k(x)$ が k-週期性を持てば変換された $\Psi_k(x)$ も又 k-週期性を持つ．

以上のことを要約すれば，Bloch関数 $\psi_k(x)$ は次の要件を満すようにえらぶことが出来，その時その phase は定数を除き一義的に定められる．

[1] k-平面上 $E(k)$ の特異点以外に特異点を持たない．

[2] $i(u_k \frac{\partial}{\partial k} u_k) = 0$ 　但し $\psi_k(x) = u_k(x)e^{ik(x-x_0)}$，$x_0$ は適当にえらばれる．

[3] k-週期性 $\psi_{k+\frac{2\pi}{a}} = \psi_k$．

定理9の証明は非常に複雑な計算の結果から得られたもので，ここに述べることは出来ない．（そのような過程を経ず一般的に証明され得るものであれば，それは非常に望ましいことである．）定理10は週期性の条件

$$\int_0^{\frac{2\pi}{a}} X(k)dk - \frac{2\pi}{a}x_0 = 0$$

を満す x_0 が取り得ることを示せばよい．その結果，前節(2.11)式によって構成されたBloch関数が k-週期性を持つことから f で変換された $\Psi_k(x)$ が又 k-週期性を持ち得ることになる．但しその場合 $\psi_k(x) = u_k(x)e^{ikx}$，$\Psi_k(x) = U_k(x)e^{ik(x-x_0)}$ のように一般的には原点をずらす必要がある．

以上のことに関するくわしい内容は他の機会に発表したい．その物理における意義は，ψ_k の k-解析性を保持しつつ(2.21)の如き phase-dependent な量を理論から排除することが出来ることの保証にある．

文　　献

(1) 吉田耕作：「積分方程式論」岩波全書 117 オ1章, オ2章.

(2) H. A. Kramers : Das Eigenwertproblem Im Eindimensionalen Periodischen Kraftfelde, Physica 2 483 (1935).

(3) W. Kohn : Analytic Properties of Bloch Waves, Phys. Rev. 115 809 (1959).

(4) E. C. Titchmarsh : Eigenfunction Expansions Associated With Second-Order Differential Equations II Chapter XXI, Oxford University Press, London (1958).