61908697 佐々木良輔

(1)

解

　波動方程式

$$\psi(x,y,z) = \frac{1}{\sqrt{L^3}}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

固有エネルギー

$$\varepsilon = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}(n_x^2 + x_y^2 + n_z^2)$$

解説

　まず 1 次元の周期境界条件

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

を考える. 一次元の Schrödinger 方程式はポテンシャル $V(x) = 0$ のとき (2) 式である.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = \varepsilon\psi(x) \tag{2}$$

この解は定数 A, B を用いて以下のようになる.

$$\psi(x) = A\ \mathrm{e}^{ikx} + B\ \mathrm{e}^{-ikx} \tag{3}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \tag{4}$$

(1) 式から

$$A\mathrm{e}^{ik(x+L)} + B\mathrm{e}^{-ik(x+L)} = A\mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx} \tag{5}$$

$$A\mathrm{e}^{ikx}(1-\mathrm{e}^{ikL}) = B\mathrm{e}^{-ikx}(\mathrm{e}^{-ikL}-1) \tag{6}$$

これが任意の A, B について成立するため

$$\mathrm{e}^{\pm ikL} = 1 \tag{7}$$

$$\therefore\ k_nL = 2\pi n \qquad (n\in\mathbb{Z}) \tag{8}$$

を満たす. したがって解 $\psi(x)$ は離散的な値を取るのでそれを $\psi_n(x)$ とすると

$$\psi_n(x) = C\ \mathrm{e}^{ik_n x} \tag{9}$$

となる. ここで $n \in \mathbb{Z}$ としたことから A, B を C と置き直した. またエネルギー固有値 ε_n は

$$\begin{aligned}\varepsilon_n &= \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad (10)\\ &= \frac{2\pi^2\hbar^2 n^2}{mL^2} \quad (11)\end{aligned}$$

となる.

次に 3 次元での周期境界条件

$$\begin{cases}\psi(x+L,y,z) = \psi(x,y,z)\\ \psi(x,y+L,z) = \psi(x,y,z)\\ \psi(x,y,z+L) = \psi(x,y,z)\end{cases} \tag{12}$$

を考える. 波動関数に変数分離形, すなわち

$$\psi(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z) \tag{13}$$

を仮定すると各方向について 1 次元と全く同様の議論を行えばいいので波動関数は

$$\begin{aligned}\psi(x,y,z) &= C\ \mathrm{e}^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \quad (14)\\ &= C\ \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \quad (15)\end{aligned}$$

となる. ここで k_x, k_y, k_z は

$$\begin{cases}k_x = \dfrac{2\pi}{L}n_x\\[2ex] k_y = \dfrac{2\pi}{L}n_y\\[2ex] k_z = \dfrac{2\pi}{L}n_z\end{cases} \tag{16}$$

$$\boldsymbol{k} = (k_x, k_y, k_z) \tag{17}$$

である. また規格化条件から

$$\begin{aligned}1 &= \int_0^L\int_0^L\int_0^L \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\ |C\ \mathrm{e}^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}|^2\\ &= |C|^2\int_0^L\int_0^L\int_0^L \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\\ &= |C|^2 L^3\\ \therefore\ C &= \frac{1}{\sqrt{L^3}}\end{aligned}$$

となる. ただし位相は 0 とした. また各方向でのエネルギー固有値 ε_x, ε_y, ε_z は (10) と同様に

$$\begin{cases} \varepsilon_x = \dfrac{2\pi^2\hbar^2 n_x^2}{mL^2} \\ \varepsilon_y = \dfrac{2\pi^2\hbar^2 n_y^2}{mL^2} \\ \varepsilon_z = \dfrac{2\pi^2\hbar^2 n_z^2}{mL^2} \end{cases} \tag{18}$$

となるので, エネルギー固有値 ε は

$$\varepsilon = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}(n_x^2 + x_y^2 + n_z^2) \tag{19}$$

となる.

(2)

解

$$\Omega(E) = \frac{L^3(2mE)^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2\hbar^3}$$

解説

固有エネルギー ε が E 以下となる状態数 $\Omega(E)$ は

$$\varepsilon = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}(n_x^2 + x_y^2 + n_z^2) \leq E \tag{20}$$

$$n_x^2 + x_y^2 + n_z^2 \leq E\frac{mL^2}{2\pi^2\hbar^2} \tag{21}$$

を満たす n_x, n_y, n_z の組の数である. これは $\boldsymbol{n} = (n_x, n_y, n_z)$ 空間において半径 $\frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{mE}{2}}$ の球に含まれる格子点の数と等しい. $\boldsymbol{n}$ 空間には単位体積あたり 1 つの格子点が含まれるので, その数 $\Omega(E)$ は

$$\Omega(E) = \frac{4}{3}\pi\left(\frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{mE}{2}}\right)^3 \div 1 \tag{22}$$

$$= \frac{L^3(2mE)^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2\hbar^3} \tag{23}$$

(3)

解

$$D(E) = \frac{L^3(2m)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2\hbar^3}\sqrt{E}$$

解説

与式から

$$\begin{aligned} D(E)\mathrm{d}E &= \Omega(E+\mathrm{d}E) - \Omega(E) && (24) \\ D(E) &= \frac{\Omega(E+\mathrm{d}E) - \Omega(E)}{\mathrm{d}E} && (25) \\ &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}E}\Omega(E) && (26) \\ &= \frac{L^3(2m)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2\hbar^3}\sqrt{E} && (27) \end{aligned}$$

(4)

解

$$\begin{aligned} \Omega_1(E) &= \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \\ D_1(E) &= \frac{1}{\hbar\omega} \end{aligned}$$

解説

固有エネルギー ε が E 以下となる状態数 $\Omega_1(E)$ は

$$\begin{aligned} \varepsilon = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \leq E && (28) \\ n \leq \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} && (29) \end{aligned}$$

を満たす n の数である．これは n 空間において $\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}$ 以下の格子点の数と等しい．したがって $\Omega_1(E)$ は

$$\Omega_1(E) = \left(\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right) \div 1 \tag{30}$$

$$= \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \tag{31}$$

また状態密度 $D_1(E)$ は

$$D_1(E) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}E}\Omega_1(E) \tag{32}$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega} \tag{33}$$

となる．

(5)

解説

固有エネルギー ε が E 以下となる状態数 $\Omega_3(E)$ は

$$\varepsilon = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \leq E \tag{34}$$

$$n_x + n_y + n_z \leq \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{3}{2} \tag{35}$$

ここで n を

$$n = \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{3}{2} \tag{36}$$

$$E = (n + \frac{3}{2})\hbar\omega \tag{37}$$

とする. ここで $n_x + n_y + n_z = n$ を満たすのは図 1 の格子点である．したがってその数は

$$\sum_{m=0}^{n}(m+1) = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$$

となる. したがって状態数 $\Omega_3(E)$ は

$$\Omega_3(E) = \frac{(n+1)(n+2)}{2} \tag{38}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\left(\frac{E}{\hbar\omega}\right)^2 - \frac{1}{4}\right) \tag{39}$$

となり, 状態密度 $D_3(E)$ は

$$D_3(E) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}E}\Omega_3(E) \tag{40}$$

$$= \frac{E}{\hbar^2\omega^2} \tag{41}$$

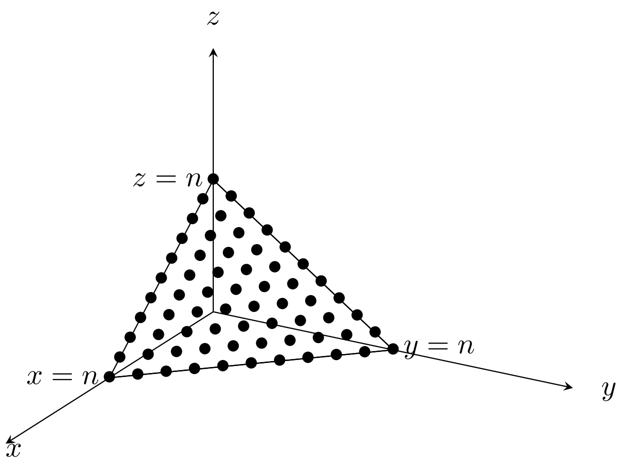

図 1　$n_x + n_y + n_z = n$ を満たす格子点