

(1)

解

波動方程式

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

固有エネルギー

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

解説

まず 1 次元の周期境界条件

$$\psi(x + L) = \psi(x) \quad (1)$$

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.

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

この解は定数 A, B を用いて以下のようになる.

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

$$k = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \quad (4)$$

(1) 式から

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

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

これが任意の A, B について成立するため

$$e^{\pm ikL} = 1 \quad (7)$$

$$\therefore k_n L = 2\pi n \quad (n \in \mathbb{Z}) \quad (8)$$

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

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

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

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad (10)$$

$$= \frac{2\pi^2 \hbar^2 n^2}{mL^2} \quad (11)$$

となる.

次に 3 次元での周期境界条件

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

を考える. 波動関数に変数分離形, すなわち

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z) \quad (13)$$

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

$$\psi(x, y, z) = C e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \quad (14)$$

$$= C e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (15)$$

となる. ここで k_x, k_y, k_z は

$$\begin{cases} k_x = \frac{2\pi}{L} n_x \\ k_y = \frac{2\pi}{L} n_y \\ k_z = \frac{2\pi}{L} n_z \end{cases} \quad (16)$$

$$\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) \quad (17)$$

である. また規格化条件から

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

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 $\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z$ は (10) と同様に

$$\begin{cases} \varepsilon_x = \frac{2\pi^2\hbar^2 n_x^2}{mL^2} \\ \varepsilon_y = \frac{2\pi^2\hbar^2 n_y^2}{mL^2} \\ \varepsilon_z = \frac{2\pi^2\hbar^2 n_z^2}{mL^2} \end{cases} \quad (18)$$

となるので, エネルギー固有値 ε は

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

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

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

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \leq E \frac{mL^2}{2\pi^2\hbar^2} \quad (21)$$

を満たす n_x, n_y, n_z の組の数である. これは $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ 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. \mathbf{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

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

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

(3)

解

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

解説

与式から

$$D(E)dE = \Omega(E + dE) - \Omega(E) \quad (24)$$

$$D(E) = \frac{\Omega(E + dE) - \Omega(E)}{dE} \quad (25)$$

$$= \frac{d}{dE}\Omega(E) \quad (26)$$

$$= \frac{L^3(2m)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2\hbar^3}\sqrt{E} \quad (27)$$

(4)

解

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

解説

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

$$\varepsilon = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \leq E \quad (28)$$

$$n \leq \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \quad (29)$$

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

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

$$= \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \quad (31)$$

また状態密度 $D_1(E)$ は

$$D_1(E) = \frac{d}{dE} \Omega_1(E) \quad (32)$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega} \quad (33)$$

となる。

(5)

解

$$\Omega_3(E) = \frac{1}{2} \left(\left(\frac{E}{\hbar\omega} \right)^2 - \frac{1}{4} \right)$$

$$D_3(E) = \frac{E}{\hbar^2\omega^2}$$

解説

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

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

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

ここで n を

$$n = \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{3}{2} \quad (36)$$

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

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

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

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

となり, 状態密度 $D_3(E)$ は

$$D_3(E) = \frac{d}{dE} \Omega_3(E) \quad (40)$$

$$= \frac{E}{\hbar^2 \omega^2} \quad (41)$$

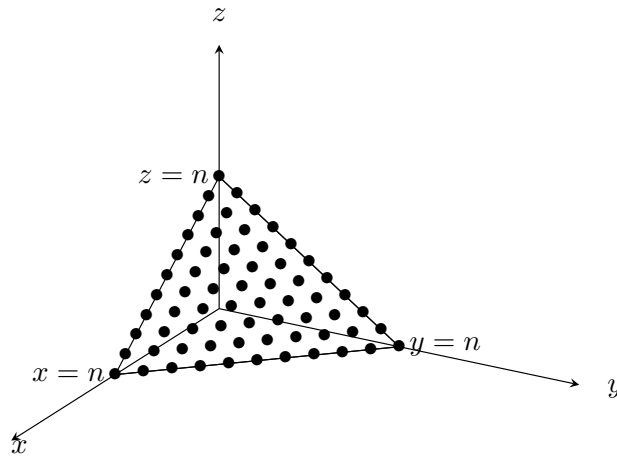


図1 $n_x + n_y + n_z = n$ を満たす格子点