状態密度

波多腰玄一

1 はじめに

光や電子では“状態密度（density of state)”[1〜3)]が定義されている。状態密度はその言葉通り，状態の密度であるが，これは“状態”が離散的で数えられることを意味している。しかし例えば自由空間の光や自由電子における波数kは連続的な物理量なので，状態の数はもちろん，その密度も無限大であるように思える。今回は状態密度について，その定義と，光と電子における状態密度について述べる。状態密度は，光では黒体放射，発光遷移などと関係しており，電子においても，電子のフェルミ-ディラック統計や量子井戸における電子密度の計算の際に極めて重要である。

2 状態密度とは

まず自由空間における進行波を考えると，第1章で示したように，式の上では以下のように表される。

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 \exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} + i\omega t) \tag{1}$$

状態密度を計算するには，この波数kの状態の数を求めなければならない。しかし式(1)を考える限り，これは無限大である。

現実には完全な自由空間というものはない。必ずどこかに何らかの境界がある。この境界が十分遠方にあるとみなして，それを自由空間として近似している。そこで有限の大きさの空間を考えてみると，境界条件で決まる“モード”が現れる。このモードの数は数えることができる。

まず簡単のため1次元でL_xの大きさの空間を考えてみよう。また境界条件として周期境界条件を考えることにする。この条件は任意のxに対して

$$\exp\left(-ik_x[x+L_x]\right) = \exp\left(-ik_x x\right) \tag{2}$$

が成り立つことである[†1]。これからk_xは以下で表される。

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x \tag{3}$$

ここでn_xは整数である（負の整数も含む）[†2]。すなわち，k_xには図1に示したような離散的な値のみが許される。

まずL_x=L_1としてみよう。このときk_xと$k_x+\Delta k$の間にある単位長さあたりのモードの数を$g(k_x)\Delta k$とすると

$$g(k_x)\Delta k = \frac{k_x}{2\pi / L_1}\Delta k \frac{1}{L_1} = \frac{k_x}{2\pi}\Delta k \tag{4a}$$

次に長さを2倍の$2L_1$にするとどうなるだろうか。式(4a)のL_1が$2L_1$になるので

$$g(k_x)\Delta k = \frac{k_x}{2\pi / (2L_1)}\Delta k \frac{1}{2L_1} = \frac{k_x}{2\pi}\Delta k \tag{4b}$$

同様に3倍の大きさになると

$$g(k_x)\Delta k = \frac{k_x}{2\pi / (3L_1)}\Delta k \frac{1}{3L_1} = \frac{k_x}{2\pi}\Delta k \tag{4c}$$

---

†1 構造が周期的であることと，解の形が式(2)のように表されることとは異なる。第26章のブロッホの定理で説明したように，ポテンシャルがL_xの周期を持っていても，解の形は必ずしも式(2)の形にはならないことに注意。

†2 周期境界条件ではなく，大きさL_xの共振器の中のモードを数えるやり方もある。その場合には$k_x = (\pi / L_x) n_x$と半分の値になるが，$n_x \geq 0$の領域のみを考えることになる。状態密度は周期境界条件の場合と同じ結果が得られる。