

注意これは講義ノートではありません。計算の要点を抜粋しただけのものです。

5-A ゾンマーフェルトの公式 (有限温度におけるフェルミ粒子の物理量の平均値)

一般的に、平均値は、 $\langle A \rangle = \sum_{\text{状態}s} A(s) \times f(\varepsilon_s) = \int_0^{+\infty} f(\varepsilon) \underbrace{AD(\varepsilon)}_{\equiv g(\varepsilon)} d\varepsilon$ なので、

$I = \int_0^{+\infty} f(\varepsilon)g(\varepsilon)d\varepsilon$ を計算すればよい。以下、計算の要点を示す。

1) 部分積分する $= f(\varepsilon)G(\varepsilon)|_0^{+\infty} - \int_0^{+\infty} f'(\varepsilon)G(\varepsilon)d\varepsilon$ 但し、 $G(\varepsilon) \equiv \int_0^\varepsilon d\varepsilon g(\varepsilon)$ とおく。

$$I = \underbrace{f(+\infty)}_0 G(+\infty) - \underbrace{f(0)}_0 G(0) - \int_0^{+\infty} f'(\varepsilon)G(\varepsilon)d\varepsilon$$

2) $f'(\varepsilon)$ は $\varepsilon \approx \mu(T)$ の付近でのみ有限の値で、離れると殆どゼロであることに気付く。よって、 $\varepsilon \approx \mu(T)$ の付近のみを考えればよい。

$G(\varepsilon) = G(\mu) + (\varepsilon - \mu)G'(\mu) + \frac{1}{2}(\varepsilon - \mu)^2 G''(\mu) + \dots$ と $\varepsilon \approx \mu(T)$ の周りで Taylor 展開。

3) 積分範囲を $-\infty \sim +\infty$ に広げてしまう。

$f'(\varepsilon)$ は $\varepsilon = -\infty \sim 0$ の範囲では殆どゼロなので広げて影響がない。

$$= -\int_{-\infty}^{+\infty} f'(\varepsilon)G(\mu)d\varepsilon - \int_{-\infty}^{+\infty} f'(\varepsilon)(\varepsilon - \mu)G'(\mu)d\varepsilon - \int_{-\infty}^{+\infty} f'(\varepsilon)\frac{1}{2}(\varepsilon - \mu)^2 G''(\mu)d\varepsilon - \dots$$

4) G は引数が μ のみで ε が入っていないので積分の外に出る。

$$= \underbrace{-G(\mu) \cdot f(\varepsilon)|_{-\infty}^{+\infty}}_{G(\mu) \times 1} - G'(\mu) \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{f'(\varepsilon)(\varepsilon - \mu)}_{\text{even} \times \text{odd} = \text{odd}} d\varepsilon - G''(\mu) \int_{-\infty}^{+\infty} f'(\varepsilon)\frac{1}{2}(\varepsilon - \mu)^2 d\varepsilon - \dots$$

$\rightarrow 0$

$$= G(\mu) + G''(\mu) \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} -f'(\varepsilon)\frac{1}{2}(\varepsilon - \mu)^2 d\varepsilon}_{=J \text{ と置く}} - \dots$$

5) 積分変数を $\beta(\varepsilon - \mu) \equiv x$ と変換する

$$J = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} -f'(\varepsilon)(\varepsilon - \mu)^2 d\varepsilon = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\beta}{(e^{-x} + 1)(e^{+x} + 1)} \left(\frac{x}{\beta}\right)^2 d\left(\frac{x}{\beta}\right)$$

$$= \frac{1}{2\beta^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^2 dx}{(e^{-x} + 1)(e^{+x} + 1)} = \frac{(k_B T)^2}{2} \times \text{定数} \quad \mu(T) \text{ が消えてくれた}$$

5-B 定積分 $K_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^n dx}{(e^{-x} + 1)(e^{+x} + 1)}$ の計算

$$K = \int \frac{1 - ikx + \frac{1}{2}(-ikx)^2 + \frac{1}{6}(-ikx)^3 + \dots}{(e^{-x} + 1)(e^{+x} + 1)} dx = K_0 - ikK_1 - \frac{1}{2}k^2 K_2 + \frac{1}{6}i k^3 K_3 + \dots$$

なので、とりあえず K を計算しておいて、後から $-\frac{1}{2}J = k^2 J_2 \Big|_{k=1}$ と、 k^2 の項を拾えばよい。

ここで、 $\int_{-\infty}^{+\infty} dx = \int_C dz$ 但し、 C は、上半平面を回る半円の経路

$$\text{よって留数定理より、} K = \int_C \frac{e^{ikz} dz}{(e^{-z} + 1)(e^{+z} + 1)} = 2\pi i \sum C \text{ 内の留数}$$

5-C 留数を求める

分母 = 0 と置くと、 $e^{\pm z} = -1$ より、 $z = \pm(2n+1)i\pi$

分母の二つのかっこの中が同時にゼロになるので二次の留数。

N 次の留数の求め方は、 $\text{Res}(z_0^{(N)}) = \frac{1}{(N-1)!} (f(z) \cdot (z-z_0)^N)^{(N-1)}$ なので二次の場合は、

$$\text{Res}(z_n^{(2)}) = \left(\frac{e^{ikz}(z-z_n)^2}{(-)(+)} \right)' \Bigg|_{z=z_n} = e^{ikz}(z-z_n) \frac{(ik(z-z_n)+2)(-)(+)-(z-z_n)(e^{+z}-e^{-z})}{(-)^2(+)^2}$$

であり、 $z \rightarrow z_n + \delta$ を代入すれば、 $e^{\pm(z_n+\delta)} \rightarrow -1 \cdot e^{\pm\delta} \rightarrow -(1 \pm \delta)$ に注意して、

$$= e^{-k\pi(2n+1)} \delta \cdot \frac{(ik\delta+2)(\delta)(-\delta) - \delta(-2\delta)}{(+\delta)^2(-\delta)^2} = e^{-k\pi(2n+1)} \frac{-ik\delta^4}{\delta^4} = -ik e^{-k\pi(2n+1)}$$

C の積分経路内に入っている留数は、 $z_1 \sim z_\infty$ なのでこれらの和をとると、

$$K = 2\pi i \sum C \text{内の留数} = 2\pi i \sum_{n=0 \sim \infty} -ike^{-k\pi(2n+1)} = 2\pi k \sum_{n=0 \sim \infty} (e^{-2k\pi})^n \cdot e^{-k\pi}$$

$$\text{等比級数の和を計算して、} = 2\pi k (1 + X + X^2 + \dots) e^{-k\pi} = \frac{2\pi k}{1-X} e^{-k\pi} = \frac{2\pi k e^{-k\pi}}{1 - e^{-2k\pi}}$$

5-D k^2 の係数を拾う

$$K = \int \frac{e^{-ikx} dx}{(e^{-x}+1)(e^{+x}+1)} \text{ の中の } k^2 \text{ の係数 } \frac{1}{-1/2} \text{ が求める答 } \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^2 dx}{(e^{-x}+1)(e^{+x}+1)} \text{ である。}$$

$$K = \frac{2\pi k}{e^{+k\pi} - e^{-k\pi}} \underset{\text{近似}}{\approx} \frac{2\pi k}{2 \cdot k\pi + 2 \cdot \frac{1}{6} k^3 \pi^3 + \dots} \approx \frac{1}{1 + k^2 \pi^2 / 6} = 1 - \frac{k^2 \pi^2}{6} \text{ なので、}$$

$$k^2 \text{ の係数は } \frac{\pi^2}{-1/2} \text{ は } \frac{\pi^2}{3} \text{ となる。よって } J = \frac{(k_B T)^2}{2} \times \frac{\pi^2}{3}$$

最終結果：物理量の平均値は、

$$\langle A \rangle = -\int_0^{+\infty} f'(\varepsilon) G(\varepsilon) d\varepsilon = G(\mu) + \frac{\pi^2}{6} G''(\mu) k_B^2 T^2 \quad : \text{Sommerfeld の公式}$$

5-E 粒子数と化学ポテンシャル(適用例)

$$\langle N \rangle = 2 \int_0^{+\infty} f(\varepsilon) D(\varepsilon) d\varepsilon = G(\mu) + \frac{\pi^2}{6} G''(\mu) k_B^2 T^2$$

この場合、 $G(\varepsilon) = 2 \int_0^\varepsilon d\varepsilon D(\varepsilon)$ である。定義より、 $G'' = 2D'$ 及び $G(\varepsilon_F) = \langle N \rangle$

$$\langle N \rangle = G(\mu(T)) + \frac{\pi^2}{6} D'(\mu(T)) k_B^2 T^2$$

ここで、化学ポテンシャルの温度によるずれを $\mu(T) = \mu(0) + \underbrace{\Delta\mu}_{=AT+BT^2+\dots}$ と書くと、

低温では $\Delta\mu$ は非常に小さいので、テイラー展開して代入して、

$$\langle N \rangle = \langle N \rangle + D(\varepsilon_F) \cdot \Delta\mu + \underbrace{O(\Delta\mu^2)}_{A \neq 0 \text{ なら } \sim T^2} + \frac{\pi^2}{6} D'(\varepsilon_F) k_B^2 T^2 + \underbrace{O(T^2 \Delta\mu)}_{T^3}$$

ここで、 $A \neq 0$ ($\Delta\mu$ が T の項を含む) と仮定すると $\Delta\mu = BT^2 + \dots$ となり矛盾。

$$\text{よって } A = 0 \text{ となり、} 0 = D(\varepsilon_F) \cdot \Delta\mu + \frac{\pi^2}{6} D'(\varepsilon_F) k_B^2 T^2$$

三次元自由電子の場合

$$\Delta\mu = -\frac{\pi^2}{6} \frac{D'_0}{D_0} k_B^2 T^2 \quad : \text{温度が上がると化学ポテンシャルは減少して行く。}$$