

Sommerfeld expansion

2019 年 4 月 20 日

1 Introduction

1 粒子状態の粒子数 n_τ の取りうる値は量子力学によると次の 2 つの場合しかない:

- $n_\tau = 0, 1$ in **Fermi–Dirac ensembles**,
- $n_\tau = 0, 1, 2, \dots, \infty$ in **Bose–Einstein ensembles**.

Fermi 統計に従う粒子を **Fermi** 粒子、Bose 統計に従う粒子を **Bose** 粒子という。

Fermi 粒子が独立に運動している場合、一つのエネルギー準位 ε にある粒子の数は

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1}$$

で与えられる。ここで、 μ は化学ポテンシャルである。Fermi 分布に従う物理量 $g(\varepsilon)$ の統計平均は

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$$

であり、特に低温付近では、

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_{-\infty}^{\mu} g(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2 g^{(1)}(\mu)}{6} (kT)^2 + \frac{7\pi^4 g^{(3)}(\mu)}{360} (kT)^4 + \dots$$

となることが知られている。この展開を低温展開 (**Sommerfeld expansion**) といい、いろいろな応用が知られている。

2 Proof

はじめに、次の公式を証明する。

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\varepsilon) \frac{df}{d\varepsilon} d\varepsilon = \varphi(\mu) + \frac{\pi^2 \varphi^{(2)}(\mu)}{6} (kT)^2 + \frac{7\pi^4 \varphi^{(4)}(\mu)}{360} (kT)^4 + \dots$$

ただし、 $\varphi(-\infty) = 0$ とする。

$\varphi(\varepsilon)$ を $\varepsilon = \mu$ まわりで展開して、

$$\varphi(\varepsilon) = \varphi(\mu) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\varphi^{(k)}(\mu)}{k!} (\varepsilon - \mu)^k$$

代入すると、

$$- \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\varepsilon) \frac{df}{d\varepsilon} d\varepsilon = -\varphi(\mu) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df}{d\varepsilon} d\varepsilon - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\varphi^{(k)}(\mu)}{k!} \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon - \mu)^k \frac{df}{d\varepsilon} d\varepsilon$$

となる。ここで初項について、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{df}{d\varepsilon} d\varepsilon = [f]_{-\infty}^{\infty} = -1$$

である。また、第 2 項の k が奇数の場合については $\frac{df}{d\varepsilon}$ が μ 周りで偶関数であることから、

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon - \mu)^k \frac{df}{d\varepsilon} d\varepsilon = 0$$

である。最後に、 k が偶数のときは、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon - \mu)^k \frac{df}{d\varepsilon} d\varepsilon &= -\frac{1}{k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\varepsilon - \mu)^k e^{\beta(\varepsilon - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1)^2} d\varepsilon \\ &= -(k_B T)^k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^k e^x}{(e^x + 1)^2} dx \\ &= -2k!(1 - 2^{-k+1})\zeta(k)(k_B T)^k \end{aligned}$$

である (付録 A を見よ)。ここで、 $\zeta(z)$ は **Riemann zeta** 関数

$$\zeta(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^z}$$

である。これより、

$$- \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\varepsilon) \frac{df}{d\varepsilon} d\varepsilon = \varphi(\mu) + \sum_{r=1}^{\infty} 2(1 - 2^{1-2r})\zeta(2r)\varphi^{(2r)}(\mu)(k_B T)^{2r}$$

となる。特に、 $r = 1, 2$ を考えると、

$$- \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\varepsilon) \frac{df}{d\varepsilon} d\varepsilon = \varphi(\mu) + \frac{\pi^2 \varphi^{(2)}(\mu)}{6} (kT)^2 + \frac{7\pi^4 \varphi^{(4)}(\mu)}{360} (kT)^4 + \dots$$

となることが示された。

次に、

$$g(\varepsilon) = \varphi'(\varepsilon)$$

を代入すると、

$$\begin{aligned} - \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\varepsilon) \frac{df}{d\varepsilon} d\varepsilon &= -[\varphi(\varepsilon)f(\varepsilon)]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \varphi'(\varepsilon)f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon)f(\varepsilon) d\varepsilon, \\ \varphi(\mu) &= \int_{-\infty}^{\mu} \varphi'(\varepsilon) d\varepsilon = \int_{-\infty}^{\mu} g(\varepsilon) d\varepsilon \end{aligned}$$

であるから、

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_{-\infty}^{\mu} g(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2 g^{(1)}(\mu)}{6} (kT)^2 + \frac{7\pi^4 g^{(3)}(\mu)}{360} (kT)^4 + \dots$$

となり、低温展開を示すことが出来た。

付録 A Integral formulas

低温展開の証明の中で出てきた積分公式をいくつか示しておく。

- $$\int_0^{\infty} \frac{x^n e^x}{(e^x + 1)^2} dx = n!(1 - 2^{1-n})\zeta(n)$$

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} \frac{x^n e^x}{(e^x + 1)^2} dx \\ &= \int_0^{\infty} x^n \frac{d}{dx} \left(\frac{-1}{e^x + 1} \right) dx = n \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1}}{e^x + 1} dx \\ &= n \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1} e^{-x}}{1 + e^{-x}} dx = n \int_0^{\infty} x^{n-1} e^{-x} \left[\sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k e^{-kx} \right] dx \\ &= n \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \int_0^{\infty} x^{n-1} e^{-(k+1)x} dx = n \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \int_0^{\infty} \frac{t^{n-1}}{(k+1)^{n-1}} e^{-t} \frac{dt}{k+1} \\ &= n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k+1)^n} \int_0^{\infty} t^{n-1} e^{-t} dt = n\Gamma(n) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k+1)^n} \\ &= n! \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k+1)^n} = n! \left(\sum_{l:\text{odd}} \frac{1}{l^n} - \sum_{l:\text{even}} \frac{1}{l^n} \right) \\ &= n! \left(\sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^n} - 2 \sum_{l:\text{even}} \frac{1}{l^n} \right) = n!(1 - 2^{1-n}) \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^n} = n!(1 - 2^{1-n})\zeta(n) \end{aligned}$$

- $$\zeta(2n) = (-1)^{n+1} \frac{B_{2n}(2\pi)^{2n}}{2(2n)!}$$

有名事実 (?) なので気が向いたら証明するかも。

参考文献

[1] 久保亮五編『大学演習 熱学・統計力学』修訂版（裳華房, 1998）