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**,
- $n_\tau = 0, 1, 2, \cdots, \infty$ 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

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

であり、特に低温付近では、

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

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。

$$\boxed{-\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\varepsilon) \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\varepsilon} \mathrm{d}\varepsilon = \varphi(\mu) + \frac{\pi^2 \varphi^{(2)}(\mu)}{6}(kT)^2 + \frac{7\pi^4 \varphi^{(4)}(\mu)}{360}(kT)^4 + \cdots .}$$

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、

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

となる。ここで初項について、

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

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

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

である。最後に、k が偶数のときは、

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

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、

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

となる。特に、$r = 1, 2$ を考えると、

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

となることが示された。

次に、

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

を代入すると、

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

であるから、

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

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らか示しておく。

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

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

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

有名事実 (?) なので気が向いたら証明するかも。