

# ゾンマーフェルト展開

中嶋慧

2022年10月29日

## 概要

ゾンマーフェルト展開とフェルミ・ディラック積分を議論する。

## 目次

1 背景	1
2 ゾンマーフェルト展開	2
3 フェルミ・ディラック積分	4
4 化学ポテンシャルの低温展開	6
A 図3の描き方	8

## 1 背景

独立粒子描像のフェルミ粒子を考える。エネルギーを  $\varepsilon$ , 状態密度を  $D(\varepsilon)$  とすると、逆温度  $\beta$ , 化学ポテンシャル  $\mu$  のとき、全粒子数  $N$  と内部エネルギー  $U$  は、

$$N = \int_0^{\infty} d\varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon), \quad (1.1)$$

$$U = \int_0^{\infty} d\varepsilon D(\varepsilon) \varepsilon f(\varepsilon) \quad (1.2)$$

で与えられる。ここで、

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} \quad (1.3)$$

はフェルミ分布である。3次元自由粒子に対しては、

$$D(\varepsilon) = D_0 \varepsilon^{1/2} \quad (1.4)$$

となる。

## 2 ゾンマーフェルト展開

一般に、

$$I := \int_0^\infty d\varepsilon g(\varepsilon)f(\varepsilon) \quad (2.1)$$

を低温の場合に近似計算することを考える。今、

$$G(\varepsilon) := \int_0^\varepsilon d\varepsilon' g(\varepsilon') \quad (2.2)$$

とすると、

$$\begin{aligned} I &= \int_0^\infty d\varepsilon \frac{dG}{d\varepsilon} f(\varepsilon) \\ &= [G(\varepsilon)f(\varepsilon)]_0^\infty - \int_0^\infty d\varepsilon G(\varepsilon) \frac{df}{d\varepsilon} \\ &= - \int_0^\infty d\varepsilon G(\varepsilon) \frac{df}{d\varepsilon} \end{aligned} \quad (2.3)$$

である。\$G(0) = 0\$ を使い、\$\lim\_{\varepsilon \to \infty} G(\varepsilon)f(\varepsilon) = 0\$ を仮定した。\$\frac{df}{d\varepsilon}\$ は \$\varepsilon = \mu\$ に鋭いピークをもち、そこから離れると急速に 0 になる。そこで、

$$G(\varepsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\varepsilon - \mu)^n}{n!} G^{(n)}(\mu) \quad (2.4)$$

とテーラー展開し、積分の下端を \$-\infty\$ とすると、

$$I \approx J := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{G^{(n)}(\mu)}{n!} J_n, \quad (2.5)$$

$$J_n := - \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon (\varepsilon - \mu)^n \frac{df}{d\varepsilon} \quad (2.6)$$

となる。\$J\_n\$ は、

$$J_n = - \frac{1}{\beta^n} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^n \frac{d}{dx} \frac{1}{e^x + 1} \quad (2.7)$$

と書け、\$n\$ が奇数なら 0 となる。\$n = 0\$ で \$J\_0 = 1\$ である。\$n\$ が 2 以上の偶数なら、

$$- \int_{-\infty}^{\infty} dx x^n \frac{d}{dx} \frac{1}{e^x + 1} = 2n \int_0^{\infty} dx \frac{x^{n-1}}{e^x + 1} \quad (2.8)$$

となる。ここで、

$$\frac{1}{e^x + 1} = e^{-x} \sum_{m=0}^{\infty} (-e^{-x})^m \quad (2.9)$$

と

$$\int_0^{\infty} dx x^{n-1} e^{-(m+1)x} = \frac{(n-1)!}{(m+1)^n} \quad (2.10)$$

より、 $n = 2, 4, \dots$  に対して、

$$\begin{aligned} J_n &= \frac{2n!}{\beta^n} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(m+1)^n} \\ &= \frac{2n!}{\beta^n} (1 - 2^{-n+1}) \zeta(n), \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\zeta(s) := \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^s} \quad (2.12)$$

を得る。よって、

$$J = G(\mu) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\beta^{2n}} (1 - 2^{-2n+1}) \zeta(2n) G^{(2n)}(\mu) \quad (2.13)$$

である。

特に、

$$g(\varepsilon) = \varepsilon^\alpha \quad (2.14)$$

とすると、

$$I_\alpha := \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^\alpha f(\varepsilon) = \frac{\mu^{\alpha+1}}{\alpha+1} \left[ 1 + \frac{\pi^2(\alpha+1)\alpha}{6(\beta\mu)^2} + \frac{7\pi^4(\alpha+1)\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)}{360(\beta\mu)^4} + \dots \right] + K_\alpha \quad (2.15)$$

となる。 $K_\alpha$  は誤差項である。

### 3 フェルミ・ディラック積分

$F_\alpha := \beta^{\alpha+1} I_\alpha$  をフェルミ・ディラック積分という。  $y = \mu\beta$  とすると、

$$F_\alpha = \int_0^\infty dx \frac{x^\alpha}{e^{x-y} + 1} \quad (3.1)$$

である。いま、

$$F_\alpha(y) = \frac{y^{\alpha+1}}{\alpha+1} C_\alpha(y) \quad (3.2)$$

と書き、誤差項を無視した  $C_\alpha(y)$  の  $1/y^{2n}$  までの近似を  $c_n(y)$  と書くと、

$$c_1(y) = 1 + \frac{\pi^2(\alpha+1)\alpha}{6y^2}, \quad (3.3)$$

$$c_2(y) = c_1(y) + \frac{7\pi^4(\alpha+1)\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)}{360y^4}, \quad (3.4)$$

$$c_3(y) = c_2(y) + \frac{31\pi^6(\alpha+1)\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)(\alpha-3)(\alpha-4)}{15120y^6}, \quad (3.5)$$

$$c_4(y) = c_3(y) + \frac{127\pi^8(\alpha+1)\alpha(\alpha-1)\cdots(\alpha-6)}{604800y^8} \quad (3.6)$$

である。  $y$  を固定したとき、  $c_n(y)$  は  $n \rightarrow \infty$  で発散する (この展開は漸近である)。  $\alpha = 1/2$  に対する数値計算を図 1 に示す。なお、

$$F_\alpha(y) = \frac{y^{\alpha+1}}{\alpha+1} c_n(y) + R_n(y) \quad (3.7)$$

とおくと、

$$R_n(y) = \cos(\pi\alpha)F_\alpha(-y) + y^{\alpha+1} \frac{2\sin(\pi\alpha)\Gamma(\alpha+1)\Gamma(2n-\alpha+1)}{\pi y^{2n+2}} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^{j-1}}{j^{2n+2}} A_{2n-\alpha}(jy), \quad (3.8)$$

$$A_s(y) := \frac{1}{\Gamma(s+1)} \text{P} \int_0^\infty dx \frac{x^s e^{-x}}{1 - (x/y)^2} \quad (3.9)$$

である [1]。  $\Gamma(x)$  はガンマ関数である。  $y \rightarrow \infty$  で  $A_s(y) \rightarrow 1$  である。 図 2 に  $A_s(y)$  のグラフを  $s = 1.5, 3.5, 5.5, 7.5$  について示した。

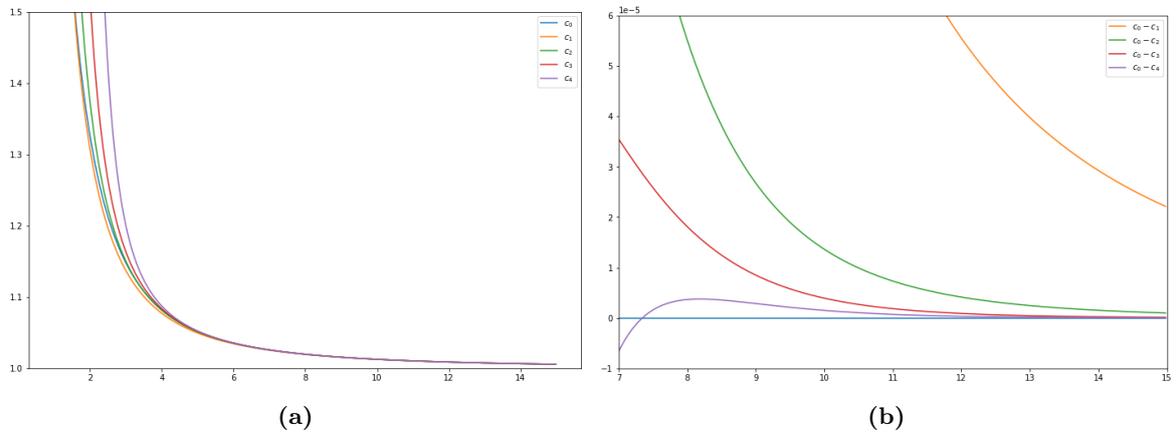


図 1: (a)  $c_0 := C_{1/2}(y), c_1, c_2, c_3, c_4$ , (b)  $c_0 - c_1, c_0 - c_2, c_0 - c_3, c_0 - c_4$  for  $\alpha = 1/2$ . 横軸は  $y$ .

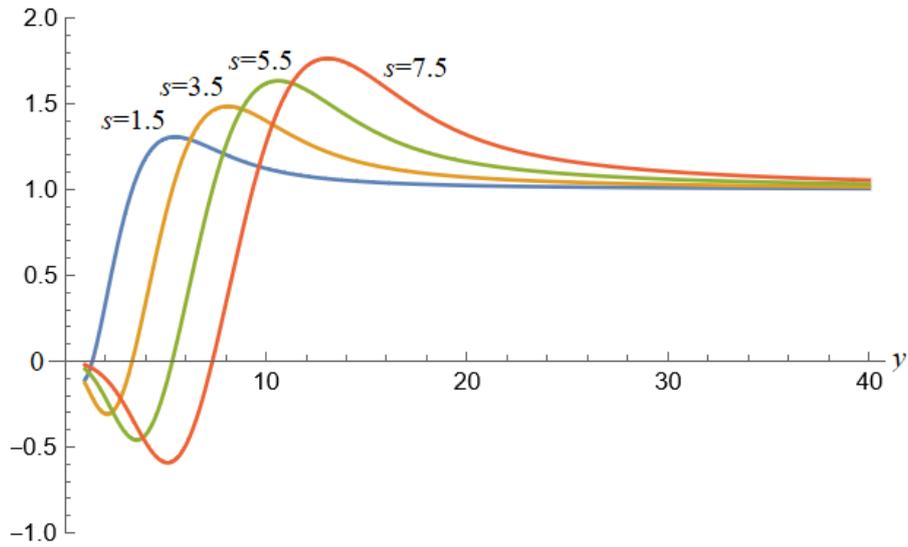


図 2:  $A_{1.5}, A_{3.5}, A_{5.5}$  and  $A_{7.5}$ .

## 4 化学ポテンシャルの低温展開

本節は [2] を参考にした。

$d$ 次元の自由粒子に対しては、

$$D(\varepsilon) = D_0 \varepsilon^{d/2-1} \quad (4.1)$$

となる。まず絶対程度では、 $\mu = \mu_0$  として、

$$N = \frac{2}{d} D_0 \mu_0^{d/2} \quad (4.2)$$

である。有限温度では、

$$N = \frac{2}{d} D_0 \mu^{d/2} \left[ 1 + \frac{\pi^2 d(d-2)}{24(\beta\mu)^2} + \frac{7\pi^4 d(d-2)(d-4)(d-6)}{5760(\beta\mu)^4} + \dots \right] \quad (4.3)$$

である。よって、

$$\begin{aligned} \left(\mu/\mu_0\right)^{-d/2} &= 1 + \frac{\pi^2 d(d-2)}{24(\beta\mu)^2} + \frac{7\pi^4 d(d-2)(d-4)(d-6)}{5760(\beta\mu)^4} + \dots \\ &= 1 + \frac{\pi^2 d(d-2)}{24(\beta\mu_0)^2} \left(\mu/\mu_0\right)^{-2} + \frac{7\pi^4 d(d-2)(d-4)(d-6)}{5760(\beta\mu_0)^4} \left(\mu/\mu_0\right)^{-4} + \dots \end{aligned} \quad (4.4)$$

である。今、

$$\mu/\mu_0 = 1 + \frac{A_2}{(\beta\mu_0)^2} + \frac{A_4}{(\beta\mu_0)^4} + \dots \quad (4.5)$$

とすると、

$$\left(\mu/\mu_0\right)^{-d/2} = 1 - \frac{1}{(\beta\mu_0)^2} \frac{d}{2} A_2 + \frac{1}{(\beta\mu_0)^4} \left[ -\frac{d}{2} A_4 + \frac{d(d+2)}{8} A_2^2 \right] + \dots \quad (4.6)$$

であり、

$$(4.4) \text{ 右辺} = 1 + \frac{\pi^2 d(d-2)}{24(\beta\mu_0)^2} \left[ 1 - \frac{2}{(\beta\mu_0)^2} A_2 + \dots \right] + \frac{7\pi^4 d(d-2)(d-4)(d-6)}{5760(\beta\mu_0)^4} + \dots \quad (4.7)$$

なので、

$$-\frac{d}{2} A_2 = \frac{\pi^2 d(d-2)}{24}, \quad (4.8)$$

$$-\frac{d}{2} A_4 + \frac{d(d+2)}{8} A_2^2 = -\frac{\pi^2 d(d-2)}{12} A_2 + \frac{7\pi^4 d(d-2)(d-4)(d-6)}{5760} \quad (4.9)$$

を得る。これより、まず、

$$A_2 = -\frac{\pi^2(d-2)}{12} \quad (4.10)$$

を得る。また、

$$\begin{aligned} -\frac{d}{2} A_4 &= \frac{7\pi^4 d(d-2)(d-4)(d-6)}{5760} - \frac{\pi^2 d(d-2)}{12} A_2 - \frac{d(d+2)}{8} A_2^2 \\ &= \pi^4 \left[ \frac{7d(d-2)(d-4)(d-6)}{5760} + \frac{d(d-2)^2}{12^2} - \frac{d(d+2)(d-2)^2}{8 \cdot 12^2} \right], \end{aligned} \quad (4.11)$$

$$A_4 = -\pi^4 \frac{(d-2)(d-6)(d-9)}{1440} \quad (4.12)$$

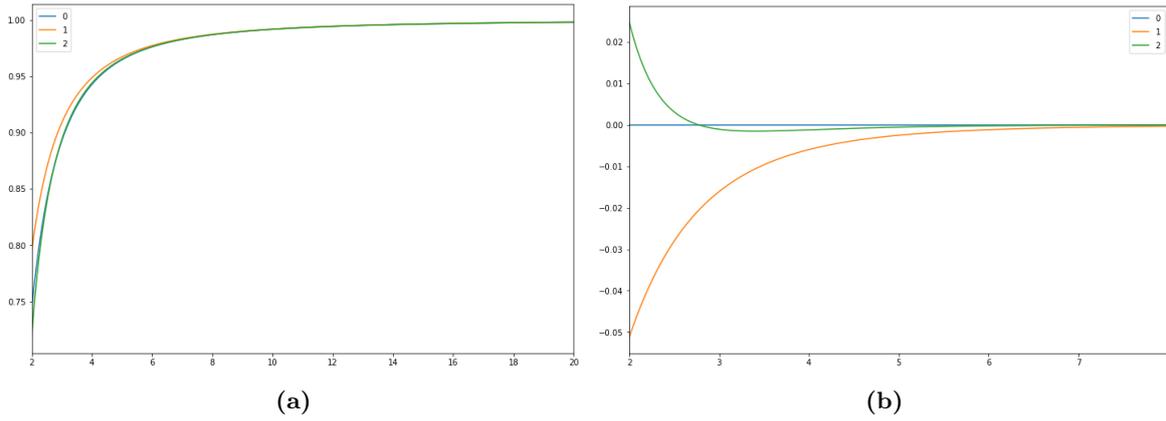


図 3: (a)  $\mu/\mu_0$  (水色),  $\tilde{\mu}_1$  (オレンジ),  $\tilde{\mu}_2$  (緑) (b)  $\mu/\mu_0 - \tilde{\mu}_1$  (オレンジ),  $\mu/\mu_0 - \tilde{\mu}_2$  (緑). 横軸は  $\beta\mu_0$ .

$$\begin{aligned}
 \text{2次の係数} &= -\frac{a1 \pi^2}{6} \left[ -\frac{\pi^2}{12} \right] \left[ -0.822467 \right] \\
 \text{4次の係数} &= -\frac{1}{360} (-2 + a1) a1 (-7 + 2 a1) \pi^4 \left[ -\frac{\pi^4}{80} \right] \left[ -1.21761 \right] \\
 \text{6次の係数} &= -\frac{(-4 + a1) a1 (-558 + 729 a1 - 222 a1^2 + 16 a1^3) \pi^6}{45 360} \left[ -\frac{247 \pi^6}{25 920} \right] \left[ -9.16139 \right] \\
 \text{8次の係数} &= -\frac{(-6 + a1) a1 (-137 160 + 264 426 a1 - 166 527 a1^2 + 43 108 a1^3 - 4516 a1^4 + 144 a1^5) \pi^8}{5 443 200} \left[ -\frac{16 291 \pi^8}{777 600} \right] \left[ -198.788 \right] \\
 \text{10次の係数} &= -\frac{1}{119 750 400} (-8 + a1) (-2 + a1) a1 \\
 &\quad (6 438 600 - 11 851 734 a1 + 7 082 499 a1^2 - 1 897 316 a1^3 + 243 492 a1^4 - 13 872 a1^5 + 256 a1^6) \pi^{10} \left[ -\frac{1487 \pi^{10}}{15 360} \right] \left[ -9066.06 \right] \\
 \text{12次の係数} &= -\frac{1}{5 884 534 656 000} (-10 + a1) a1 \\
 &\quad (-4 619 568 723 840 + 12 183 176 230 128 a1 - 12 597 991 755 372 a1^2 + 6 810 045 832 860 a1^3 - \\
 &\quad 2 136 734 722 125 a1^4 + 403 924 556 394 a1^5 - 45 714 304 788 a1^6 + \\
 &\quad 2 937 377 816 a1^7 - 93 945 824 a1^8 + 1 061 376 a1^9) \pi^{12} \left[ -\frac{4 497 731 813 \pi^{12}}{5 878 656 000} \right] \left[ -707 154. \right]
 \end{aligned}$$

図 4: 化学ポテンシャルの低温展開の係数 ( $\alpha = d/2 - 1$ )

である。よって、

$$\mu/\mu_0 = 1 - \frac{\pi^2(d-2)}{12(\beta\mu_0)^2} - \pi^4 \frac{(d-2)(d-6)(d-9)}{1440(\beta\mu_0)^4} + \dots \quad (4.13)$$

であり、 $d = 3$  とすると、

$$\mu/\mu_0 = 1 - \frac{\pi^2}{12(\beta\mu_0)^2} - \frac{\pi^4}{80(\beta\mu_0)^4} + \dots \quad (4.14)$$

である。図 3 に  $d = 3$  の場合の  $\mu/\mu_0$  と

$$\tilde{\mu}_1 := 1 - \frac{\pi^2}{12(\beta\mu_0)^2}, \quad (4.15)$$

$$\tilde{\mu}_2 := 1 - \frac{\pi^2}{12(\beta\mu_0)^2} - \frac{\pi^4}{80(\beta\mu_0)^4} \quad (4.16)$$

の数値計算を示す (付録 A に図の描き方を示す)。図 4 に化学ポテンシャルの低温展開の係数を示す。

## A 図3の描き方

まず、

$$y_s = y_0 + s\Delta y \quad (\text{A.1})$$

に対して数列  $\{y_s\}_{s=0}^N$  を考え、

$$C_s := C_\alpha(y_s) \quad (\text{A.2})$$

を計算する。ただし、 $\alpha = d/2 - 1 = 1/2$  である。次に、

$$\tilde{\beta}_k = \tilde{\beta}_0 + k\Delta\tilde{\beta} \quad (\text{A.3})$$

に対して数列  $\{\tilde{\beta}_k\}_{k=0}^n$  を考える。 $\tilde{\beta}_k$  は  $\mu_0\beta$  に対応する。 $k$  ごとに、

$$x_s^{(k)} := y_s / \tilde{\beta}_k \quad (\text{A.4})$$

を考え、

$$f_s^{(k)} := (x_s^{(k)})^{\alpha+1} C_s - 1 \quad (\text{A.5})$$

とし、 $|f_s^{(k)}|$  が最小になる  $s$  を  $s_k$  とする。3点  $(x_{s_k-1}^{(k)}, f_{s_k-1}^{(k)})$ ,  $(x_{s_k}^{(k)}, f_{s_k}^{(k)})$ ,  $(x_{s_k+1}^{(k)}, f_{s_k+1}^{(k)})$  を通る2次曲線が  $f=0$  と交差する点  $P, Q$  の  $x$  座標を  $x_P, x_Q$  とする。 $x_P, x_Q$  のうち  $x_{s_k}^{(k)}$  と近い方を  $x_k^*$  とする。数列  $\{\tilde{\beta}_k\}_{k=0}^n$  に対して  $\{x_k^*\}_{k=0}^n$  をプロットする事で、図3を得た。 $\Delta y = 0.005$ ,  $\Delta\tilde{\beta} = 0.01$  とした。

## 参考文献

- [1] R. B. Dingle, "Asymptotic expansions and converging factors III. Gamma, psi and polygamma functions, and Fermi-Dirac and Bose-Einstein integrals.", Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences **244**, 484 (1958).
- [2] 武智公平 「Sommerfeld 展開の導出」  
<https://t.co/kxnFq5UwPW>