５ $\boxed{\text{注意}}$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、$\langle A\rangle = \sum_{\text{状態s}} A(\mathrm{s})\times f(\varepsilon_{\mathrm{s}}) = \int_0^{+\infty} f(\varepsilon)\underbrace{AD(\varepsilon)}_{\equiv g(\varepsilon)\text{とおく}}d\varepsilon$ 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 $= f(\varepsilon)G(\varepsilon)\Big|_0^{+\infty} - \int_0^{+\infty} f'(\varepsilon)G(\varepsilon)d\varepsilon$　但し、$G(\varepsilon)\equiv\int_0^{\varepsilon} d\varepsilon\, g(\varepsilon)$ とおく。

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

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。

$\therefore G(\varepsilon)=G(\mu)+(\varepsilon-\mu)G'(\mu)+\frac{1}{2}(\varepsilon-\mu)^2G''(\mu)+\cdots$ 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。

$\because$ $f'(\varepsilon)$ は $\varepsilon=-\infty\sim0$ の範囲では殆どゼロなので広げても影響がない。

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

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。

$$=\underbrace{-G(\mu)\cdot f(\varepsilon)\Big|_{-\infty}^{+\infty}}_{G(\mu)\times1}-G'(\mu)\int_{-\infty}^{+\infty}\underbrace{f'(\varepsilon)(\varepsilon-\mu)}_{\substack{\text{even}\times\text{odd}=\text{odd}\\ \to 0}}d\varepsilon-G''(\mu)\int_{-\infty}^{+\infty} f'(\varepsilon)\tfrac{1}{2}(\varepsilon-\mu)^2d\varepsilon-\cdots$$

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

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

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

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

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

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

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

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

よって留数定理より、$K=\int_{\mathrm{C}}\frac{e^{ikz}dz}{(e^{-z}+1)(e^{+z}+1)}=2\pi i\sum$ C 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、 $\mathrm{Res}\left(z_0^{(N)}\right)=\frac{1}{(N-1)!}\left(f(z)\cdot(z-z_0)^N\right)^{(N-1)}$ なので二次の場合は、

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

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

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

等比級数の和を計算して、$=2\pi k\left(1+X+X^2+\cdots\right)e^{-k\pi}=\dfrac{2\pi k}{1-X}e^{-k\pi}=\dfrac{2\pi k\,e^{-k\pi}}{1-e^{-2k\pi}}$

5-D　k^2 の係数を拾う

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

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

k^2 の $\dfrac{\text{係数}}{-1/2}$ は、$\dfrac{\pi^2}{3}$ となる。よって　$J=\dfrac{(k_{\mathrm{B}}T)^2}{2}\times\dfrac{\pi^2}{3}$

◎最終結果：物理量の平均値は、

$\langle A\rangle=-\displaystyle\int_0^{+\infty}f'(\varepsilon)G(\varepsilon)\,d\varepsilon=G(\mu)+\tfrac{\pi^2}{6}G''(\mu)\,k_{\mathrm{B}}^2T^2$　　　：Sommerfeld の公式

5-E　粒子数と化学ポテンシャル（適用例）

$$\langle N\rangle=2\int_0^{+\infty}f(\varepsilon)\,D(\varepsilon)\,d\varepsilon=G(\mu)+\tfrac{\pi^2}{6}G''(\mu)\,k_{\mathrm{B}}^2T^2$$

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 $G(\varepsilon_{\mathrm{F}})=\langle N\rangle$

$$\therefore\langle N\rangle=G(\mu(T))+\frac{\pi^2}{6}D'(\mu(T))\,k_{\mathrm{B}}^2T^2$$

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

$$\langle N\rangle=\langle N\rangle+D(\varepsilon_{\mathrm{F}})\cdot\Delta\mu+\underbrace{O\left(\Delta\mu^2\right)}_{A\neq0\ \text{なら}\sim T^2}+\frac{\pi^2}{6}D'(\varepsilon_{\mathrm{F}})k_{\mathrm{B}}^2T^2+\underbrace{O\left(T^2\Delta\mu\right)}_{T^3}$$

ここで、$A\neq0$（$\Delta\mu$ が T の項を含む）と仮定すると $\Delta\mu=BT^2+\cdots$ となり矛盾。

よって $A=0$ となり、$0=D(\varepsilon_{\mathrm{F}})\cdot\Delta\mu+\dfrac{\pi^2}{6}D'(\varepsilon_{\mathrm{F}})k_{\mathrm{B}}^2T^2$

三次元自由電子の場合

$\therefore\Delta\mu=-\dfrac{\pi^2}{6}\dfrac{D_0'}{D_0}k_{\mathrm{B}}^2T^2$　：温度が上がると化学ポテンシャルは減少して行く。