

**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。

### 6-A 平均エネルギー

Sommerfeld の公式:  $\int_0^{+\infty} f(\varepsilon)g(\varepsilon)d\varepsilon = G(\mu) + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 G''(\mu) + \dots$  但し  $G(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon d\varepsilon g(\varepsilon)$

$$g(\varepsilon) = \varepsilon D(\varepsilon) \text{ とおくと、 } E = 2 \int_0^{+\infty} \underbrace{f(\varepsilon)}_{=g(\varepsilon)} \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon = 2G(\mu) + 2 \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 G''(\mu) + \dots$$

ここに、前回の結果[5-E]  $\mu(T) = \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{6} \frac{D'_0}{D_0} (k_B T)^2$  を代入して、 $O(T^2)$  まで残すと、

$$E = 2G(\varepsilon_F) + \underbrace{G'(\varepsilon_F)}_{D_0 \varepsilon_F} \cdot \underbrace{2\Delta\mu}_{-\frac{\pi^2 D'_0}{3 D_0} (k_B T)^2} + \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 (D_0 + \varepsilon_F D'_0) + O(T^4) = 2G(\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{3} k_B^2 T^2 D_0 + \dots$$

ここで  $2G(\varepsilon_F) = \int_0^{\varepsilon_F} 2D(\varepsilon)\varepsilon d\varepsilon = 2 \int_{k < k_F} \varepsilon d\vec{k} = 2 \int_0^{k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \cdot 4\pi k^2 dk = \frac{\pi 4 \hbar^2 k_F^5}{5m}$  を代入すれば、

$$E = \frac{3}{5} N \varepsilon_F + \frac{\pi^2}{3} D_0 (k_B T)^2 + \dots \text{ を得る。}$$

### 6-B 比熱

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = \underbrace{\frac{2\pi^2}{3} D_0 k_B^2 T}_\gamma \quad \text{注) 状態密度にスピンの寄与を入れている場合は } \frac{\pi^2}{3}$$

$$D_0 = \frac{3N}{2\varepsilon} \text{ に注意すると、 } C = \frac{\pi^2}{3} \frac{3N}{2\varepsilon_F} k_B^2 T = \pi^2 \frac{k_B T}{\varepsilon_F} \underbrace{\left( \frac{N k_B}{2} \right)}_{\text{古典的理想気体の比熱}}$$

フェルミ面近傍の、エネルギー幅  $T$  程度の電子しか比熱に寄与していない。

低いエネルギーのところにいる電子は、排他律のために上へ上がれない

熱エネルギーを与えられても受け取れない

### 6-C 高温での化学ポテンシャル (三次元自由電子の状態密度を $A\sqrt{\varepsilon}$ と置いた)

$$N = 2 \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon) = \int_0^\infty \frac{d\varepsilon A\sqrt{\varepsilon}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} \approx \int_0^\infty d\varepsilon A\sqrt{\varepsilon} e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} = A e^{\beta\mu} \int_0^\infty d\varepsilon \sqrt{\varepsilon} e^{-\beta\varepsilon}$$

$$\sqrt{\varepsilon} \equiv x \text{ とおいて、 } = A e^{\beta\mu} \int_0^\infty x e^{-\beta x^2} dx^2 = 2A e^{\beta\mu} \int_0^\infty x^2 e^{-\beta x^2} dx = 2A e^{\beta\mu} \frac{\sqrt{\pi/\beta}}{4\beta} = \frac{\sqrt{\pi} A e^{\beta\mu}}{2\beta^{3/2}}$$

$$\text{ここで、 } \frac{\sqrt{\pi/\beta}}{2} = \int_0^\infty e^{-\beta x^2} dx = x e^{-\beta x^2} \Big|_0^\infty - \int_0^\infty x(-2\beta x) e^{-\beta x^2} dx = 2\beta \int_0^\infty x^2 e^{-\beta x^2} dx \text{ より、}$$

$$\therefore \frac{\sqrt{\pi}}{4\beta^{3/2}} = \int_0^\infty x^2 e^{-\beta x^2} dx \text{ となることを使った。}$$

$$A \text{ を求めると、 } N = 2 \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} A\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = \frac{2}{3} A \varepsilon_F^{3/2} \text{ より } A = \frac{3}{2} N \varepsilon_F^{-3/2}$$

$$e^{\beta\mu} = \frac{4(\beta\varepsilon_F)^{3/2}}{3\sqrt{\pi}} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left( \frac{\varepsilon_F}{k_B T} \right)^{3/2} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left( \frac{T_F}{T} \right)^{3/2}$$

$T \rightarrow \infty$  で、右辺 0 であるから、 $\mu \rightarrow$  負の方向にどんどん大きくなる

### 6-D Fermion の大分配関数

$$Z_G = \sum_{n_0, n_1, \dots, n'_0, n'_1, \dots=0,1} e^{-\beta(n_0\varepsilon_0+n'_0\varepsilon_0+n_1\varepsilon_1+n'_1\varepsilon_1+\dots-\mu(n_0+n'_0+n_1+n'_1+\dots))} = \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_0-\mu)}\right)^2 \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_1-\mu)}\right)^2 \dots$$

但し、 $n_j, n'_j$  は、スピン、のそれぞれの占有数

### 6-E ヘルムホルツの自由エネルギー

$$[1-H]より、PV = k_B T \log Z_G = k_B T \sum_j 2 \log \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)}\right) = 2k_B T \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon D(\varepsilon) \log \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\right)$$

$$\text{部分積分で、} PV = 2k_B T \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon N(\varepsilon) \frac{\beta e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}}{1 + e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}} = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon N(\varepsilon) \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon N(\varepsilon) f(\varepsilon)$$

但し、 $N(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon d\varepsilon' D(\varepsilon')$ ,  $Q(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon d\varepsilon' N(\varepsilon') = \int_{-\infty}^\varepsilon d\varepsilon' N(\varepsilon')$  とおいた。

これに Sommerfeld の公式を適用すると、 $PV = 2Q(\mu) + 2 \cdot \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \cdot Q''(\mu)$  となるので、

$\mu(T) = \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{6} \frac{D'_0}{D_0} (k_B T)^2$  を代入して、テイラー展開すると、

$$\text{第一項： } Q(\mu) = Q(\underbrace{\mu(T=0)}_{\varepsilon_F} + \underbrace{\delta\mu}_{(\mu-\varepsilon_F)}) = Q(\varepsilon_F) + \delta\mu \underbrace{Q'(\varepsilon_F)}_{N(\varepsilon_F)} + \dots \approx Q(\varepsilon_F) + (\mu - \varepsilon_F) N(\varepsilon_F)$$

$$\text{第二項： } 2 \cdot \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \cdot \underbrace{Q''(\mu)}_{D(\mu)} \approx \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 \cdot D(\varepsilon_F)$$

ここで、状態密度  $2D(\varepsilon) = A\sqrt{\varepsilon}$  但し、 $A = \frac{3}{2} N \varepsilon_F^{-3/2}$  より、 $N(\varepsilon)$ ,  $Q(\varepsilon)$  を求めれば、

$$2N(\varepsilon_F) = N, \quad Q(\varepsilon_F) = \frac{2}{5} B \varepsilon_F^{5/2} = \frac{2}{5} \left( \frac{N}{2\varepsilon_F^{3/2}} \right) \varepsilon_F^{5/2} = \frac{N\varepsilon_F}{5} \text{ なので、代入して、}$$

$$F = \mu N - PV = \mu N - \left( \mu N - \frac{3}{5} N \varepsilon_F + \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 D(\varepsilon_F) \right) = \frac{3}{5} N \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 D_0$$

絶対零度では確かに、 $F \rightarrow \langle E \rangle = \frac{3}{5} N \varepsilon_F$  に一致 [4-E]

### 6-F エントロピー

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{2\pi^2}{3} k_B^2 D_0 T \text{ となり、確かに、絶対零度でゼロになる。 (熱力学第三法則)}$$

c.f. 古典理想気体では負に発散 無限に小さく縮まってしまうので当然。

ザッカーテトロードの公式

$$\frac{S}{N} = k_B \left( \log \frac{V}{N \lambda_T^3} + \frac{5}{2} \right), \quad \lambda_T = \sqrt{\frac{h^2}{2\pi m k_B T}} \quad \text{熱的ドブロイ波長}$$