# Sommerfeld 展開

(作成日)2007/7/8
物理講義室・改 管理人
http://shrcat.blog91.fc2.com/
のまネコ (量産型)

まず,Sommerfeld 展開を証明する準備として Euler の定数, ガンマ関数, ゼータ関数を定義します.

[Euler の定数]

$$\gamma \equiv \lim_{n\to\infty}\left[\sum_{k=1}^{n}\frac{1}{k}-\ln n\right]=0.5772156\cdots \tag{1}$$

見れば分かると思いますが, 調和級数と対数関数が無限の極限では同じ振舞いをするということを示しています.

[ガンマ関数]

$$\Gamma(z)\equiv\int_0^\infty t^{z-1}\exp(-t)dt \tag{2}$$

上の式が一般的なガンマ関数の定義式ですが, 良く計算に用いられる形はガンマ関数の数表示 $\Gamma(z+1)=z\Gamma(z)$ や $\Gamma(z+1)=z!$ です. 二式とも (2) から導くことができます.(証明略)

[ゼータ関数]

$$\zeta(z)\equiv\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k^z} \tag{3}$$

ここでは, 深くは触れませんが物性の計算をしていると良く出てくる関数です.$z$ が偶数の場合は解析的に計算することが出来ます.($\zeta(2)=\frac{\pi^2}{6},\zeta(4)=\frac{\pi^4}{90}$) さて, 次に後で使うので以下の積分を計算しておきます.

[積分公式]

$$\int_0^\infty \frac{x^p}{(e^x+1)(e^{-x}+1)}dx=(1-\frac{1}{2^{p-1}})\zeta(p)\Gamma(p) \tag{4}$$

(証明)
まず,$-\frac{d}{dx}(e^x+1)^{-1}=\frac{1}{(e^x+1)(e^{-x}+1)}$ として (4) 式に代入し, 部分積分を行う..

$$\int_0^\infty x^p\left[-\frac{d}{dx}(e^x+1)^{-1}\right]dx=\left[\frac{-x^p}{(e^x+1)}\right]_0^\infty+p\int_0^\infty\frac{x^{p-1}}{e^x+1}dx \tag{5}$$

右辺第一項はゼロとなるので, 第二項を変形し計算を進めます.

$$p\int_0^\infty\frac{x^{p-1}}{e^x+1}dx=p\int_0^\infty x^{p-1}\left[\frac{e^{-x}}{e^{-x}+1}\right]dx \tag{6}$$

ここで, 以下のような級数展開を考えます.

$$
\begin{aligned}
(1+t)^{-1} &= 1 - t + t^2 + \cdots \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} t^{n-1} \qquad (t \to e^{-x})
\end{aligned}
\tag{7}
$$

これを用いると (6) 式は

$$
(6) = p \int_0^{\infty} x^{p-1} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} e^{-nx} dx \tag{8}
$$

と表せます. 更に上の積分に対して $nx = t, dx = \frac{1}{n} dt$ と変数変換を行うと

$$
(8) = p \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \left(\frac{1}{n}\right)^p \int_0^{\infty} t^{p-1} e^{-t} dt \tag{9}
$$

ここで, ガンマ関数の定義より.$\Gamma(p) = \int_0^{\infty} t^{p-1} e^{-t}$ なので (9) 式は

$$
(9) = p \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \left(\frac{1}{n}\right)^p \Gamma(p) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \left(\frac{1}{n}\right)^p \Gamma(p+1) \tag{10}
$$

$n$ についての和を取るために次のような計算を考えます.(少しトリッキーです)

$$
\begin{aligned}
\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \left(\frac{1}{n}\right)^p &= 1^p - \left(\frac{1}{2}\right)^p + \left(\frac{1}{3}\right)^p - \cdots \\
&= \left[1^p + \left(\frac{1}{2}\right)^p + \cdots\right] - 2\left[\left(\frac{1}{2}\right)^p + \left(\frac{1}{4}\right)^p + \cdots\right] \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^p} - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)^p}
\end{aligned}
\tag{11}
$$

よって,(10) 式は

$$
(10) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{1}{n^p} - 2\frac{1}{(2n)^p}\right] \Gamma(p+1) = \left[1 - \frac{1}{2^{p-1}}\right] \zeta(p) \Gamma(p) \tag{12}
$$

ただし, ゼータ関数の定義式 $\zeta(p) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^p}$ を用いました. (証終)

さて, 前置きが長くなりましたが, 証明するための道具が揃ったので本題の Sommefeld 展開の証明に入りたいと思います.

[Sommerfeld 展開]

$$\int_{\varepsilon_0}^{\infty} g(\varepsilon) f_F(\varepsilon) d\varepsilon \approx \int_{\varepsilon_0}^{\infty} g(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} g'(\mu)(k_B T)^2 \tag{13}$$

($f_F(\varepsilon)$:Fermi 分布関数,$g(\varepsilon)$:任意関数)

(証明)

$f_F(\varepsilon) = \frac{1}{[e^{\beta(\varepsilon-\mu)}]}$ $\mu$ : 化学ポテンシャル まず,$g(\varepsilon) = \frac{d\phi}{d\varepsilon}$,$\phi(\varepsilon_0) = 0$ となるような $\phi$ を定義します.

$$\begin{aligned}(13)\ 左辺 = \int_{\varepsilon_0}^{\infty} f_F(\varepsilon) \frac{d\phi(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon &= \left[\frac{\phi(\varepsilon)}{1+e^{\beta\varepsilon}}\right]_0^{\infty} - \int_0^{\infty} \phi(\varepsilon) \frac{d f_F(\varepsilon)}{d\varepsilon} \\ &= \int_{\varepsilon_0}^{\infty} \phi(\varepsilon) \left[\frac{d f_F(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon\right]\end{aligned} \tag{14}$$

ここで,$\phi(\varepsilon)$ を $\varepsilon = \mu$ まわりで展開します.

$$\phi(\varepsilon) = \phi(\mu) + (\varepsilon-\mu)\left[\frac{d\phi(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right]_{\varepsilon=\mu} + \frac{(\varepsilon-\mu)^2}{2!}\left[\frac{d^2\phi(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right]_{\varepsilon=\mu} + \cdots \tag{15}$$

これを (14) 式の最右辺に代入すると ($\varepsilon_0 \to -\infty$)

$$(14) = \phi(\mu) \int_{-\infty}^{\infty} - \frac{d f_F(\varepsilon)}{d\varepsilon} + \phi'(\mu) \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon-\mu) \left[-\frac{d f_F(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right] + \phi'(\mu) \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon-\mu)^2 \left[-\frac{d f_F(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right] d\varepsilon + \cdots \tag{16}$$

今,(16) 式に於いて, 積分区間が原点対称なので奇関数はゼロとなり
$\to \int_{\infty}^{\infty} (\varepsilon-\mu)^{2m} \frac{d f_F(\varepsilon)}{d\varepsilon}$ $(m = 1, 2, \cdots)$ の偶数項のみ残ります. また, 第一項の $\frac{d f_F(\varepsilon)}{d\varepsilon}$ は全区間で積分すると 1 になります. このようなことを踏まえると (16) 式は

$$(16) = \phi(\mu) + \frac{\phi'}{2!} \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon-\mu)^2 \left[-\frac{d f_F(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right] d\varepsilon + \cdots + \frac{\phi^{2m}(\mu)}{2m!} \int_{\infty}^{-\infty} (\varepsilon-\mu)^{2m} \left[-\frac{d f_F(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right] d\varepsilon + \cdots \tag{17}$$

$2m$ 次の項に $\frac{f_F(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{-\beta}{(e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1)(e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}+1)}$ を代入し第二項以降を和でまとめると

$$(17) = \phi(\mu) + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\phi^{2m}(\mu)}{2m!} \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon-\mu)^{2m} \frac{\beta}{(e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1)(e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}+1)} \tag{18}$$

更に第二項に対して $x = \beta(\varepsilon-\mu), dx = \beta\varepsilon$ と変数変換を行います.

$$(17) = \phi(\mu) + 2\sum_{m=1}^{\infty} \frac{\phi^{2m}(\mu)}{2m!} \int_0^{\infty} \left(\frac{x}{\beta}\right)^{2m} \frac{1}{(e^x+1)(e^{-x}+1)} dx \tag{19}$$

ここで第二項に最初に計算しておいた公式を用いると.

$$\begin{aligned}(19) &= \phi(\mu) + 2\sum_{m=1}^{\infty}\frac{\phi^{2m}(\mu)}{2m!}\frac{(1-2^{1-2m})}{\beta^{2m}}\zeta(2m)\Gamma(2m+1) \\ &= \phi(\mu) + 2\sum_{m=1}^{\infty}\phi^{2m}(\mu)\frac{(1-2^{1-2m})}{\beta^{2m}}\zeta(2m)\end{aligned} \tag{20}$$

ただし, 変形の際 $\Gamma(2m+1) = 2m!$ の関係を用いました. また,$\frac{d\phi}{d\varepsilon} = g(\varepsilon)$ を両辺積分することにより $\phi(\varepsilon) = \int_{\varepsilon_0}^{\infty} g(\varepsilon)d\varepsilon$ となるので,

$$(20) = \int_0^{\mu} g(\varepsilon)d\varepsilon + 2\sum_{m=1}^{\infty} g^{2m-1}(\mu)\frac{(1-2^{1-2m})}{\beta^{2m}}\zeta(2m) \tag{21}$$

となります. 特に $m=1$ のとき

$$\int_{\varepsilon_0}^{\infty} g(\varepsilon) f_F(\varepsilon)d\varepsilon \approx \int_{\varepsilon_0}^{\infty} g(\varepsilon)d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}g'(\mu)(k_BT)^2 \tag{22}$$

ただし,$\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}, \beta = \frac{1}{k_BT}$ 　(証終)