演習 1-B.　理想 Fermi 気体の定積比熱

金属中の電子の簡単なモデルとして自由電子気体を考える

a) 3 次元空間では電子密度（電子数/体積）n, 温度 T ,$\alpha = -\mu/k_{\mathrm{B}}T$ の間には次の関係があることを示せ。

$$\int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{e^{x+\alpha}+1}\,dx - \frac{h^3}{4\pi(2mk_{\mathrm{B}})^{3/2}}\frac{n}{T^{3/2}} = 0 \tag{1}$$

b) Gauss-Legendre 積分を用いて

$$\int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{e^{x}+1}\,dx \tag{2}$$

を計算せよ。さらに上の積分で積分変数を $t = x^{1/2}$ で変数変換した後に同じことを行え。変数変換した方が精度がよいのはなぜか？

c) (1) 式の左辺を α の関数と考え,Newton-Raphson 法を用いて与えられた T に対し α を求めるプログラムを書け。次に T を変えてこの方法をくり返し行うことにより μ と T の関係をグラフにプロットせよ。

d) 単位体積あたりの定積比熱 C_{V} は次のように書けることを示せ。

$$C_{\mathrm{V}} = \frac{4\pi k_{\mathrm{B}}}{h^3}(2mk_{\mathrm{B}}T)^{3/2}\left\{\frac{5}{2}\int_0^\infty \frac{x^{3/2}}{e^{x+\alpha}+1}\,dx - \frac{3}{2}T\left(\frac{\partial\alpha}{\partial T}\right)_n\int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{e^{x+\alpha}+1}\,dx\right\} \tag{3}$$

e) c) 方法で α 及び $(\frac{\partial\alpha}{\partial T})_n$ 求め, さらに Gauss-Legendre 積分を使って単位体積あたりの定積比熱を求めよ。そして C_{V} と T の関係をグラフにプロットせよ。

f) μ の温度についての 2 次までの展開式および、C_{V} についての 1 次までの展開式を解析的に求め、数値計算で求めた値と比較せよ。
(ヒント：必要ならば、次の公式を用いよ。

$$\frac{d}{d\alpha}\int_a^b f(\alpha,x)\,dx = \int_a^b \frac{\partial}{\partial\alpha}f(\alpha,x)\,dx \tag{4}$$

$$\int_a^b f(x)g'(x)\,dx = \big[f(x)g(x)\big]_{x=a}^b - \int_a^b f'(x)g(x)\,dx \tag{5}$$

)