

問 1. 絶対零度における理想フェルミ気体

一辺 L の立方体の中に閉じ込められた N 個のスピン $1/2$ の Fermi 粒子からなる、理想 Fermi 気体について考えよう。

- (a) 絶対零度では、化学ポテンシャル（これを Fermi 準位という）以下の各一粒子状態を、スピンの向きも区別して、一個ずつ粒子が占有し、それ以上の状態を占有する粒子はない。一粒子状態密度 $D(\varepsilon)$ は No.5 の問 4 と同様であるが、粒子の持っているスピンの自由度により、2 倍になる。絶対零度での Fermi 準位 μ_0 を N, L , 粒子の質量 m を用いて表わせ。また、絶対零度で内部エネルギー E_0 が以下になることを示せ。

$$E_0 = \frac{3}{5} N \mu_0$$

- (b) 絶対零度での、圧力を p 、系の体積を $V (= L^3)$ とすると以下が成り立つことを示せ。

$$pV = \frac{2}{5} N \mu_0$$

- (c) 金属 Li の伝導電子を理想 Fermi 気体であると仮定して、Fermi 温度 $T_0 \equiv \mu_0/k_B$ および、絶対零度での圧力を計算せよ。ただし、電子密度 $N/V = 4.56 \times 10^{22}/\text{cm}^3$ とする。

問 2. フェルミ分布関数の性質

- (a) フェルミ分布関数 $f(\varepsilon) = 1/(e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1)$ について、
- (i) その概形を ε の関数として示せ。 β を変えるとどのように形状が変化するか？
 - (ii) $-df(\varepsilon)/d\varepsilon$ の概形を ε の関数として示せ。また、 $\lim_{\beta \rightarrow \infty} -df/d\varepsilon = \delta(\varepsilon - \mu)$ を示せ。
- (b) 以下の関係を示せ。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^x x^{2m}}{(e^x + 1)^2} dx = 2(2m)!(1 - 2^{-2m+1})\zeta(2m)$$

ここで、 $\zeta(s)$ はリーマンのゼータ関数

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s}$$

である。

ヒント: $|t| < 1$ で、 $1/(1+t)^2 = 1 - 2t + 3t^2 - 4t^3 + \dots$ であることを用いて

$$\frac{e^x}{(e^x + 1)^2} = \frac{e^{-x}}{(1 + e^{-x})^2} = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} n e^{-nx}$$

と展開し、部分積分を繰り返し用いるとよい。

問 3. フーリエ級数

周期 2π の周期関数、すなわち任意の x に対し $f(x) = f(x + 2\pi)$ を満たす関数 $f(x)$ は Fourier(フーリエ) 級数

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \sin nx)$$

に展開される。ここで、係数 a_n 、 b_n は

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx \, dx, \quad b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin nx \, dx$$

である。

(a) $f(x)$ が区間 $[-\pi, \pi]$ で以下のように表されるとき、この関数を Fourier 展開せよ。

(i) $f(x) = x^2$

(ii) $f(x) = x^4$

(b) $f(\pi)$ の値から、以下の無限級数を導け。

$$\frac{\pi^2}{6} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2}, \quad \frac{\pi^4}{90} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4}$$

問 4. 逐次近似法

$x^2 - a^2 = 0$ の正の解は $x = a$ であるが ($a > 0$ とする)、この方程式を小さな r ($|r/a^2| < 1$) によって $x^2 - a^2 = r$ と変更するとき、この方程式の r による補正解を逐次近似法によって求めよう。

(a) この方程式は

$$x = a + \frac{r}{a + x} \tag{1}$$

と書くこともできる。この式の右辺に、ゼロ次近似解として $x_0 = a$ を代入すると、 r についての 1 次の近似解 $x_1 = a + r/(2a)$ が得られる。 r についての 2 次の近似解を求めるために、これを再び右辺に代入し、 $1/(1-t) = 1 + t + t^2 + \dots$ ($|t| < 1$) を用いると、

$$x_2 = a + \frac{r}{2a + \frac{r}{2a}} = a + \frac{r}{2a} \frac{1}{1 + \frac{r}{4a^2}} \sim a + \frac{r}{2a} \left(1 - \frac{r}{4a^2}\right) = a \left\{1 + \frac{1}{2} \frac{r}{a^2} - \frac{1}{8} \left(\frac{r}{a^2}\right)^2\right\}.$$

同様に、 r についての 3 次の近似解 x_3 を求めよ。この結果をもとに、 $a = 2$ 、 $r = 1$ として、 $\sqrt{5}$ の近似値を求めよ。

(b) この方程式の正の解は、もちろん $x = \sqrt{a^2 + r}$ である。

$$(1+t)^\alpha = 1 + \alpha t + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2!} t^2 + \frac{\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)}{3!} t^3 + \dots$$

を用いて ($|t| < 1$)、この解を r について展開し、(a) の結果と一致することを確かめよ。

問 5. 低温における理想フェルミ気体 (ゾンマーフェルト展開)

(a) フェルミ分布関数 $f(\varepsilon)$ と関数 $g(\varepsilon)$ ($x > 0$ で連続で無限回微分可能とする) の間に十分低温で、以下の展開が近似的に成り立つことを示せ。

$$\int_0^\infty g(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \sim \int_0^\mu g(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 g'(\mu) + \frac{7\pi^4}{360} (k_B T)^4 g'''(\mu) + \dots$$

ヒント: 部分積分をおこない、問 2(a) から分かるように、 $-df/d\varepsilon$ が $\varepsilon \sim \mu$ でのみ大きな値を持つことに着目して、関数 $\int g(\varepsilon) d\varepsilon$ を $\varepsilon = \mu$ 近傍でテーラー展開する:

$$\begin{aligned} G(\varepsilon) &\equiv \int_0^\varepsilon g(\varepsilon') d\varepsilon' = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} G^{(n)}(\mu) (\varepsilon - \mu)^n \\ &= \int_0^\mu g(\varepsilon') d\varepsilon' + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} g^{(n-1)}(\mu) (\varepsilon - \mu)^n. \end{aligned}$$

さらに、問 2(b) と問 3(b) の結果を用いよ。なお、問 2(b) を用いるとき、十分低温では積分の下端を $-\infty$ としてよい。なぜか?

(b) 粒子数 N の期待値は、一粒子状態密度 $D(\varepsilon)$ を用いて

$$N = \int_0^\infty D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$$

と表せる。これに対して (a) の展開式を温度 T について 2 次まで用い、さらに問 4 の逐次近似法を用いて、化学ポテンシャルが以下になること導け。ただし、 μ_0 は絶対零度での化学ポテンシャルである。

$$\mu = \mu_0 \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\mu_0} \right)^2 + \cdots \right\}$$

ヒント: (a) の展開を用いて、温度 T についての 2 次までの近似は、

$$\begin{aligned} N &\sim \int_0^\mu D(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D'(\mu) \\ &\sim \int_0^{\mu_0} D(\varepsilon) d\varepsilon + (\mu - \mu_0) D(\mu_0) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D'(\mu) \end{aligned}$$

となる。 $N = \int_0^{\mu_0} D(\varepsilon) d\varepsilon$ および $D(\varepsilon) \propto \sqrt{\varepsilon}$ であれば、 $D'(\varepsilon) = D(\varepsilon)/(2\varepsilon)$ であることに注意して μ の方程式を導くと良い。さらに、問 4 の逐次近似法にならって、第ゼロ次近似として $D(\mu)$ の引数の μ を μ_0 と置き換えよ。

問 6. 低温における理想フェルミ気体 (低温での比熱)

(a) 問 5 と同様に内部エネルギー

$$E = \int_0^\infty \varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$$

についても、問 5(a) の展開を温度 T について 2 次まで行い、問 5(b) で求めた μ を援用して

$$E = E_0 \left\{ 1 + \frac{5}{12} \pi^2 \left(\frac{k_B T}{\mu_0} \right)^2 + \cdots \right\}$$

となることを示せ。ただし、 E_0 は絶対零度での内部エネルギーである。

(b) 定積比熱 C_V は十分低温で以下のように T に比例することを示せ。

$$C_V = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 D(\mu_0) T$$

(蛇足) 問 4(a) の式 (1) で、右辺をテーラー展開したりせずに、次々と左辺の x を右辺に代入すると

$$x = a + \frac{r}{2a + \frac{r}{2a + \frac{r}{2a + \cdots}}}$$

のような連分数の形に書くこともできる。例えば、 $a = 2$ 、 $r = 1$ とすると

$$\sqrt{5} = 2 + \frac{1}{4 + \frac{1}{4 + \frac{1}{4 + \cdots}}}$$

となる。この連分数を順次計算すると、 2 、 $9/4=2.25$ 、 $38/17 \sim 2.2353$ 、 $161/72 \sim 2.2361$ などとなり、急速に $\sqrt{5}$ に近づいていく。