Kapitel F

Sommerfeld-Entwicklung

Die Sommerfeld-Entwicklung wird auf Integrale der Form

$$\int_{-\infty}^{\infty} dEH(E)f(E) \qquad \text{mit } f(E) \;=\; \frac{1}{\mathrm{e}^{(E-\mu)/k_BT}+1} \tag{I.1}$$

angewendet, wobei die Funktion $H(E)$ für $E \to -\infty$ verschwindet und für $E \to +\infty$ nicht schneller als mit einer Potenz von E divergiert. Definiert man

$$K(E) \;=\; \int_{-\infty}^{E} dE'H(E') \;\; , \tag{I.2}$$

so dass

$$H(E) \;=\; \frac{dK(E)}{dE} \;\; , \tag{I.3}$$

so kann man (F.I.1) partiell integrieren und erhält

$$\int_{-\infty}^{\infty} dEH(E)f(E) \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} dEK(E)\left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) \;\; . \tag{I.4}$$

Dabei nutzt man aus, dass der integrierte Ausdruck bei ∞ verschwindet, da die Fermi-Funktion schneller als K divergiert und bei $-\infty$, da hier die Fermi-Funktion eins ist während K verschwindet.

Da $f \simeq 0$, wenn E nur einige k_BT größer als μ ist und $f \simeq 1$, wenn E nur einige k_BT kleiner als μ ist, wird seine Ableitung bezüglich E nur innerhalb einiger k_BT um μ von Null verschieden sein. Wir können deshalb (F.I.4) auswerten, indem wir $K(E)$ in eine Taylor-Reihe um $E = \mu$ entwickeln:

$$K(E) \;=\; K(\mu) + \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{(E-\mu)^n}{n!}\right] \left[\frac{d^nK(E)}{dE^n}\right]_{E=\mu} \;\; . \tag{I.5}$$

Substituieren wir (F.I.5) in (F.I.4), so ergibt der führende Term gerade $K(\mu)$, da

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) \quad = \quad 1 \ . \tag{I.6}$$

Da ferner $\frac{\partial f}{\partial E}$ eine gerade Funktion in $(E-\mu)$ ist, tragen nur Terme mit geradem n in (F.I.5) zu (F.I.4) bei. Wir erhalten dann, wenn wir K mit Hilfe von (F.I.2) durch die ursprüngliche Funktion H ausdrücken:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dEH(E)f(E) \quad &= \quad \int_{-\infty}^{\mu} dEH(E) \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[\frac{(E-\mu)^{2n}}{(2n)!}\right] \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) \left[\frac{d^{2n-1}H(E)}{dE^{2n-1}}\right]_{E=\mu} \ .\end{aligned} \tag{I.7}$$

Machen wir schließlich die Substitution $x = (E-\mu)/k_BT$, so erhalten wir

$$\int_{-\infty}^{\infty} dEH(E)f(E) \quad = \quad \int_{-\infty}^{\mu} dEH(E) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n (k_BT)^{2n} \left[\frac{d^{2n-1}H(E)}{dE^{2n-1}}\right]_{E=\mu} \ , \tag{I.8}$$

wobei a_n dimensionslose Zahlen sind, die durch

$$a_n \quad = \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^{2n}}{(2n)!} \left(-\frac{d}{dx}\frac{1}{\mathrm{e}^x+1}\right) \tag{I.9}$$

gegeben sind. Man erhält

$$a_n \quad = \quad 2\left(1 - \frac{1}{2^{2n}} + \frac{1}{3^{2n}} - \frac{1}{4^{2n}} + \frac{1}{5^{2n}} - \ldots\right) \ . \tag{I.10}$$

Dies kann auch mit Hilfe der Riemannschen ζ-Funktion ausgedrückt werden:

$$a_n \quad = \quad \left(2 - \frac{1}{2^{2(n-1)}}\right) \zeta(2n) \ , \tag{I.11}$$

wobei

$$\zeta(n) \quad = \quad 1 + \frac{1}{2^n} + \frac{1}{3^n} + \frac{1}{4^n} + \ldots \ . \tag{I.12}$$

Für die ersten Terme erhalten wir die Werte

$$\zeta(2n) \quad = \quad 2^{2n-1} \frac{\pi^{2n}}{(2n)!} B_n \ , \tag{I.13}$$

wobei die Zahlen B_n die so genannten Bernoulli-Zahlen sind:

$$B_1 = \frac{1}{6} \qquad B_2 = \frac{1}{30} \qquad B_3 = \frac{1}{42} \qquad B_4 = \frac{1}{30} \qquad B_5 = \frac{5}{66} \ . \tag{I.14}$$

In den meisten Fällen kann bereits nach dem ersten Entwicklungsterm abgebrochen werden und man benötigt nur $\zeta(2) = \pi^2/6$.