自由電子ガスにおけるLindhard関数の計算

Koki Shimura

March 21, 2025

1 Lindhard関数

帯磁率や誘電率といった自由電子ガスの応答関数は、一般に電子間のクーロン斥力 U に依存するが、U に関する 0 次の摂動、すなわち U を含まないような応答関数として

$$\chi_0(\boldsymbol{q},\omega)=\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{f(\epsilon_{\boldsymbol{k}})-f(\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}})}{\omega-(\epsilon_{\boldsymbol{k}}-\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}})+i\delta} \tag{1}$$

を考えることが出来る。これはLindhard関数と呼ばれ、自由電子ガスの応答に現れる基本的な量の一つとして知られている。特に $\omega=0$ の static な場合 $(=\chi_0(\boldsymbol{q},0))$ は教育的である。本稿の目的は、1, 2, 3 次元の場合の計算過程を具体的に提示することにある。[1] $\boldsymbol{q}$ は外場の効果で生じる momentum transfer である。運動量 $\boldsymbol{k}$ の状態にあった粒子が外場によって運動量 $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}$ の状態に叩きあげられるプロセスを考えればよい。

以下絶対零度で $f(\epsilon_{\boldsymbol{k}})=0, f(\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}})=1$ の場合を考え、和を積分に置き換えて具体的に計算する。また表記は $\chi_0(\boldsymbol{q})\equiv\chi_0(\boldsymbol{q},0)$ で統一する。

1 次元の場合

$-k_F\le k\le k_F$ の範囲で積分すればよい。

$$\chi_0(\boldsymbol{q})=\frac{1}{N}\frac{2k_F}{2\pi}\int_{-k_F}^{k_F}\frac{1}{\frac{\hbar^2kq}{m}+\frac{\hbar^2q^2}{2m}}dk=\frac{1}{N}\frac{2k_Fm}{\pi\hbar^2q}\int_{-k_F}^{k_F}\frac{1}{2k+q}dk=\frac{1}{N}\frac{2k_Fm}{\pi\hbar^2q}\log\left[\frac{2k_F+q}{-2k_F+q}\right] \tag{2}$$

ここで $\frac{q}{2k_F}=x$ とおくと

$$\begin{aligned}\chi_0(x)&=\frac{m}{N\pi\hbar^2}\cdot\frac{1}{2}\log\left|\frac{x+1}{x-1}\right|=\frac{m}{N\pi\hbar^2}\frac{1}{2x}\log\left|\frac{x+1}{x-1}\right|\\ \chi_0(0)&=\lim_{x\to0}\chi_0(x)=\frac{m}{N\pi\hbar^2}\end{aligned}$$

従って

$$\frac{\chi_0(x)}{\chi_0(0)}=\frac{1}{2x}\log\left|\frac{x+1}{x-1}\right| \tag{3}$$

2 次元の場合

$$\begin{aligned}\chi_0(x)&=\frac{1}{N}\frac{\pi k_F^2}{(2\pi)^2}\int_0^{k_F}dk\int_0^{2\pi}d\theta\frac{k}{\frac{\hbar^2kq\cos\theta}{m}+\frac{\hbar^2q^2}{2m}}=\frac{1}{8N}\frac{\pi k_F^2}{(2\pi)^2}\frac{2m}{\hbar^2q}\int_0^{k_F}\frac{2\pi kdk}{\sqrt{q^2-4k^2}}\\ &=\frac{1}{8N}\frac{\pi k_F^2}{(2\pi)^2}\frac{2m}{\hbar^2q}\int_{q^2-4k_F^2}^{q^2}2\pi t^{-\frac{1}{2}}dt\\ &=\frac{1}{8N}\frac{\pi k_F^2}{(2\pi)}\frac{2m}{\hbar^2}\left[2-2\sqrt{1-\frac{4k_F^2}{q^2}}\Theta(q-2k_F)\right]\end{aligned} \tag{4}$$

$\frac{q}{2k_F}=x$ とおくと

$$\begin{aligned}\chi_0(x)&=\frac{1}{8N}\frac{\pi k_F^2}{(2\pi)}\frac{2m}{\hbar^2}\left[2-2\frac{\sqrt{x^2-1}}{x}\Theta(x-1)\right]\\ \chi_0(0)&=\frac{1}{8N}\frac{\pi k_F^2}{(2\pi)}\frac{2m}{\hbar^2}\times2\end{aligned}$$

[1] これは固体の電子論 6 章の演習問題 1 の解答を与えることも意識して書かれている。

従って

$$\frac{\chi_0(x)}{\chi_0(0)} = 1 - \frac{\sqrt{x^2-1}}{x}\Theta(x-1) \tag{5}$$

3 次元の場合

$$\begin{aligned}
\chi_0(q) &= \frac{V}{N(2\pi)^3}\int_0^{k_F} dk \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{k^2 sin\theta}{\frac{\hbar^2 kq\cos\theta}{m} + \frac{\hbar^2 q}{2m}} \\
&= \frac{V}{N(2\pi)^3}\int_0^{k_F} dk \int_{-1}^{1} dt \frac{k}{2kt+q} \times \frac{m}{\hbar^2 q} \\
&= \frac{2mV}{N(2\pi)^2\hbar^2 q}\int_0^{\infty} k\log\left|\frac{q+2k}{q-2k}\right| dk \\
&= \frac{2mV}{N(2\pi)^2\hbar^2 q}\left[\frac{k_F^2}{2}\log\left|\frac{q+2k_F}{q-2k_F}\right| - q\int_0^{k_F}\left\{-\frac{1}{2}+\frac{q}{4}\left(\frac{1}{q-2k}+\frac{1}{q+2k}\right)\times\frac{1}{2}\right\}dk\right] \\
&= \frac{2mV}{N(2\pi)^2\hbar^2 q}\left[\frac{k_F^2}{2}\log\left|\frac{q+2k_F}{q-2k_F}\right| + \frac{1}{2}k_F q - \frac{q^2}{8}\log\left|\frac{q+2k_F}{q-2k_F}\right|\right] \\
&= \frac{2mVk_F}{N(2\pi)^2\hbar^2}\left[\frac{k_F}{2q}\log\left|\frac{q+2k_F}{q-2k_F}\right| + \frac{1}{2} - \frac{q}{8k_F}\log\left|\frac{q+2k_F}{q-2k_F}\right|\right]
\end{aligned} \tag{6}$$

$\frac{q}{2k_F} = x$ とおくと

$$\begin{aligned}
\chi_0(x) &= \frac{2mVk_F}{N(2\pi)^2\hbar^2}\left[\frac{1}{4x}\log\left|\frac{x+1}{x-1}\right| + \frac{1}{2} - \frac{x}{4}\log\left|\frac{x+1}{x-1}\right|\right] \\
\chi_0(0) &= \lim_{x\to 0}\chi_0(x) = \frac{2mVk_F}{N(2\pi)^2\hbar^2}
\end{aligned} \tag{7}$$

従って

$$\frac{\chi_0(x)}{\chi_0(0)} = \frac{1-x^2}{4x}\log\left|\frac{x+1}{x-1}\right| + \frac{1}{2} \tag{8}$$

ここで、$F(x) \equiv \frac{1-x^2}{4x}\log\left|\frac{x+1}{x-1}\right| + \frac{1}{2}$ をコーン関数と呼ぶ。

補足

いずれの場合も $x=1$ において特異性を持つ。特に 1 次元の場合は $x \to 1$ で発散する。低次元物質ほど発散が顕著であり、それは有機導体におけるパイエルス転移など、擬一次元の物質を研究するモチベーションの一つになっている。

Figure 1: Lindhard 関数のグラフ。1 次元、2 次元、3 次元の場合をプロットしている。