

大学院：固体物理 1

内容

1. 結晶の周期性と電子の振舞い
2. 多電子波動関数とハートレー・フォック近似
3. 温度グリーン関数
4. 電子ガス
5. 密度汎関数理論
6. フェルミ液体
7. 電子相関
8. 金属・絶縁体転移

<http://fujimac.t.u-tokyo.ac.jp/FujiwaraLab/index-j.html>

このページから、講義資料などがダウンロードできる。

4 . 電子ガス

一様電子ガス:誘電応答

ジェリウム模型

case.1 局所的中性, 電子密度の揺らぎもない.

$$n = \frac{N}{\Omega} = \frac{2}{\Omega} \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} 1 = 2 \times \frac{4\pi}{3} k_F^3 \frac{1}{(2\pi)^3} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad : \text{密度}$$

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3} = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{k_F} \quad : \text{1 個の電子の占める球の半径}$$

k_F : フェルミ波数

アルカリ金属では $r_s = 2 \sim 5$ (原子単位) 程度.

一様電子ガス:相互作用のない一様電子ガス

$$\begin{aligned}
 T &= 2 \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 2 \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} dk 4\pi k^2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\
 &= \frac{3}{10} k_F^2 N = \frac{3}{5} \varepsilon_F^0 N = \frac{3}{10} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{1}{r_s^2} N \\
 E_x &= -2 \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} \sum_{|\mathbf{k}'| < k_F} \frac{e^2}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \frac{\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\
 &= -2 \left(\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\right)^2 \frac{e^2}{2} \int_{|\mathbf{k}| < k_F} d\mathbf{k} \int_{|\mathbf{k}'| < k_F} d\mathbf{k}' \frac{1}{\Omega} \frac{4\pi}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} \\
 &= -2 \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \frac{e^2}{2} 4\pi \int_0^{k_F} dk k^2 \frac{2k_F}{\pi} \left[\frac{1}{2} + \frac{k_F^2 - k^2}{4kk_F} \ln \left| \frac{k_F + k}{k_F - k} \right| \right] \\
 &= -\frac{3}{4\pi} (3\pi^2 n)^{1/3} N = -\frac{3}{4\pi} k_F N = -\frac{3}{4\pi} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_s} N
 \end{aligned}$$

$$T/N \sim 1/r_s^2$$

$$E_x/N \sim 1/r_s$$

ウィグナー (Wigner) 結晶: $r_s > 100$

一様電子ガス:ハミルトニアン

$$\begin{aligned} H &= \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \\ &\quad + (\text{電子} \cdot \text{イオン相互作用}) + (\text{イオン} \cdot \text{イオン相互作用}) \\ &= \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2} + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{2\pi}{k^2} (\rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - N) \end{aligned}$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) - n,$$

$$\rho_{\mathbf{k}} = \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \sum_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} - N\delta_{\mathbf{k},0}$$

一様電子ガス:外部電荷に対する応答 2

マックスウェル方程式およびポアソン方程式:

$$\begin{aligned}D(\mathbf{k}, \omega) &= \varepsilon(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) \\i\mathbf{k} \cdot D(\mathbf{k}, \omega) &= (-e)4\pi\rho_t(\mathbf{k}, \omega) \\i\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) &= (-e)4\pi\{\rho_t(\mathbf{k}, \omega) + \rho_{ind}(\mathbf{k}, \omega)\}\end{aligned}$$

$$A(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] A(\mathbf{k}, \omega)$$

$$A(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{N}{\Omega} \int d\mathbf{r} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} A(\mathbf{r}, t)$$

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)} = 1 + \frac{\rho_{ind}(\mathbf{k}, \omega)}{\rho_t(\mathbf{k}, \omega)} = 1 + \frac{4\pi e^2}{k^2} \chi(\mathbf{k}, \omega)$$

一様電子ガス:外部電荷に対する応答 3

外部から電荷 $(-e)\rho_t(\mathbf{r}, t)$ を持ち込んだときの摂動ハミルトニアン:

$$H' = \sum_i \int d\mathbf{r} \frac{e^2 \rho_t(\mathbf{r}, t)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}|} = \frac{4\pi e^2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\rho_{-\mathbf{k}}}{k^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \rho_t(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\omega t}$$

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} |\Psi_0^{(0)}\rangle \\ &\quad + \frac{1}{i\hbar} \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \int_{-\infty}^t dt_1 e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_0) t_1 + \delta t_1} (H')_{n0} |\Psi_n^{(0)}\rangle + \dots \\ &= |\Psi_0^{(0)}(t)\rangle + |\Psi^{(1)}(t)\rangle + \dots \end{aligned}$$

$$(H')_{n0} = \langle \Psi_n^{(0)} | H' | \Psi_0^{(0)} \rangle = \frac{4\pi e^2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\rho_{-\mathbf{k}})_{n0}}{k^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \rho_t(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\omega t},$$

$$(\rho_{-\mathbf{k}})_{n0} = \langle \Psi_n^{(0)} | \rho_{-\mathbf{k}} | \Psi_0^{(0)} \rangle$$

一様電子ガス:外部電荷に対する応答 4

誘電関数 (ハートリー・フォック近似の誘電関数)

$$\frac{1}{\epsilon_{HF}(\mathbf{k}, \omega)} = 1 - \frac{4\pi e^2}{\hbar k^2 \Omega} \sum_n |(\rho_{\mathbf{k}})_{n0}|^2 \left\{ \frac{1}{\omega_{n0} - \omega - i\delta} + \frac{1}{\omega_{n0} + \omega + i\delta} \right\}$$

$$\text{Re } \chi(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im } \chi(\mathbf{k}, \omega') \text{ Pv } \frac{1}{\omega - \omega'} d\omega'$$

$$\text{Im } \chi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Re } \chi(\mathbf{k}, \omega') \text{ Pv } \frac{1}{\omega - \omega'} d\omega'$$

一様電子ガス:外部電荷に対する応答 5

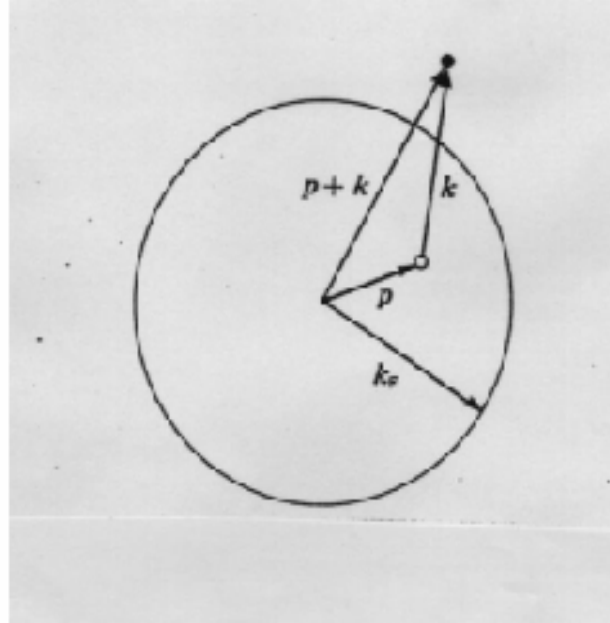
$$H_0 = \sum_i \frac{p_i^2}{2m},$$
$$H_{int} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{2\pi e^2}{k^2} (\rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - N).$$

$H = H_0 + H_{int}$ の基底状態 $|\Psi_0\rangle$

$$E_0 = \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle$$
$$\frac{\partial E_0}{\partial e^2} = E_0 \frac{\partial}{\partial e^2} \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle + \left\langle \Psi_0 \left| \frac{\partial H}{\partial e^2} \right| \Psi_0 \right\rangle = \frac{1}{e^2} \langle \Psi_0 | H_{int} | \Psi_0 \rangle$$
$$E_0 = E_0^{(0)} + \int_0^{e^2} de^2 \frac{1}{e^2} \langle \Psi_0 | H_{int} | \Psi_0 \rangle$$

ヘルマン・ファインマン (Hellmann-Feynmann) の定理

一様電子ガス:外部電荷に対する応答 6



$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | H_{int} | \Psi_0 \rangle &= \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{2\pi e^2}{k^2 \Omega} \sum_n |(\rho_{-\mathbf{k}})_{n0}|^2 - \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{2\pi e^2}{k^2} \frac{N}{\Omega} \\ &= -\hbar \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \text{Im} \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)} - \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{2\pi e^2}{k^2} n. \end{aligned}$$

$$E_0 = E_0^{(0)} - \hbar \int_0^{e^2} de^2 \frac{1}{e^2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \text{Im} \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)} - \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{2\pi e^2}{k^2} n$$

1 電子平面波波動関数から作ったスレーター一行列式:

$$(\rho_{\mathbf{k}})_{n0} = n_{\mathbf{p}\sigma} (1 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{k}\sigma}), \quad n_{\mathbf{p}\sigma} = \begin{cases} 1 & : |\mathbf{p}| < k_F \\ 0 & : |\mathbf{p}| > k_F \end{cases}$$

$$\hbar\omega_{n0} = E_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} - E_{\mathbf{p}}, \quad E_{\mathbf{p}} = \frac{\hbar^2 p^2}{2m}$$

$$E_0^{HF} = \left(\frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} - \frac{3e^2 k_F}{4\pi} \right) N$$

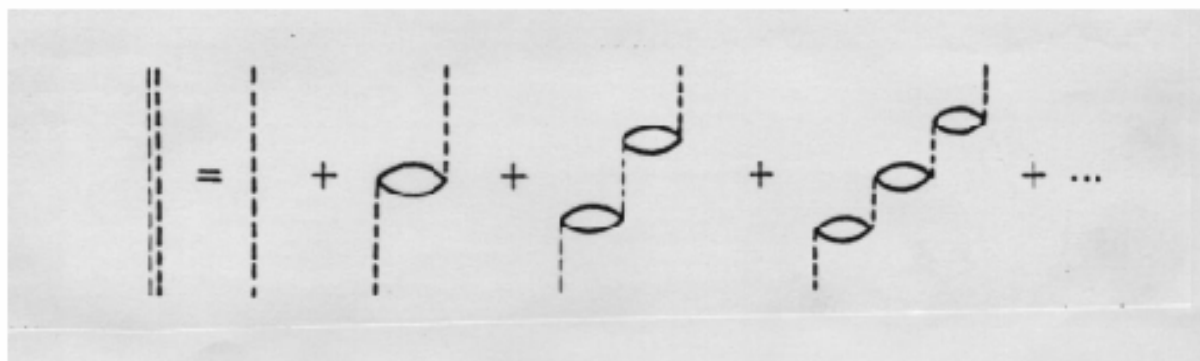
電子ガスの相関エネルギー

$$\begin{aligned}\tilde{v}_{RPA}(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{v(\mathbf{k})}{\varepsilon_{RPA}(\mathbf{k}, \omega)} \\ &= v(\mathbf{k}) + \{-4\pi\alpha_0(\mathbf{k}, \omega)\}v(\mathbf{k}) + \{-4\pi\alpha_0(\mathbf{k}, \omega)\}^2v(\mathbf{k}) + \dots \\ &= \{1 + 4\pi\alpha_0(\mathbf{k}, \omega)\}^{-1}v(\mathbf{k})\end{aligned}$$

$$\tilde{v}_{HF}(\mathbf{k}, \omega) = \{1 - 4\pi\alpha_0(\mathbf{k}, \omega)\}v(\mathbf{k}) .$$

$$\varepsilon_{HF}(\mathbf{k}, \omega) = \{1 - 4\pi\alpha_0(\mathbf{k}, \omega)\}^{-1}$$

$$\begin{aligned}\varepsilon_{RPA}(\mathbf{k}, \omega) &= 1 + 4\pi\alpha_0(\mathbf{k}, \omega) \\ &= 1 + \frac{4\pi e^2}{\hbar k^2 \Omega} \sum_n |(\rho_{\mathbf{k}})_{n0}|^2 \left\{ \frac{1}{\omega_{n0} - \omega - i\delta} + \frac{1}{\omega_{n0} + \omega + i\delta} \right\}\end{aligned}$$



乱雑位相近似とプラズマ振動

$$\epsilon_{RPA}(\mathbf{k}, \omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{\hbar k^2 \Omega} \sum_{\mathbf{p}\sigma} \left\{ \frac{1}{\omega_{n0} - \omega - i\delta} + \frac{1}{\omega_{n0} + \omega + i\delta} \right\} n_{\mathbf{p}\sigma} (1 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{k}\sigma})$$

$$\epsilon_{RPA}(\mathbf{k}, \omega) = 1 + \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3} \frac{1}{\pi} r_s \frac{1}{q^3} \left[2q + f\left(q - \frac{\epsilon}{q}\right) + f\left(q + \frac{\epsilon}{q}\right) \right],$$

$$q = \frac{k}{k_F}, \quad \epsilon = \frac{\hbar\omega + i\delta}{\epsilon_F}, \quad f(z) = \left(1 - \frac{z^2}{4}\right) \ln\left(\frac{z+2}{z-2}\right)$$

長波長の極限:

$$\epsilon_{RPA}(\mathbf{k}, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2 n}{m\omega^2} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

$$\text{Al} : \hbar\omega_p \simeq 16\text{eV}, \quad \text{K} : \hbar\omega_p \simeq 3.9\text{eV}$$

正確な全エネルギーのハートリー・フォック近似の結果との差を相関エネルギーという。

$$E_c = E_0 - E_0^{HF} = \left(-0.0575 + 0.0155 \ln \frac{r_s}{a_0}\right) \cdot \frac{N}{\Omega} = \epsilon_c \frac{N}{\Omega} \quad (\text{Hartree})$$