几个关于费米面的积分

Arthur Du

在费米液体的微扰计算中经常出现一些关于费米面的积分, 现在具体的几个积分的计算总结在这里.

1 第一个积分

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{V}\sum_{|\boldsymbol{k}|<k_F} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} &= \int\limits_{|\boldsymbol{k}|<k_F} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^{k_F} k^2 dk \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi e^{ikr\cos\theta} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{k_F} k^2 dk \int_0^{\pi} \frac{1}{-ikr} d e^{ikr\cos\theta} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{-ir}\int_0^{k_F} kdk\left(e^{-ikr}-e^{ikr}\right) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{2}{r}\int_0^{k_F} k\sin(kr)dk \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{2}{r^3}\int_0^{rk_F} x\sin x dx \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{2}{r^3}\left(-\int_0^{rk_F} xd\cos x\right) \\
&= \frac{k_F^3}{2\pi^2}\frac{\sin(k_F r)-k_F r\cos(k_F r)}{(k_F r)^3}.
\end{aligned}
\tag{1}
$$

2 第二个积分

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{V}\sum_{|\boldsymbol{k}'|<k_F}\frac{1}{|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'|^2} &= \int\limits_{|\boldsymbol{k}'|<k_F}\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\frac{1}{|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'|^2} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3}\int\limits_0^{k_F}k'^2dk'\int\limits_0^{\pi}\sin\theta d\theta\int\limits_0^{2\pi}d\varphi\frac{1}{k'^2+k^2-2k'k\cos\theta} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int\limits_0^{k_F}k'^2dk'\int\limits_{-1}^{1}\frac{dx}{k'^2+k^2-2k'kx} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{k}\int\limits_0^{k_F}k'\ln\left|\frac{k'+k}{k'-k}\right|dk' \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{k}\left(\int\limits_0^{k_F}k'\ln|k'+k|\,dk'-\int\limits_0^{k_F}k'\ln|k'-k|\,dk'\right),
\end{aligned} \tag{2}
$$

其中用到了变量代换 $d\cos\theta=-\sin\theta d\theta=dx$. 下面分别计算上面括号内的两个积分.

$$
\begin{aligned}
&\int\limits_0^{k_F}k'\ln|k'+k|\,dk' \\
=&\int\limits_0^{k_F}(k'+k)\ln|k'+k|\,dk'-k\int\limits_0^{k_F}\ln|k'+k|\,dk' \\
=&\int\limits_k^{k_F+k}t\ln|t|\,dt-k\int\limits_k^{k_F+k}\ln|t|\,dt \\
=&\frac{1}{2}\int\limits_k^{k_F+k}\ln|t|\,dt^2-k\int\limits_k^{k_F+k}\ln|t|\,dt \\
=&\frac{1}{2}\left(t^2\ln|t|\Big|_k^{k_F+k}-\int\limits_k^{k_F+k}t^2d\ln|t|\right)-k\left(t\ln|t|\Big|_k^{k_F+k}-\int\limits_k^{k_F+k}dt\right) \\
=&\frac{1}{2}\left(t^2\ln|t|\Big|_k^{k_F+k}-\int\limits_k^{k_F+k}tdt\right)-k\left(t\ln|t|\Big|_k^{k_F+k}-\int\limits_k^{k_F+k}dt\right) \\
=&\frac{1}{2}\left[(k_F-k)^2\ln|k_F-k|-k^2\ln|-k|-\frac{1}{2}(k_F-k)^2+\frac{1}{2}(-k)^2\right] \\
&+k\left[(k_F-k)\ln|k_F-k|-(-k)\ln|-k|-(k_F-k)+(-k)\right],
\end{aligned} \tag{3}
$$

第二个积分类似故不再写出. 两个积分相减, 有

$$
\int\limits_0^{k_F}k'\ln|k'+k|\,dk'-\int\limits_0^{k_F}k'\ln|k'-k|\,dk'=\frac{1}{2}\left(k_F^2-k^2\right)\ln\left|\frac{k_F+k}{k_F-k}\right|+k_Fk, \tag{4}
$$

代回原积分

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{V}\sum_{|\boldsymbol{k}'|<k_F}\frac{1}{|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'|^2} &= \int\limits_{|\boldsymbol{k}'|<k_F}\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\frac{1}{|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'|^2} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{k}\left[\frac{1}{2}\left(k_F^2-k^2\right)\ln\left|\frac{k_F+k}{k_F-k}\right|+k_Fk\right] \\
&= \frac{k_F}{2\pi^2}\left(\frac{k_F^2-k^2}{4k_Fk}\ln\left|\frac{k_F+k}{k_F-k}\right|+\frac{1}{2}\right),
\end{aligned} \tag{5}
$$

这实际上就是 Linhard 函数.

3 第三个积分

$$\frac{1}{V}\sum_{|\boldsymbol{k}|<k_F}\frac{1}{|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|^2-\boldsymbol{k}^2}=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^{k_F}k^2dk\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\frac{1}{q^2+2kq\cos\theta}$$
$$=\frac{k_F}{8\pi^2}\left(\frac{4k_F^2-q^2}{8k_Fq}\ln\left|\frac{q+2k_F}{q-2k_F}\right|+\frac{1}{2}\right), \tag{6}$$

计算方法同第二个积分, 换了一些数字而已.

4 第四个积分

$$\frac{1}{V^2}\sum_{|\boldsymbol{k}'|<k_F}\sum_{|\boldsymbol{k}|<k_F}\frac{1}{|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'|^2}=\int_{|\boldsymbol{k}|<k_F}\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\int_{|\boldsymbol{k}'|<k_F}\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\frac{1}{|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'|^2}$$
$$=\int_{|\boldsymbol{k}|<k_F}\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\int_{|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|<k_F}\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{1}{|\boldsymbol{q}|^2}, \tag{7}$$

计算这个积分我们有如下的步骤：1.$\boldsymbol{q}$ 的方向与积分无关, 故 $\boldsymbol{q}$ 的方向部分的积分为 4π;2. 关于 q 的长度部分的积分, 我们可想象两个费米球, 只有当 $0<|\boldsymbol{q}|<2k_F$ 时, 才可以满足积分区域的要求, 同时我们可以知道两个费米球交叠部

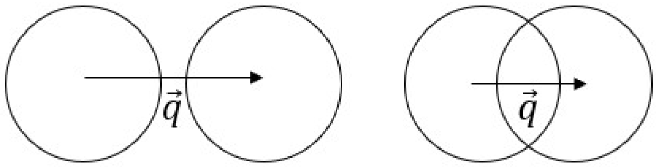

Figure 1: q 的取值范围

分的体积就是所求的积分值;3.θ 的变化范围是 $\frac{q}{2k_F}<\cos\theta<1$,$k$ 的变化范围是 $y(\theta)<k<k_F$. 故对于 k 的积分我们

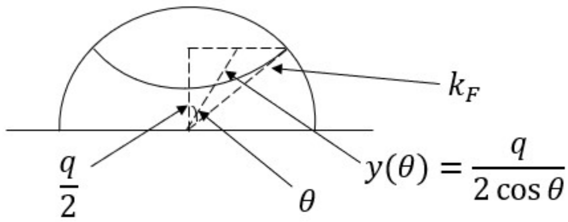

Figure 2: k 的取值范围

有

$$\int_{\frac{q}{2\cos\theta}}^{k_F}k^2dk\int_{\frac{q}{2k_F}}^{1}d\cos\theta\int_0^{2\pi}d\varphi$$
$$=\frac{2\pi k_F^3}{3}-\frac{\pi qk_F^2}{2}+\frac{\pi q^3}{24}, \tag{8}$$

再带入到对 q 的积分我们有

$$\int_0^{2k_F}\left(\frac{2\pi k_F^3}{3}-\frac{\pi q k_F^2}{2}+\frac{\pi q^3}{24}\right)dq=\frac{\pi k_F^4}{2}, \tag{9}$$

这里要注意, 这只是对交叠部分的一半进行了积分, 还要乘以 2. 最后 $\pi k_F^4\times 4\pi/(2\pi)^6=\left(\frac{k_F}{2\pi}\right)^4$ 即为所求的积分值. 这个积分十分重要, 这是在算电子凝胶模型的一阶微扰时所遇到的积分, 最后的结果告诉我们交换关联能的修正是负的, 也就是说考虑了交换关联能后, 体系的能量会降低!