3 关于费米面的积分

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一节.

3.1 第一个积分

$$\frac{1}{V} \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \int_{|\mathbf{k}| < k_F} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\
= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} k^2 dk \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi e^{ikr\cos\theta} \\
= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{k_F} k^2 dk \int_0^{\pi} \frac{1}{-ikr} de^{ikr\cos\theta} \\
= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{-ir} \int_0^{k_F} k dk \left(e^{-ikr} - e^{ikr} \right) \\
= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2}{r} \int_0^{k_F} k \sin(kr) dk \\
= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2}{r^3} \int_0^{rk_F} x \sin x dx \\
= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2}{r^3} \left(- \int_0^{rk_F} x d\cos x \right) \\
= \frac{k_F^2}{2\pi^2} \frac{\sin(k_F r) - k_F r \cos(k_F r)}{(k_F r)^3}. \tag{3.1}$$

3.2 第二个积分

$$\frac{1}{V} \sum_{|\mathbf{k'}| < k_F} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k'}|^2} = \int_{|\mathbf{k'}| < k_F} \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k'}|^2}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} k'^2 dk' \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{k'^2 + k^2 - 2k'k\cos\theta}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{k_F} k'^2 dk' \int_{-1}^1 \frac{dx}{k'^2 + k^2 - 2k'kx}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{k} \int_0^{k_F} k' \ln\left|\frac{k' + k}{k' - k}\right| dk'$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{k} \left(\int_0^{k_F} k' \ln|k' + k| dk' - \int_0^{k_F} k' \ln|k' - k| dk'\right), \tag{3.2}$$

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.

$$\int_{0}^{k_{F}} k' \ln |k' + k| \, dk'
= \int_{0}^{k_{F}} (k' + k) \ln |k' + k| \, dk' - k \int_{0}^{k_{F}} \ln |k' + k| \, dk'
= \int_{k}^{k_{F}+k} t \ln |t| \, dt - k \int_{k}^{k_{F}+k} \ln |t| \, dt
= \frac{1}{2} \int_{k}^{k_{F}+k} \ln |t| \, dt^{2} - k \int_{k}^{k_{F}+k} \ln |t| \, dt
= \frac{1}{2} \left(t^{2} \ln |t| \Big|_{k}^{k_{F}+k} - \int_{k}^{k_{F}+k} t^{2} \, d\ln |t| \right) - k \left(t \ln |t| \Big|_{k}^{k_{F}+k} - \int_{k}^{k_{F}+k} \, dt \right)
= \frac{1}{2} \left(t^{2} \ln |t| \Big|_{k}^{k_{F}+k} - \int_{k}^{k_{F}+k} t \, dt \right) - k \left(t \ln |t| \Big|_{k}^{k_{F}+k} - \int_{k}^{k_{F}+k} \, dt \right)
= \frac{1}{2} \left[(k_{F} - k)^{2} \ln |k_{F} - k| - k^{2} \ln |-k| - \frac{1}{2} (k_{F} - k)^{2} + \frac{1}{2} (-k)^{2} \right]
+ k \left[(k_{F} - k) \ln |k_{F} - k| - (-k) \ln |-k| - (k_{F} - k) + (-k) \right],$$
(3.3)

第二个积分类似故不再写出. 两个积分相减, 有

$$\int_{0}^{k_{F}} k' \ln|k' + k| dk' - \int_{0}^{k_{F}} k' \ln|k' - k| dk' = \frac{1}{2} (k_{F}^{2} - k^{2}) \ln\left|\frac{k_{F} + k}{k_{F} - k}\right| + k_{F}k,$$
(3.4)

代回原积分

$$\frac{1}{V} \sum_{|\mathbf{k'}| < k_F} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k'}|^2} = \int_{|\mathbf{k'}| < k_F} \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k'}|^2}
= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{k} \left[\frac{1}{2} \left(k_F^2 - k^2 \right) \ln \left| \frac{k_F + k}{k_F - k} \right| + k_F k \right]
= \frac{k_F}{2\pi^2} \left(\frac{k_F^2 - k^2}{4k_F k} \ln \left| \frac{k_F + k}{k_F - k} \right| + \frac{1}{2} \right),$$
(3.5)

这实际上就是 Linhard 函数.

3.3 第三个积分

$$\frac{1}{V} \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} \frac{1}{|\mathbf{k} + \mathbf{q}|^2 - \mathbf{k}^2} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} k^2 dk \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{q^2 + 2kq\cos\theta}
= \frac{k_F}{8\pi^2} \left(\frac{4k_F^2 - q^2}{8k_F q} \ln\left| \frac{q + 2k_F}{q - 2k_F} \right| + \frac{1}{2} \right),$$
(3.6)

计算方法同第二个积分,换了一些数字而已.

3.4 第四个积分

$$\frac{1}{V^{2}} \sum_{|\mathbf{k'}| < k_{F}} \sum_{|\mathbf{k}| < k_{F}} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k'}|^{2}} = \int_{|\mathbf{k}| < k_{F}} \frac{d^{3}k}{(2\pi)^{3}} \int_{|\mathbf{k'}| < k_{F}} \frac{d^{3}k'}{(2\pi)^{3}} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k'}|^{2}}$$

$$= \int_{|\mathbf{k}| < k_{F}} \frac{d^{3}k}{(2\pi)^{3}} \int_{|\mathbf{k} + \mathbf{q}| < k_{F}} \frac{d^{3}q}{(2\pi)^{3}} \frac{1}{|\mathbf{q}|^{2}}, \tag{3.7}$$

计算这个积分我们有如下的步骤: 1.q 的方向与积分无关, 故 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 $0 < |q| < 2k_F$ 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

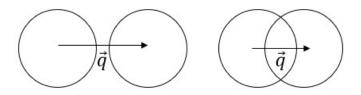


Figure 3.1: *q* 的取值范围

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

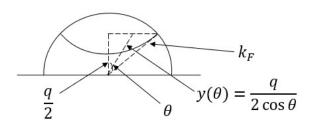


Figure 3.2: *k* 的取值范围

有

$$\int_{\frac{q}{2\cos\theta}}^{k_F} k^2 dk \int_{\frac{q}{2k_F}}^{1} d\cos\theta \int_{0}^{2\pi} d\varphi$$

$$= \frac{2\pi k_F^3}{3} - \frac{\pi q k_F^2}{2} + \frac{\pi q^3}{24},$$
(3.8)

再带入到对 q 的积分我们有

$$\int_{0}^{2k_{F}} \left(\frac{2\pi k_{F}^{3}}{3} - \frac{\pi q k_{F}^{2}}{2} + \frac{\pi q^{3}}{24} \right) dq = \frac{\pi k_{F}^{4}}{2}, \tag{3.9}$$

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!