

自由電子ガスにおける Lindhard 関数の計算

Koki Shimura

August 29, 2025

本稿では動的な Lindhard 関数を計算する。元々は『固体の電子論』(斯波弘行)を読む上での計算ノートとして作成したもので、計算結果はその教科書との整合性をもとに確認している。

電子ガスの2粒子スペクトルの連続体領域に関する計算は、固体物理を扱う教科書なら大抵記載されているものだが、フェルミ面ベースで議論している記述はなかなか見当たらない。そこで本ノートの物理的考察と章立てた部分では、1次元自由電子ガスの特殊性について議論した。

本ノートの作成にあたって協力いただいた同じ研究室の学生たちに感謝申し上げる。

1 はじめに

相互作用を含まない応答関数 $\chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ を以下のように定義する。

$$\chi^0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f(\xi_{\mathbf{k}})}{\hbar\omega - (\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}}) + i\delta}, \quad (1)$$

ここで $\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ である。 $f(\xi) = \frac{1}{e^{\beta\xi} + 1}$ はフェルミ分布関数であり、 N は波数点の数である。 $\chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ は自由電子ガスの分極関数やスピン感受率を求める際に出てくる基本的な量であり、ここでは既知とする。

$\chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ の虚部 $\text{Im} \chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ は、公式 $\frac{1}{x + i\delta} = \mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi \delta(x)$ を用いて

$$\begin{aligned} \text{Im} \chi^0(\mathbf{q}, \omega) &= -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} [f(\xi_{\mathbf{k}}) - f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})] [-\pi \delta(\hbar\omega - (\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}}))] \\ &= \frac{\pi}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[f(\xi_{\mathbf{k}}) \delta(\hbar\omega - (\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}})) - f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \delta(\hbar\omega - (\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}})) \right] \\ &= \frac{\pi}{N} \sum_{\mathbf{k}} [f(\xi_{\mathbf{k}})] \left[\delta(\hbar\omega - (\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}})) - \delta(\hbar\omega - (\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})) \right] \end{aligned} \quad (2)$$

と計算できる。途中和を取る際は $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}' - \mathbf{q}$ の置き換えを行っている。なおこの量は2粒子スペクトルとも呼ばれ、粒子の励起を記述し、中性子散乱実験で直接観測することができる。

絶対零度のとき、フェルミ分布関数 $f(\xi)$ は階段関数 $\Theta(\varepsilon_F - \xi)$ になる。ここで $\varepsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / (2m)$ はフェルミエネルギー、 k_F はフェルミ波数である。式(??)の和 $\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}}$ を、連続系近似として積分に置き換えて計算すると

$$\text{Im} \chi^0(\mathbf{q}, \omega) = \pi \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Theta(k_F - k) \left[\delta(\hbar\omega - (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})) - \delta(\hbar\omega - (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})) \right] \quad (3)$$

となる。まずは具体的な計算から入る。

2 3次元の場合

3次元自由電子系は球対称であるから、これ以降ベクトル \mathbf{q} の向きは便宜的に z 軸方向にとり、 $q = |\mathbf{q}|$ を変数とする。 $\mathbf{q} = (0, 0, q)$, $\mathbf{k} = (k \sin \theta \cos \varphi, k \sin \theta \sin \varphi, k \cos \theta)$ である。

式(??)の変形を進めると

$$\begin{aligned} \text{Im } \chi^0(\mathbf{q}, \omega) &= \pi \int_0^{k_F} \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \delta(\hbar\omega - \frac{\hbar^2}{2m}(q^2 + 2kq \cos \theta)) - (\delta(\hbar\omega + \frac{\hbar^2}{2m}(q^2 + 2kq \cos \theta))) \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int_0^{k_F} k^2 dk \int_0^\pi \sin \theta d\theta \left[\delta(\hbar\omega + \frac{\hbar^2}{2m}(q^2 + 2kq \cos \theta)) - \delta(\hbar\omega - \frac{\hbar^2}{2m}(q^2 + 2kq \cos \theta)) \right] \end{aligned} \quad (4)$$

となる。ここから前項と後項の2つの項に分けて考える。

第1項

$$I_1 = \frac{1}{4\pi} \int_0^{k_F} k^2 dk \int_0^\pi \sin \theta d\theta \delta\left(\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\hbar^2 kq \cos \theta}{m}\right) \quad (5)$$

を考える。 $\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\hbar^2 kq \cos \theta}{m} = u$ とおくと

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \delta\left(\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\hbar^2 kq \cos \theta}{m}\right) = \int_{\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \frac{\hbar^2 kq}{m}}^{\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\hbar^2 kq}{m}} du \frac{m}{\hbar^2 kq} \delta(u) \quad (6)$$

この積分が有限になるための条件として、 $\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\hbar^2 kq}{m} \geq 0$ かつ $\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \frac{\hbar^2 kq}{m} < 0$ が満たされている必要があるが、前者は明らかである。また、この条件が満たされない場合 δ 関数の積分はゼロ、そうでない場合には1になる。この振る舞いは階段関数 Θ を導入して

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{m}{4\pi \hbar^2 q} \int_{\frac{m\omega}{\hbar q} + \frac{q}{2}}^{k_F} k dk \Theta\left(k - \frac{m\omega}{\hbar q} - \frac{q}{2}\right) \\ &= \frac{m}{8\pi \hbar^2 q} \left[k_F^2 - \left(\frac{m\omega}{\hbar q} + \frac{q}{2}\right)^2 \right] \Theta\left(qv_F - \omega - \frac{\hbar q^2}{2m}\right). \end{aligned} \quad (7)$$

と書き表せる。なお v_F はフェルミ速度で $v_F = \hbar k_F/m$ である。

第2項

$$I_2 = \frac{1}{4\pi} \int_0^{k_F} k^2 dk \int_0^\pi \sin \theta d\theta \delta\left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2}{2m}(q^2 + 2kq \cos \theta)\right) \quad (8)$$

について、 $\omega - \frac{\hbar^2}{2m}(q^2 + 2kq \cos \theta) = t$ とおくと

$$I_2 = \frac{1}{4\pi} \int_0^{k_F} k^2 dk \int_{\hbar\omega - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \frac{\hbar^2 kq}{m}}^{\hbar\omega - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\hbar^2 kq}{m}} dt \delta(t) \quad (9)$$

δ 関数についての積分が有限になるための条件は

$$\hbar\omega - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\hbar^2 kq}{m} \geq 0 \quad \hbar\omega - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \frac{\hbar^2 kq}{m} \leq 0 \quad (10)$$

が同時に満たされることである。これより k に関する条件が $k \geq \frac{1}{2q} \left| \frac{2m\omega}{\hbar} - q^2 \right|$ であると求まり、 k の積分範囲の下限が修正される。積分は

$$\begin{aligned}
I_2 &= \frac{m}{4\pi \hbar^2 q} \int_{\frac{1}{2q} \left| \frac{2m\omega}{\hbar} - q^2 \right|}^{k_F} k \Theta \left(k - \frac{1}{2q} \left| \frac{2m\omega}{\hbar} - q^2 \right| \right) dk \\
&= \frac{m}{8\pi \hbar^2 q} \left[k_F^2 - \frac{\left(\frac{2m\omega}{\hbar} - q^2 \right)^2}{4q^2} \right] \Theta \left(k_F - \frac{1}{2q} \left| \frac{2m\omega}{\hbar} - q^2 \right| \right) \\
&= \frac{m}{8\pi \hbar^2 q} \left[k_F^2 - \frac{\left(\frac{2m\omega}{\hbar} - q^2 \right)^2}{4q^2} \right] \Theta \left(q v_F - \left| \omega - \frac{\hbar q^2}{2m} \right| \right). \tag{11}
\end{aligned}$$

となる。

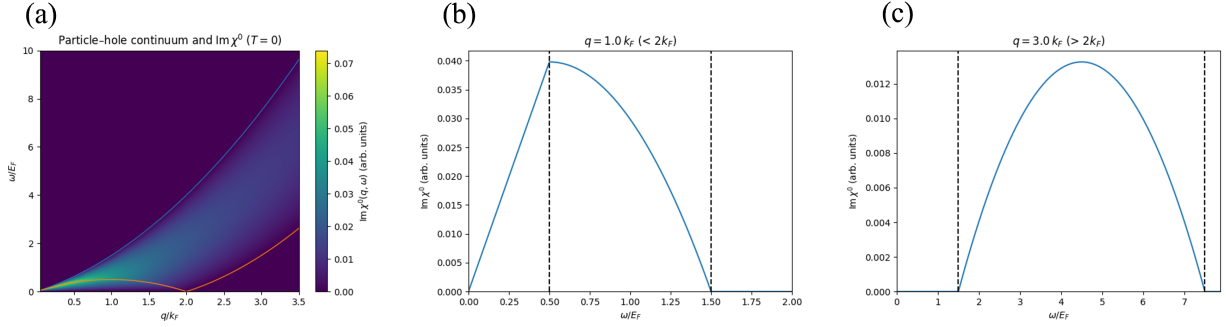


図 1: (a) 縦軸に ω 、横軸に q を取った $\text{Im}\chi^0(q, \omega)$ のカラープロット。(b) $q < 2k_F$ の場合の $\text{Im}\chi^0(q, \omega)$ の ω 依存性。(c) $q > 2k_F$ の場合の $\text{Im}\chi^0(q, \omega)$ の ω 依存性。 $\hbar = m = 1.0$ で計算している。

以上より, 式 (??) は式 (??) と (??) を用いて

$$\text{Im}\chi^0(q, \omega) = -I_1 + I_2 \tag{12}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{m}{8\pi \hbar^2 q} \left[k_F^2 - \frac{\left(\frac{2m\omega}{\hbar} + q^2 \right)^2}{4q^2} \right] \Theta \left(q v_F - \omega - \frac{\hbar q^2}{2m} \right) \\
&\quad + \frac{m}{8\pi \hbar^2 q} \left[k_F^2 - \frac{\left(\frac{2m\omega}{\hbar} - q^2 \right)^2}{4q^2} \right] \Theta \left(q v_F - \left| \omega - \frac{\hbar q^2}{2m} \right| \right). \tag{13}
\end{aligned}$$

と求まる。

図 1(a) に横軸に ω 、縦軸に q をとった $\text{Im}\chi^0(q, \omega)$ のカラープロットを示す。 ω の上限 ω_{\max} 、下限 ω_{\min} は q の関数として与えられ、それぞれ $\omega_{\max} = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + q v_F$, $\omega_{\min} = \max(0, \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - q v_F)$ である。図 1(b) に $q = k_F < 2k_F$ での $\text{Im}\chi^0(q, \omega)$ の ω 依存性を、図 1(c) に $q = 3.5k_F > 2k_F$ での $\text{Im}\chi^0(q, \omega)$ の ω 依存性をそれぞれ示す。ここで q を固定したときの ω 依存性は、 $q > 2k_F$ の場合と $q < 2k_F$ の場合で異なることが分かる。実際式 (??) から

$$\text{Im}\chi^0(q, \omega) = \begin{cases} \frac{m^2 \omega}{4\pi \hbar^3 q} \Theta(q v_F - \frac{\hbar q^2}{2m} - \omega) + \frac{m}{8\pi \hbar^2 q} \left[k_F^2 - \frac{\left(\frac{2m\omega}{\hbar} - q^2 \right)^2}{4q^2} \right] \Theta \left(q v_F - \left| \omega - \frac{\hbar q^2}{2m} \right| \right) & q < 2k_F \\ \frac{m}{8\pi \hbar^2 q} \left[k_F^2 - \frac{\left(\frac{2m\omega}{\hbar} - q^2 \right)^2}{4q^2} \right] \Theta \left(q v_F - \left| \omega - \frac{\hbar q^2}{2m} \right| \right) & q > 2k_F \end{cases} \tag{14}$$

となることがわかる。式 (??) と図から以下のことが読み取れる。

- $q < 2k_F$ のとき、 $0 < \omega < q v_F - \frac{\hbar q^2}{2m}$ の範囲で $\text{Im}\chi^0(q, \omega)$ は線形に増加する。 $q v_F - \frac{\hbar q^2}{2m} < \omega < q v_F + \frac{\hbar q^2}{2m}$ では ω に関して上凸の放物線型に減少する。
- $q > 2k_F$ では、 ω には有限の下限 ω_{\min} が存在し、それは $-q v_F + \frac{\hbar q^2}{2m} > 0$ で与えられる。 $-q v_F + \frac{\hbar q^2}{2m} < \omega < q v_F + \frac{\hbar q^2}{2m}$ の範囲で、 $\text{Im}\chi^0(q, \omega)$ は上凸の放物線を描く。

3 1次元の場合

1次元自由電子ガスにおける $\text{Im} \chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ の計算は比較的簡単である一方、3次元の場合と質的に異なる性質もある。1次元の場合の積分式は

$$\text{Im} \chi^0(\mathbf{q}, \omega) = \pi \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dk}{2\pi} \delta\left[\left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2}{2m}(q^2 + 2kq)\right)\right] - \delta\left[\left(\hbar\omega + \frac{\hbar^2}{2m}(q^2 + 2kq)\right)\right] \quad (15)$$

である。第1項を I_1 、第2項を I_2 とすると、それぞれ

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{1}{2} \int_{-k_F}^{k_F} dt \delta\left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k q}{m}\right) \\ &= \frac{1}{2} \int_{\hbar\omega - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_F q}{m}}^{\hbar\omega - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_F q}{m}} dt \frac{m}{\hbar^2 q} \delta(t) \\ &= \frac{m}{2\hbar^2 q} \Theta(qv_F - \left|\omega - \frac{\hbar q^2}{2m}\right|) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{1}{2} \int_{-k_F}^{k_F} dk \delta\left(\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k q}{m}\right) \\ &= \frac{1}{2} \int_{\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_F q}{m}}^{\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_F q}{m}} dt \frac{m}{\hbar^2 q} \delta(t) \\ &= \frac{m}{2\hbar^2 q} \Theta(qv_F - \omega - \frac{\hbar q^2}{2m}) \end{aligned}$$

であるから、

$$\text{Im} \chi^0(\mathbf{q}, \omega) = I_1 - I_2 = \frac{m}{2\hbar^2 q} \left[\Theta(qv_F - \left|\omega - \frac{\hbar q^2}{2m}\right|) - \Theta(qv_F - \omega - \frac{\hbar q^2}{2m}) \right] \quad (16)$$

$$= \begin{cases} \frac{m}{2\hbar^2 q} \Theta(\omega - qv_F + \frac{\hbar q^2}{2m}) \Theta(qv_F - \omega + \frac{\hbar q^2}{2m}) & q < 2k_F \\ \frac{m}{2\hbar^2 q} \Theta(qv_F - \omega + \frac{\hbar q^2}{2m}) \Theta(qv_F + \omega - \frac{\hbar q^2}{2m}) & q > 2k_F \end{cases} \quad (17)$$

である。

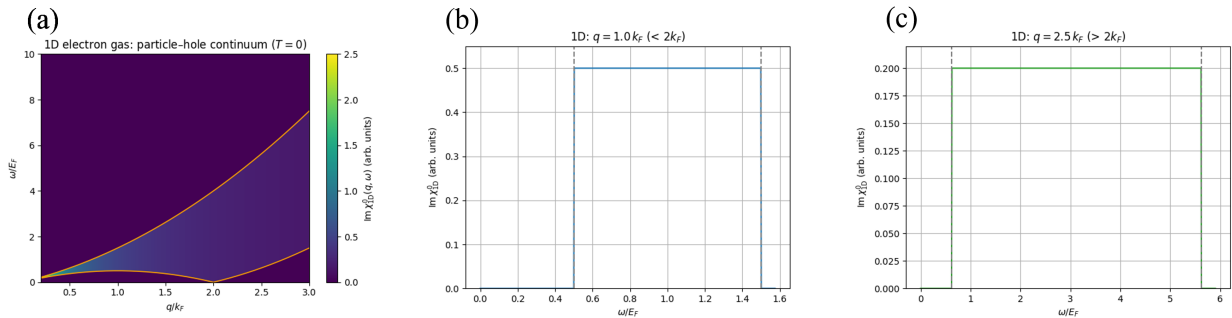


図 2: (a) 縦軸に ω 、横軸に q を取った $\text{Im} \chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ のカラープロット。(b) $q < 2k_F$ の場合の $\text{Im} \chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ の ω 依存性。(c) $q > 2k_F$ の場合の $\text{Im} \chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ の ω 依存性。 $\hbar = m = 1.0$ で計算している。1次元の場合、 $\text{Im} \chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ が有限の値を取るとき、 ω に関しては定数値である。

図 2(a) に横軸に ω 、縦軸に q をとった $\text{Im} \chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ のカラープロットを示す。 ω の上限 ω_{\max} 、下限 ω_{\min} は 3次元の場合と同じ表式で、それぞれ $\omega_{\max} = \frac{\hbar q^2}{2m} + qv_F$ 、 $\omega_{\min} = \frac{\hbar q^2}{2m} - qv_F$ である。図 2(b) に $q = k_F < 2k_F$ での $\text{Im} \chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ の ω 依存性を、図 2(c) に $q = 2.5k_F > 2k_F$ での $\text{Im} \chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ の ω 依存性をそれぞれ示す。3次元系との重要な違いは、 $q < 2k_F$ かつ $0 < \omega < qv_F - \frac{\hbar q^2}{2m}$ の領域で $\text{Im} \chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ が有限の値を持たないことである。

4 物理的考察

ここではもう少し踏み込んで、1次元自由電子の場合になぜ $q < 2k_F$ で有限の ω_{\min} が現れるのかを考察しよう。やや乱暴だが結論から言えば、3次元フェルミ球の表面は連続的である一方、1次元フェルミ球の表面は離散的であるために、このような特異性が現れるのである。

図3(a)に3次元自由電子ガスのフェルミ球を示す。絶対零度での $\omega \sim 0$ の散乱とは、フェルミ面直下 k にある電子が、限りなく小さいエネルギーを得て、フェルミ面直上の点 $k + q$ に散乱される場合に該当する。3次元空間上では、等エネルギー面としてのフェルミ面は一様な球面を形成するため、 $q < 2k_F$ となるどのような q に対しても $\omega \sim 0$ となるような散乱先の波数 $k + q$ が存在する。一方で、図3(b)に示す1次元自由電子ガスのフェルミ面は $k = \pm k_F$ に点状に存在する。このとき、フェルミ面直下 k にある電子が $\omega \sim 0$ の散乱によりフェルミ球直上 $k + q$ にはじき出されるような場合は、 $q \sim 0$ か $q \sim 2k_F$ の2通りしかない。実際に、図2(b)に表示されている範囲で、 $\omega \sim 0$ で $\text{Im}\chi^0(q, \omega)$ が有限となる q に該当するのは $q = 2k_F$ のみである(数値計算の都合上 $q \sim 0$ 付近のプロットは省略しているが、 $q = 0$ でも $\omega \sim 0$ で $\text{Im}\chi^0(q, \omega)$ は有限の値をもつ。厳密には $1/q$ オーダーで $\text{Im}\chi^0(q, \omega)$ は発散している)。

一般の ω に対する場合も考察しよう。図3(c)に示すように、1次元フェルミ面の場合、有限の $q < 2k_F$ の散乱に対してはかならず有限の励起 ω を伴うこともわかる。 $-k_F$ か k_F の近いほうを選べば ω の下限が小さくなるため、系の対称性によれば $q = k_F$ を挟んで励起に必要なエネルギー ω_{\min} の q 依存性は対称となることもわかる。励起エネルギーの下限 ω が最大となるのは $q = k_F$ のときで、その値は $\hbar^2 k_F^2 / 2m$ である。

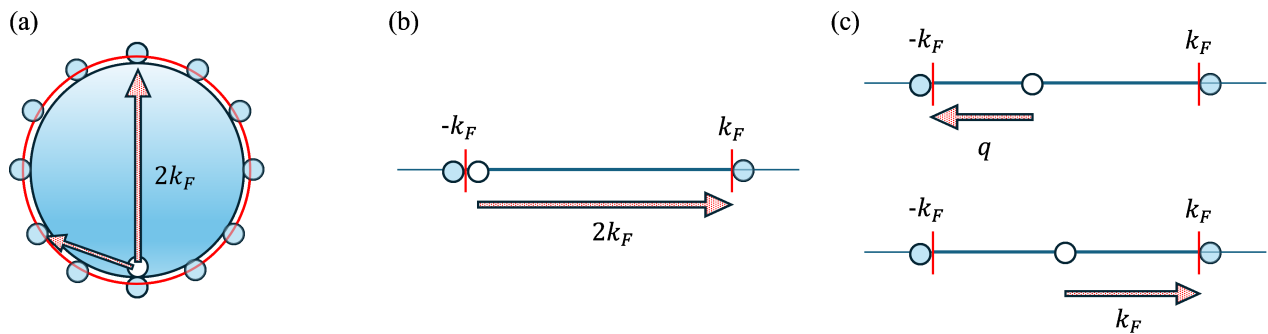


図 3: (a)3次元自由電子ガスのフェルミ球。フェルミエネルギー近傍では、 $q < 2k_F$ のあらゆる q に対して、 $\omega \sim 0$ となるような散乱先が存在する。(b)1次元電子ガスのフェルミ球。もちろん球と言っているが k 空間で線状である。フェルミ球内部でかつフェルミ面付近にある電子がフェルミ面のすぐ外に散乱される場合を考えている。(c)1次元電子ガスのフェルミ球における有限の ω に対する散乱に関する模式図。

金属はフェルミ面を持ち、1次元フェルミ面を持つ例は稀である。あったとしても、電子の伝導方向が特定の方向に強く限定される擬1次元物質が存在する程度である。実はどのような小さな励起でも存在することが、フェルミ球を持つ金属の一つの特徴であり、近藤効果などの重要な現象に結びつくのである。

参考文献

- [1] 斯波弘之『固体の電子論』(森北出版)