

Thomas-Fermi 遮蔽について

永井佑紀

平成 17 年 6 月 16 日

この note の目的は、jellium モデルから、Thomas-Fermi 遮蔽を導くことである。

Jellium モデル

ジュリウムモデル、あるいは、ジェリウムモデルとも言う。

このモデルは、イオンや電子が液体のように振舞うとしている。つまり、固体特有の結晶構造やバンド構造を無視している。

Thomas-Fermi 遮蔽

一様な電子液体に外部電荷 $q(\mathbf{r})$ を与えたと考える。十分に時間が経てば、この外部電荷により $\phi(\mathbf{r})$ の正味のポテンシャルが生じ、平衡状態に達しているだろう。このポテンシャルを求めることが目的である。

電子のポテンシャルは、外部電荷の与えたポテンシャルによって $\Delta U(\mathbf{r}) = -e\phi(\mathbf{r})$ だけ変化したとする。このとき、化学ポテンシャル μ は外部電荷の有無にかかわらず平衡状態に達していれば一定である。したがって、

$$\mu = \varepsilon_F^0 = \varepsilon_F(\mathbf{r}) - e\phi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

が成り立つだろう。ここで、 ε_F^0 は自由電子のフェルミエネルギーである。 ε_F^0 は、体積 V に入った N 個の自由粒子の Schrodinger 方程式を解けばよく¹、結果だけ記すと

$$\varepsilon_F^0 = \frac{\hbar}{2m} (3\pi^2 n_0)^{\frac{2}{3}} \quad (2)$$

となる。ここで、 $n_0 = N/V$ である。また、化学ポテンシャル μ を一定に保つように電荷密度が変動するので

$$\varepsilon_F(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2m} (3\pi^2 n(\mathbf{r}))^{\frac{2}{3}} \quad (3)$$

と書けるとしよう。また、この電荷密度の変動は十分小さいとして $n(\mathbf{r}) = n_0 + \delta n(\mathbf{r})$ と書けば

$$\varepsilon_F(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2m} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} (n_0 + \delta n(\mathbf{r})) \quad (4)$$

$$\simeq \frac{\hbar}{2m} (3\pi^2 n_0)^{\frac{2}{3}} \left(1 + \frac{2}{3} \frac{\delta n(\mathbf{r})}{n_0} \right) \quad (5)$$

$$= \varepsilon_F^0 \left(1 + \frac{2\delta n(\mathbf{r})}{3n_0} \right) \quad (6)$$

であるから、ポテンシャル $\phi(\mathbf{r})$ は

$$e\phi(\mathbf{r}) = \frac{2\varepsilon_F^0}{3n_0} \delta n(\mathbf{r}) \quad (7)$$

¹長岡洋介 統計力学 岩波基礎物理シリーズ 岩波書店 p. 211

という関係を満たさねばならない。

また、ポテンシャル $\phi(\mathbf{r})$ は Poisson 方程式も満たす必要がある。外部電荷 $q(\mathbf{r})$ 、電荷密度の偏り $-e\delta n(\mathbf{r})$ による Poisson 方程式は、

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = -4\pi(q(\mathbf{r}) - e\delta n(\mathbf{r})) \quad (8)$$

であるから、上式に式 (7) を代入すると

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = -4\pi \left(q(\mathbf{r}) - \frac{6\pi e^2 n_0}{\epsilon_F^0} \phi(\mathbf{r}) \right) \quad (9)$$

$$\left(\nabla^2 - \frac{6\pi e^2 n_0}{\epsilon_F^0} \right) \phi(\mathbf{r}) = -4\pi q(\mathbf{r}) \quad (10)$$

となる。この方程式を解くことでポテンシャル $\phi(\mathbf{r})$ を得ることができる。ここで $\phi(\mathbf{r}) = V^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ 、 $q(\mathbf{r}) = V^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}} q_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ として方程式に代入すると \mathbf{k} に関する方程式が得られ、

$$(k^2 + k_S^2) \phi_{\mathbf{k}} = 4\pi q_{\mathbf{k}} \quad (11)$$

$$\phi_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi q_{\mathbf{k}}}{(k^2 + k_S^2)} \quad (12)$$

となる。ここで、 $k_S^2 = \frac{6\pi e^2 n_0}{\epsilon_F^0}$ とおいた。さらに、

$$\epsilon_{\mathbf{k}} k^2 \phi_{\mathbf{k}} \equiv (k^2 + k_S^2) \phi_{\mathbf{k}} \quad (13)$$

で誘電率 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ を定義すれば、

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = 1 + \frac{k_S^2}{k^2} \quad (14)$$

であり

$$\phi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}}} \frac{4\pi q_{\mathbf{k}}}{k^2} \quad (15)$$

となる。これが、波数表示での Thomas-Fermi 遮蔽によるポテンシャルである。

「遮蔽」があるということをよりわかりやすくするために、ポテンシャルを実空間表示する。外部電荷として、点電荷を仮定する。つまり、

$$q(\mathbf{r}) = Q\delta(\mathbf{r}) = QV^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}} V^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (16)$$

とする。式 (12) に代入すると、

$$\phi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{4\pi Q}{(k^2 + k_S^2)} \quad (17)$$

となる。これを逆フーリエ変換する。積分の詳細には立ち入らず結果だけ示すと

$$\phi(\mathbf{r}) = Q \frac{e^{-k_S r}}{r} \quad (18)$$

である。これが、遮蔽されたクーロンポテンシャル² である。

²中嶋貞雄 超伝導入門 新物理学シリーズ 培風館 p. 9