

1.1) 试采用Drude模型，推导出Widdemann-Franz 定律。

Drude模型下：

电流

$$I = \frac{\Delta q}{\Delta t} = -\frac{neSL}{\Delta t}$$

电流密度

$$\vec{j} = \frac{I}{S} = -ne\vec{v}$$

平均速度

$$\vec{v} = \vec{v}_0 + \vec{v}_t = -\frac{eE\tau}{m}$$

$$\vec{j} = \frac{ne^2\tau}{m} E$$

电导率

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = \frac{ne^2\tau}{m}$$

热导率

$$K = \frac{1}{3} C_v \bar{v} l$$

常温下（经典图象）

$$C_v = \frac{3}{2} n K_B \quad \frac{3}{2} K_B T = \frac{1}{2} m \bar{v}^2$$

$$l = \bar{v} \tau$$

$$\therefore K = \frac{1}{3} C_v \bar{v} l = \frac{1}{3} C_v \bar{v}^2 \tau$$

$$= \frac{1}{3} C_v \frac{3K_B T}{m} \tau = \frac{C_v K_B \tau}{m}$$

$$\therefore \frac{K}{\sigma} = \frac{\frac{3}{2} n K_B}{\frac{ne^2\tau}{m}} \cdot \frac{m}{ne^2\tau}$$

$$= \frac{3K_B^2}{2e^2} \cdot T = LT \quad (L \text{ 为常数})$$

2) 学完Sommerfield模型后，试解释为什么 Drude模型可以很好地解释Widdemann-Franz定律

Widdemann-Franz定律描述的是非低温下的情况，这时候L是常数。在推导过程中，弛豫时间的影响被消除了。因此反而能成立。

实际上，Sommerfield模型与Drude模型的区别是电子的统计分布规律不同。Drude模型相对于Sommerfield模型，将电子对热容的贡献高估了，而平均自由程低估了，能很好的解释。

$$\kappa = \frac{1}{3} C_v \bar{v} L$$

2. 试推导一维、二维下自由电子气的能态密度公式及在 $T=0K$ 时的费米能级与电子平均能量。

解：(1) 一维时，

$$dN = 2 \times \frac{L}{2\pi} \times 2dk$$

其中第一个 2 表示电子自旋简并，第二个 2 表示一维 $\pm k$ 对称简并。根据

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \rightarrow dk = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} dE,$$

得到能量空间状态密度为

$$D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{1}{\sqrt{E}} = C_{1D} \frac{1}{\sqrt{E}}.$$

$T=0K$ 时， $f(E)=1$ ($E < E_f$), 因此系统总的状态数

$$N = \int_0^\infty f(E) \rho(E) dE = \int_0^{E_{F0}} f(E) \rho(E) dE = \frac{2l}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} E_{F0}^{\frac{1}{2}}$$

因此，
$$E_{F0} = \left(\frac{N\pi}{2l} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m}} \right)^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{8m}$$

系统的电子平均能量为

$$U = \frac{1}{N} \int_0^{E_f} E f(E) \rho(E) dE = \frac{2}{3} \frac{C_{1D}}{N} E_f^{\frac{3}{2}} = \frac{1}{3} E_f$$

(2) 二维时,

$$dN = 2 \times \frac{A}{(2\pi)^2} 2\pi k dk,$$

能量空间状态密度为

$$D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{Am}{\pi \hbar^2} = C_{2D}.$$

T=0K时, $f(E)=1$ ($E < E_f$), 因此系统总的状态数

$$N = \int_0^{E_f} f(E) \rho(E) dE = C_{2D} E_f$$

$$\text{因此, } E_f = \frac{C_{2D}}{N} = \frac{Am}{\pi \hbar^2 N}$$

$$\text{系统的电子平均能量为 } U = \frac{1}{N} \int_0^{E_f} E f(E) \rho(E) dE = \frac{1}{2} \frac{C_{2D}}{N} E_f^2 = \frac{1}{2} E_f$$

3. 已知Na具有体心立方结构，点阵常数 $a_{\text{Na}}=0.4282 \text{ nm}$ ，Al具有面心立方结构，点阵常数 $a_{\text{Al}}=0.4041 \text{ nm}$ ，试求两种金属绝对零度时的费米半径，并与第一布里渊区的位置作比较。

Na具有体心立方结构，每个晶胞具有2个原子，1个自由电子，故自由电子密度

$$n = \frac{N}{V} = \frac{2 \times 1}{(0.4282 \times 10^{-7})^3} = 2.5473 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$

绝对零度下的费米半径为 $k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}} = (3\pi^2 \times 2.5473 \times 10^{28})^{\frac{1}{3}} = 9.1 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$

具有 **bcc** 结构的一价金属

其布里渊区是一个正12面体，从布里渊区心到边界的最短距离在 $[110]$ 方向上。

$$k_{\min} = \frac{2\pi}{a} \left[\left(\frac{1}{2} \right)^2 + \left(\frac{1}{2} \right)^2 + 0 \right] = 1.414 \frac{\pi}{a}$$

$$\frac{k_F}{k_{\min}} = 0.877$$

Al具有面心立方结构，每个晶胞具有4个原子，3个自由电子，故自由电子密度

$$n = \frac{N}{V} = \frac{4 \times 3}{(0.4282 \times 10^{-7})^3} = 1.52838 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$$

绝对零度下的费米半径为 $k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}} = (3\pi^2 \times 1.52838 \times 10^{29})^{\frac{1}{3}} = 1.75 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$

具有 **fcc** 结构

其布里渊区是一个截角8面体，从布里渊区心到边界的最短距离在 $[111]$ 方向上。

$$k_{\min} = \frac{2\pi}{a} \left[\left(\frac{1}{2} \right)^2 + \left(\frac{1}{2} \right)^2 + \left(\frac{1}{2} \right)^2 \right] = 1.732 \frac{\pi}{a}$$

$$\frac{k_F}{k_{\min}} = 1.30164$$

4. 根据Drude模型，金属中自由电子的运动方程为（可自行推导）：
$$\frac{d\bar{p}(t)}{dt} = -\frac{\bar{p}(t)}{\tau} + \bar{f}(t)$$

- 其中 $\bar{p}(t)$ 为电子的动量， τ 为相邻两次碰撞之间的电子自由运动时间（弛豫时间）， $\bar{f}(t)$ 为电子所受的外力。请在线性响应的范围内，推导金属在频率为 ω 的电磁波作用下的电导率。在此基础上，可尝试导出金属的介电函数。
- 并讨论在什么波长下，对于电磁波辐射，金属铝看起来是透明的？

- 提示：频率为 ω 的电磁波中 $\bar{E} = \bar{E}_0 e^{-i\omega t}$ $\bar{B} = \bar{B}_0 e^{-i\omega t}$
- 金属在电磁波作用下的运动方程

$$\frac{d\bar{p}(t)}{dt} = -\frac{\bar{p}(t)}{\tau} - e\bar{E} - e\bar{v} \times \bar{B}$$

- 忽略磁场项作用，运动方程写为：
$$\frac{d\bar{p}(t)}{dt} = -\frac{\bar{p}(t)}{\tau} - e\bar{E}$$

- 解：设频率为 ω 的电磁波中 $\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}$

$$\vec{B} = \vec{B}_0 e^{-i\omega t}$$

- 金属在电磁波作用下的运动方程

$$\frac{d\vec{p}(t)}{dt} = -\frac{\vec{p}(t)}{\tau} - e\vec{E} - e\vec{v} \times \vec{B}$$

- 忽略磁场项作用（ $-e\vec{E}$ 和 $-e\vec{v} \times \vec{B}$ ），运动方程写为：

$$\frac{d\vec{p}(t)}{dt} = -\frac{\vec{p}(t)}{\tau} - e\vec{E}$$

$$\therefore \frac{d\vec{v}}{dt} + \frac{\vec{v}}{\tau} = -\frac{e}{m} \vec{E}_0 e^{-i\omega t}$$

- 解方程得

$$\vec{v} = C e^{-\frac{t}{\tau}} - \frac{e\tau E_0 e^{-i\omega t}}{m} \frac{1}{1 - i\omega\tau}$$

- 第一项随时间的增加迅速衰减，稳定时为零。

$$\therefore v = -\frac{e\tau E_0 e^{-i\omega t}}{m} \frac{1}{1-i\omega\tau}$$

$$\therefore \text{电导率 } \sigma(\omega) = \frac{j}{E} = \frac{-env}{E} = -\frac{ne^2\tau}{m} \frac{1}{1-i\omega\tau} = \sigma(0) \frac{1+i\omega\tau}{1+(\omega\tau)^2}$$

- 极化电流 $\vec{j} = \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} = -i\omega \vec{P}$

$$\therefore \text{极化率 } \chi = \frac{\vec{P}}{\varepsilon_0 \vec{E}} = \frac{i\sigma}{\varepsilon_0 \omega}$$

- 介电函数 $\varepsilon(\omega) = 1 + \chi = 1 + \frac{i\sigma(\omega)}{\varepsilon_0 \omega}$

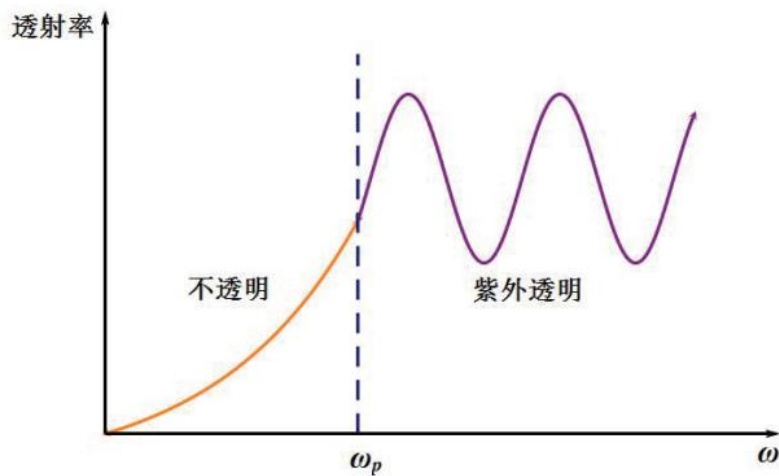
金属的有效介电常数

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i/\tau)}$$

描述了良导体从直流 ($\omega = 0$) 到紫外 ($\omega > 10^{16} \text{Hz}$) 的整个频谱的介电行为。

$$\omega_p = \sqrt{\frac{n_e e^2}{\varepsilon_0 m}}$$

等离子体共振频率



光波段

等离子体频率

$\omega\tau \gg 1$. $\omega > \omega_p$ 时. 金属是透明的

$$\tau = \frac{m\sigma}{ne^2}$$

$$\omega \gg \frac{1}{\tau} = \frac{ne^2}{m\sigma} = \frac{5.1 \times 10^{21}}{\sigma} \approx 10^{16}$$

$$\omega > \omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{\epsilon_0 m}} = \sqrt{\frac{18.1 \times 10^{28} \times (1.602 \times 10^{-19})^2}{8.854 \times 10^{-12} \times 9.11 \times 10^{-31}}} = 2.4 \times 10^{16}$$

$$\lambda = \frac{c}{\omega/2\pi} < \frac{3 \times 10^8}{2.4 \times 10^{16}/2\pi} = 7.85 \times 10^{-8} \text{ m} = 78.5 \text{ nm.}$$

波长小于 78.5 nm 时. 金属 Al 是透明的.

5、已知银的密度为 10.5 g/cm^3 ，当温度从绝对零度变化到室温（300K），银金属中电子的费米能变化多少？

在 $T \neq 0\text{K}$ 时，费米能量

$$E_F = E_F^0 \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{K_B T}{E_F^0} \right)^2 \right]$$

所以，当温度从绝对零度升到室温（300K）时，费米能变化为

$$E_F - E_F^0 = -\frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{E_F^0} \right)^2$$

代入相关数据得

$$E_F^0 = \frac{(6.63 \times 10^{-27})^2 (\text{erg} \cdot \text{s})^2}{2 \times 9.1 \times 10^{-28} (\text{g})} \left(\frac{3 \times 5.9 \times 10^{-27} (\text{cm}^{-3})}{8 \times 3.14} \right)^{2/3}$$
$$\approx 8.87 \times 10^{-12} (\text{erg}) \approx 5.54 (\text{eV})$$

$$n = \frac{\rho}{m} = \frac{10.5}{108/6.022 \times 10^{23}} = 5.9 \times 10^{22} (\text{cm}^{-3})$$

在 $T=0\text{K}$ 时，费米能量为

$$E_F^0 = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3}$$

$$E_F - E_F^0 = -\frac{3.14^2}{12} \frac{(1.38 \times 10^{-16} \times 300)^2}{8.87 \times 10^{-12}}$$
$$\approx -1.6 \times 10^{-16} (\text{erg}) \approx -10^{-4} (\text{eV})$$

可见，温度改变时，费米能量的改变是微不足道的。

6、拓展阅读并列此实验数据中涉及目前学到的固体物理的专业名词及物理过程。

The low temperature heat capacity C , displays a temperature dependence that cannot solely be attributed to an electronic term (γT) plus an acoustic phonon term (βT^3), as demonstrated by plotting C/T versus T^2 in figure 6. Including an additional Einstein phonon contribution of the form

$$nR \left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega_0 / (k_B T)}}{(e^{\hbar \omega_0 / (k_B T)} - 1)^2} \quad (7)$$

produces a fit curve that follows the measured data closely (blue line in figure 6). Here, $n = (1.91 \pm 0.05)$ f.u. is the spectral weight attributed to this Einstein contribution, in number of modes per formula unit, R is the molar gas constant, and $\omega_0 = \frac{k_B}{\hbar} (30.5 \pm 0.2)$ K is the frequency of the Einstein mode. We also find $\gamma = (16.7 \pm 0.9)$ mJ mol⁻¹ K⁻² and $\beta = (7.8 \pm 0.2)$ mJ mol⁻¹ K⁻⁴, corresponding to a Debye temperature of $\theta_D = \left(\frac{12\pi^4 n_a R}{5\beta} \right)^{1/3} \simeq 126$ K, where $n_a = 8$ is the number of atoms per formula unit of In₅Bi₃.

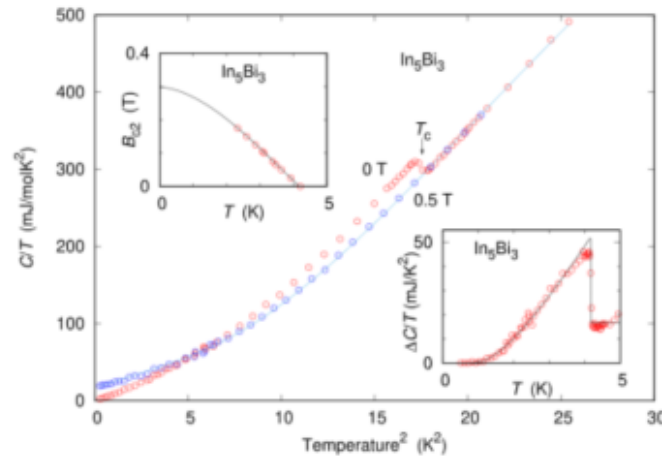


Figure 6. Sommerfeld ratio of the heat capacity C/T of In₅Bi₃ versus T^2 (main panel), showing the heat capacity anomaly for zero applied field (red symbols) at the transition temperature T_c , as well as the normal state data in 0.5 T applied field (blue symbols). The line shows the result of fitting the normal state data to $C/T = \gamma T + \beta T^3 + C_{\text{Einstein}}/T$ (see text). The left inset shows the upper critical field versus temperature, as extracted from the mid-points of the resistive transitions shown in figure 5. The line shows the Werthamer–Helfand–Hohenberg clean-limit curve [55]. The right inset shows the Sommerfeld ratio of the electronic contribution to the specific heat, obtained by subtracting the fitted phonon terms from experimental data. The line shows the expectation from BCS theory for a zero-temperature gap magnitude of $2\Delta/(k_B T_c) = 4.28$.