金属自由电子气体模型

光学性质

自由电子气体的光学性质本质上是其在电磁场中的响应，反映在样品的折射率、消光系数、反射率等参数上。此处涉及到的光的波长为$10^3 nm$到$10^2 nm$，从红外到紫外光。

由麦克斯韦方程组可以得到：

$$\nabla^2 \boldsymbol{E} - \mu_0 \sigma \frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \boldsymbol{E}}{\partial t^2} = 0$$

代入以下单色波解

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)}$$

可以得到：

$$k^2 = \epsilon_0 \mu_0 \omega^2 + i \mu_0 \sigma \omega = \mu_0 \omega^2 (\epsilon_0 + i \frac{\sigma}{\omega})$$

相比于不导电介质$k^2 = \mu_0 \epsilon_0 \omega^2$，金属自由电子气体的介电常数为复数：

$$\epsilon = \epsilon_0 + i \frac{\sigma}{\omega}$$

代入$\sigma = \sigma_1 + i\sigma_2 = \frac{\sigma_0}{1+(\omega\tau)^2} + i \frac{\sigma_0 \omega \tau}{1+(\omega\tau)^2}$，得到相对介电常数

$$\epsilon_r \equiv \frac{\epsilon}{\epsilon_0} = 1 - \frac{\sigma_0 \tau}{\epsilon_0 (1 + \omega^2 \tau^2)} + i \frac{\sigma_0}{\epsilon_0 \omega (1 + \omega^2 \tau^2)}$$

引入等离子体频率$\omega_p^2 = \frac{ne^2}{\epsilon_0 m}$：表示自由电子气体作为整体相对于正电荷背景集体运动的频率。

{% notel red 引入%}

等离子体振荡

假定在圆柱体内使电子气相对于静止的由离子实构成的正电荷均匀背景平移Δ，出现强度为$-ne\Delta AL$的偶极矩，相应的电极化强度为$p = -ne\Delta$，又有电中性要求$\epsilon_0 E + p = 0$，则位移电子受到电场

$$E = -\frac{p}{\epsilon_0} = \frac{ne\Delta}{\epsilon_0}$$

则电子的运动方程：

$$m \frac{d^2 \Delta}{dt^2} = -\frac{ne^2}{\epsilon_0} \Delta$$

方程的解即为纵向的电荷密度振荡，振荡频率为ω_p。

{% endnotel %}

$$\epsilon_r = \epsilon_1 + i\epsilon_2 = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \tau^{-2}} + i \frac{\omega_p^2 \tau}{\omega (1 + \omega^2 \tau^2)}$$

电磁波在真空中传播的速度为光速$c = (\epsilon_0 \mu_0)^{-1/2}$，在自由电子气体中变为$v = \omega / k$，可得折射率为

$$n_c = \frac{c}{v} = (\frac{\epsilon_0 + i\sigma/\omega}{\epsilon_0})^{1/2} = \epsilon_r^{1/2}$$

显然，折射率为复数，将其写为

$$n_c = n_1 + in_2$$

其中，实部n_1为通常意义的折射率，虚部n_2为消光系数。

所以波矢k可以改写为：

$$k = \frac{\omega}{c}(n_1 + in_2)$$

假设电磁波沿垂直于金属表面的z方向传播，单色波解为：

$$E = E_0 e^{i\omega(\frac{n_1}{c}z - t) - \frac{n_2\omega}{c}z}$$

由于光强I正比于E^2，则

$$I = I_0 e^{-\frac{2n_2\omega}{c}z} = I_0 e^{-\alpha z}$$

I_0为$z = 0$处的光强，吸收系数

$$\alpha = \frac{2n_2\omega}{c}$$

入射光的反射率R是反射通量与入射通量的比值，等于相应电场振幅的平方比，

$$R = \frac{(n_1 - 1)^2 + n_2^2}{(n_1 + 1^2) + n_2^2}$$

对于n_1, n_2，可由$n_c^2 = \epsilon_r$得到如下关系式：

$$n_1^2 - n_2^2 = 1 - \frac{\omega_p^2\tau^2}{1 + \omega^2\tau^2}$$

$$2n_1n_2 = \frac{\omega_p^2\tau^2}{\omega(1 + \omega^2\tau^2)}$$

金属自由电子气体的光学响应大致分为三个区：

1. 吸收区：发生在$\omega\tau \ll 1$的频段。此时$\epsilon_1 \approx -(\omega_p\tau)^2; \epsilon_2 \approx \frac{(\omega_p\tau)^2}{\omega\tau}$，且$\epsilon_2 \gg \epsilon_2$。

   折射率有如下简化:

   $$n_1^2 - n_2^2 \approx -\omega_p^2\tau^2$$

   $$2n_1n_2 \approx \frac{\omega_p^2\tau}{\omega}$$

   由此可得n_1与n_2大致相等、均远大于1，反射率

   $$R \approx 1 - 2(\frac{2\omega}{\omega_p^2\tau})^{1/2}$$

   $\tau \approx 10^{-14}s$，这一区域从直流一直延伸到远红外。

2. 反射区：发生在$1 \le \omega\tau \le \omega_p\tau$。此时相对介电常数：

$$\epsilon_r \approx 1 - (\frac{\omega_p}{\omega})^2 + i\frac{\omega_p^2}{\omega^3\tau}$$

折射率：

$$n_1 \approx \frac{\omega_p^2}{2\omega^2\tau(\omega_p^2-\omega^2)^{1/2}} \approx \frac{\omega_p}{2\omega^2\tau}$$

$$n_2 \approx (\frac{\omega_p^2}{\omega^2}-1)^{1/2} \approx \frac{\omega_p}{\omega}$$

反射率：

$$R \approx 1-\frac{2}{\omega_p\tau}$$

3. 透明区：发生在$\omega > \omega_p$频段，已进入紫外波段。相对介电常数的实部大于0，消光系数(虚部)很小，折射率有：

$$n_1 \approx [1-(\frac{\omega_p}{\omega})^2]^{1/2} \approx 1$$

$$n_2 \approx \frac{\omega_p^2}{3\omega^3\tau} \approx 0$$

反射率R变得极小，近乎透明。

霍尔效应和磁阻

之前均忽略了磁场对电子的影响，考虑电磁场同时存在的单电子准经典动力学方程：

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

假定磁场在z方向，电场在xy平面，考虑稳态，$d\boldsymbol{p}/dt=0$，电流密度$\boldsymbol{J}=-ne\boldsymbol{v}$，

上式可分解为

$$\sigma_0 E_x = J_x+\omega_c\tau J_y$$

$$\sigma_0 E_y = -\omega_c\tau J_x + J_y$$

其中σ_0为$\boldsymbol{B}=0$时的直流电导率，$\omega_c=eB/m$为回旋频率。

{% notel red 引入 %}

在z方向上，由于洛伦兹力以及非零的v_z，电子将以螺旋线运动，在xy平面上的投影成圆形，角频率即为回旋频率。

1. $\omega_c\tau \ll 1$时，电子走圆周的一小部分即发生散射，然后重新开始；
2. $\omega_c\tau \gg 1$时，电子在两次散射之间可完成多次圆周运动，这种运动呈现量子化的特点。

{% endnotel %}

当$J_y=0$时，$E_y \neq 0$，被称为霍尔效应，

$$E_y = -\frac{\omega_c\tau}{\sigma_0}J_x = -\frac{B}{ne}J_x$$

其使得电子所受到的洛伦兹力与库仑力相互抵消。

引入霍尔系数

$$R_H = \frac{E_y}{J_xB_x}(=-\frac{1}{ne})$$

横向磁阻表示在与电流方向垂直的外磁场作用下，在电流方向上电阻的变化，此处即电阻率 $\rho(B)=E_x/J_x$的变化。稳态时$J_y=0$，理论上$J_x=\sigma_0 E_x$，横向磁阻为零，但实验表明金属的横向磁阻并不是零。

金属的热导率

温度梯度会使金属中产生热量流动，当温度梯度较小时，可近似为热流与温度梯度成比例

$$\boldsymbol{J}_Q=-\kappa\nabla T$$

其中κ为材料的热导率，负号表示热流方向与温度梯度方向相反，总是从高温流向低温。

由于金属的热导率远高于绝缘体，所以金属中的热量主要有导电电子传输。借用气体分子运动论的结果：

$$\kappa=\frac{1}{3}c_V vl=\frac{1}{3}c_V v^2\tau$$

准经典模型用v_F替换v，

$$\kappa=\frac{\pi^2k_B^2n\tau}{3m}T$$

假设热导的弛豫时间同电导，

$$\frac{\kappa}{\sigma T}=\frac{1}{3}(\frac{\pi k_B}{e})^2=2.45\times10^{-8}\mathrm{W}\cdot\Omega/\mathrm{K}^2$$