

限制在一维谐振势下的三维自由电子气的一些热力学性质

邵宗乾 陈金望 李玉奇 潘孝胤

Thermodynamical properties of a three-dimensional free electron gas confined in a one-dimensional harmonic potential

Shao Zong-Qian Chen Jin-Wang Li Yu-Qi Pan Xiao-Yin

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), **63**, 240502 (2014) DOI: 10.7498/aps.63.240502

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.240502>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2014/V63/I24>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

条形畴结构的 FeCoAlON 薄膜磁性的研究

[Investigation of magnetic properties of FeCoAlON thin films with stripe domain structure](#)

物理学报.2013, 62(21): 217503 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.217503>

自旋为 1/2 的 XY 模型亚铁磁棱型链的物性和有序-无序竞争

[Properties and order-disorder competition of spin-1/2 XY model in the ferrimagnetic diamond chain](#)

物理学报.2012, 61(18): 187502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.187502>

Pt 插层对铁磁/反铁磁界面交换耦合的影响

[Effect of Pt spacers on interface exchange coupling in ferromagnetic/antiferromagnetic bilayers](#)

物理学报.2012, 61(16): 167503 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.167503>

相互作用突然开启后的反铁磁海森伯模型

[The antiferromagnetic Heisenberg model after a suddenly switched-on interaction](#)

物理学报.2011, 60(3): 031101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.031101>

多孔 SiO₂ 包裹磁性纳米颗粒 Fe₃O₄ 的制备与表征

[Preparation and characterization of magnetic nanoparticles of Fe₃O₄ coated with mesoporous SiO₂](#)

物理学报.2011, 60(1): 017501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.017501>

限制在一维谐振势下的三维自由电子气的一些热力学性质*

邵宗乾 陈金望 李玉奇 潘孝胤†

(宁波大学理学院, 宁波 315211)

(2014年6月11日收到; 2014年8月18日收到修改稿)

利用围路积分表达的计算系统热力学势的一个公式, 得到被一维谐振子势限制、有垂直磁场作用的三维自由电子气的在任意温度下的热力学势的精确解析表达式. 然后利用其研究了不同温度和尺度区域内磁化强度、磁化率和比热随磁场强度的变化情况. 研究表明, 低温下磁化强度、磁化率和比热随磁场强度变化出现振荡现象, 其中比热还会出现两种不同的振荡模式.

关键词: 热力学势, 磁化强度, 磁化率, 比热**PACS:** 05.30.Fk, 75.20.-g, 75.70.Ak**DOI:** 10.7498/aps.63.240502

1 引言

在半导体物理和介观物理中, 量子力学的尺度效应一直以来都受到了广泛的关注^[1], 无相互作用自由电子气热力学量的尺度效应更是如此, 例如三维小尺度电子气的朗道抗磁性^[2]和二维电子气的尺度效应亦受到广泛的关注^[3-22]. 朗道抗磁性问题研究无相互作用的电子气在磁场中的运动. 对于这个问题, 之前经典物理已有一个非常著名的定理: Bohr-van Leeuwen^[15,16]定理. 该定理指出经典世界是不存在抗磁性、顺磁性的. 其原因是虽然磁场可以使电子做回旋运动产生磁性, 但由于有表面作用, 电子在与表面碰撞时产生一个表面电流, 单个电子产生的电流相互抵消. 当然从统计学的观点来看, 洛伦兹力不做功, 这样系统能量将与磁场无关, 也就没有抗磁性了. 因此, 抗磁性是量子理论的结果.

1930年, 朗道用量子力学来重新考虑这一问题时发现, 当 $K_B T$ 比能级间隙还要大时, 表面电流就会消失, 这样就有了朗道抗磁性. 但他在计算抗磁

性时并未把边界和表面效应考虑进去. 所以早在朗道计算出朗道抗磁性以来就有很多作者做过尺度对抗磁性的影响方面的工作^[3-14]. 如Friedman^[6]在讨论小尺度的朗道抗磁性时, 用一维谐振子势来代替 Y 轴方向的尺度, 而其余两个方向采用周期边界条件, 磁场沿 Z 轴来讨论尺度对抗磁性的影响. 之后Childers和Pincus^[7]用这一模型(Friedman模型)讨论了尺度对简并三维自由电子气体的抗磁性、dHvA效应等的影响. Friedman模型看上去像是人为制造的, 并不是真正的模拟自然的尺度效应, 但由于此模型有解析的波函数和能级, 所以在讨论尺度效应相关现象中得到了较多的应用. 如Denton^[9]就用这一模型继续讨论了自由电子气的磁化率受尺度的影响, 在文中他既讨论了除 Y 轴方向有谐振子势以外, 还讨论了 X, Y 方向都有谐振子时的情况, 并得到了与当时实验相符的结果. Grzesik^[14]用另一种方法重新讨论了Friedman模型, 他从自由能出发, 应用拉普拉斯变换和环绕积分相关理论得到了零温下自由能的解析表达式, 该结果与Childers和Pincus得到的结果一致. 他还用近似方法研究了有限温度的情况, 得到了各热

* 国家自然科学基金(批准号: 11275100)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: panxiaoyin@nbu.edu.cn

力学量的相应表达式. 近年来, 介观物理性质的研究也较多地采用了此模型^[19,23,24], 比如Kuzmenko和Mikhajlov^[25]就用三个谐振子势来代替三个维度讨论介观物理性质, 发现了dHvA效应的cluster现象. Wendler和Grigoryan^[26]用类似的方法研究了准一维电子气体在磁场中的量子现象.

以上研究的关键步骤是对热力学势的计算, 但是他们都没有得到任意温度情形的热力学量的精确解析表达式. 因此他们的结果都是某些近似下得到的, 一旦超出近似的有效范围便不能适用. 比如低温近似下得到的热力学势只能研究低温下的情形, 温度稍高便可能不合适. 有鉴于此, 本文借助围路积分得到了该模型热力学势的精确解析表达式, 从而可以讨论任意温度、粒子数和磁场强度等下的热力学量的性质, 弥补了之前研究的不足.

需要指出的是, 在三维体系中, 巨正则系综和正则系综对热力学量影响是非常小的, 这不同于二维体系. 二维体系中, 化学势随磁场振荡非常明显, 起着非常重要的作用^[19,24,27], 所以必须考虑两种系综的区别. 本文先用得到了化学势随磁场强度振荡的图像研究了尺度和温度对其振荡的影响, 发现两种系综基本上没有区别. 之后在巨正则系综的框架内研究了磁化强度、磁化率在不同的温度和尺度区域内随磁场强度的变化. 接下来着重讨论比热的dHvA效应受尺度的影响和温度的影响. 众所周知, 比热是一个非常重要的物理量, 通过比热可以研究体系的相变等各种重要物理学现象, 早在1930年, de Haas和van Alphen就发现了自由电子气在磁场中磁化强度随磁场振荡, 但由于比热振荡的理论值非常小, 所以直到1968年才被Sullivan和Seidel^[28]发现. 这为以后比热的测量做了先驱性的工作, 该文中还做了有限尺度的比热测量. 尽管他们的系统与本文不一样, 但对本文的理论是有借鉴意义的.

2 模型介绍

先介绍Friedman模型. Friedman最早研究了以下三维自由电子气模型, 它在沿Z方向有磁场强度为B的磁场作用, 该作用在X和Z方向都是足够大的, 可采用周期边界条件, 且在Y轴方向上用一个谐振子势 $\frac{m^* \Omega_0^2 y^2}{2}$ 来代替Y轴方向的有限尺度, 其中 m^* 是电子的有效质量, Ω_0 是经典的谐振

子频率. 这个谐振子频率 Ω_0 和Y轴方向的尺度L是通过下面两个步骤而紧密联系的.

第一步是把粒子数用写成下面的表达式:

$$N = \frac{LS}{3\pi^2} \left[\frac{2m^* \mu(0)}{\hbar^2} \right]^{\frac{3}{2}}, \quad (1)$$

将零温化学势 $\mu(0)$ 和Y轴方向尺度L联系起来, 其中S是X和Z平面的面积. 这个表达式是费米气体在零温时尺度作为无限大得到的. 第二步是假设

$$\frac{1}{2} m^* \Omega_0^2 L^2 = p^2 \mu(0), \quad (2)$$

这里, p 是一个待定常数, 它的取值取决于在方程(2) $L \rightarrow \infty$ 时根据模型得到的粒子密度应与方程(1)得到的粒子密度相等. 后来通过复杂的计算得到 p , 这样每一个尺寸L就唯一确定了一个谐振子势. 从方程(2)中可以看出, 尺度L越大谐振子频率 Ω_0 就越小. 此模型的单粒子哈密顿量为

$$\mathcal{H} = \frac{\left[\mathbf{P} - \left(\frac{e}{c} \right) \mathbf{A} \right]^2}{2m^*} + \frac{1}{2} m^* \Omega_0^2 y^2, \quad (3)$$

这里 $\mathbf{A} = -B(y, 0, 0)$ 是矢势,

$$\omega = (\omega_c^2 + \Omega_0^2)^{\frac{1}{2}}, \quad \omega_c = \frac{eB}{m^* c}$$

是回旋频率. 通过变换后可以得到系统的能谱和波函数, 这里不讨论波函数的行为, 得到的能谱为

$$E_{n, k_x, k_z} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \left(\frac{\Omega_0}{\omega} \right)^2 \times \frac{\hbar^2 k_x^2}{(2m^*)} \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \quad (4)$$

从中可以看出之前的朗道能级的简并被破坏了, 变成了非简并状态, 但当 $L \rightarrow \infty$ 时, 能级又会简并.

3 热力学势的计算

有了能谱的解析表达式后, 接下来计算热力学势. 众所周知, 遵从Fermi-Dirac统计的系统其热力学势为

$$\Omega(\beta, V, \mu) = -\frac{1}{\beta} \text{Tr} \ln (1 + e^{-\beta(\hat{H} - \mu)}), \quad (5)$$

这里 $\beta = \frac{1}{k_B T}$, μ 是化学势. 通过 $-\Omega(\beta, V, \mu)$ 对 μ 求一次偏导就可以得到系统的平均粒子数为

$$\langle N \rangle = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right) = \text{Tr} f(\hat{H}), \quad (6)$$

这里 $f(x) \equiv \frac{1}{1 + e^{\beta(x - \mu)}}$ 是Fermi-Dirac分布函数. 通过单粒子能谱我们可以计算出其配分函数为

$$Z(\beta) = D \text{Tr} (e^{-\beta \hat{H}})$$

$$= \frac{S\omega m^*}{2\pi\hbar^2\beta\Omega_0 \sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}, \quad (7)$$

其中 $D = 2$ 是考虑了自旋向上和向下而导致的简并. 接下来的关键是要得到热力学势的解析表达式 $\Omega(\beta, V, \mu)$. 应用公式^[17]

$$\Omega = \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty} \frac{\pi e^{k\mu} Z(k)}{\beta \sin\left(\frac{\pi k}{\beta}\right) (-k)} dk, \quad (8)$$

把方程 (7) 代入到方程 (8) 得到

$$\begin{aligned} \Omega = & - \left[\frac{S\omega m^*}{2\hbar^2\beta\Omega_0} \right] \frac{1}{2\pi i} \\ & \times \int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty} \frac{e^{k\mu}}{\sinh\left(\frac{k\hbar\omega}{2}\right) \sin\left(\frac{\pi k}{\beta}\right) (k^2)} \\ & \times dk, \end{aligned} \quad (9)$$

上式的积分可以用留数理论得到解析表达式. 由 Jordan 引理, 必须考虑下面两种情况: $\mu \leq \frac{\hbar\omega}{2}$ 和 $\mu \geq \frac{\hbar\omega}{2}$. 在第一种情况中, 为保证积分收敛, 围道积分必须绕向复平面 k 的右边, 这样一来就只有一级极点 $k = l\beta, l > 0, l \in \mathbb{Z}$ 需要考虑. 通过留数计算, 得到在这种情况下下的热力学势为

$$\begin{aligned} \Omega_a = & \left[\frac{S\omega m^*}{2\pi\hbar^2\beta^2\Omega_0} \right] \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m^2} \\ & \times \frac{e^{m\beta\mu}}{\sinh\left(\frac{m\beta\hbar\omega}{2}\right)}. \end{aligned} \quad (10)$$

在第二种情况中围道须绕左边, 这是就有两种极点, 分别是一级极点和三级极点. 其中 (i) $k_0 = 0$ 为三级极点; (ii) $k_n = n\beta, n < 0, n \in \mathbb{Z}$, 和 (iii) $k_m = \frac{2m\pi i}{\hbar\omega}, m \in \mathbb{Z}, m \neq 0$ 为一级极点. 通过复杂的留数运算得到

$$\Omega_b = \Omega_i + \Omega_{ii} + \Omega_{iii}, \quad (11)$$

其中

$$\begin{aligned} \Omega_i = & - \left[\frac{S\omega m^*}{2\pi\hbar^2\beta^2\Omega_0} \right] \\ & \times \left[\frac{(4\pi^2 + 4\beta^2\mu^2 - \beta^2\hbar^2\omega^2)\mu}{12\hbar\omega} \right], \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \Omega_{ii} = & \left[\frac{S\omega m^*}{2\pi\hbar^2\beta^2\Omega_0} \right] \\ & \times \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m e^{-m\beta\mu}}{m^2 \sinh\left(\frac{m\beta\hbar\omega}{2}\right)}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \Omega_{iii} = & \left[\frac{S\omega m^*}{2\pi\hbar^2\beta^2\Omega_0} \right] \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(\beta\hbar\omega)}{\pi} \\ & \times \frac{(-1)^m \sin\left(\frac{2\pi m\mu}{\hbar\omega}\right)}{m^2 \sinh\left(\frac{2\pi^2 m}{\beta\hbar\omega}\right)}. \end{aligned} \quad (14)$$

这样我们便得到了 Friedman 模型的热力学势在任意温度下的精确解析表达式. 接下来我们利用它来研究一些物理量的性质.

4 低温和高温两种情况的一些物理量性质讨论

本小节中主要讨论系统平均粒子数、系统化学势、磁性质和比热. 对于三维自由电子气体, 我们知道在温度 $T = 0$ 时, 系统的化学势将等于费米能 (即 $\mu(0) = E_F$) 能级将被填满到 E_F , 随着温度的升高化学势慢慢变小, 当温度很高时化学势将变成负数. 为方便我们分为两种情况进行研究, 一种是高温情况, 一种是低温. 特别是后一种, 我们将着重讨论.

4.1 高温情况: $k_B T \gg \hbar\omega$

在温度比较高的情况下, 热涨落占据主导地位, 各种量子现象将会消失, 费米气体热力学量随磁场强度振荡的现象也将消失. 在三维情况中, 低温时化学势通常是 $\mu > \frac{\hbar\omega}{2}$, 随着温度的升高化学势逐渐减小, 一直到 $\mu \leq \frac{\hbar\omega}{2}$ 的情况. 所以 $\mu \leq \frac{\hbar\omega}{2}$ 对应于温度比较高的情形, 此时 $k_B T \gg \hbar\omega$, 把 (10) 式代入 (6) 式便可以得到平均粒子数为

$$\begin{aligned} N = & \left[\frac{S\omega m^*}{2\pi\hbar^2\beta\Omega_0} \right] \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m+1}}{m} \\ & \times \frac{e^{\frac{m\mu}{k_B T}}}{\sinh\left(\frac{m\hbar\omega}{2k_B T}\right)} \\ & \approx \left[\frac{k_B^2 T^2 m^* S}{\pi\hbar^3\Omega_0} \right] \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m^2} e^{\frac{m\mu}{k_B T}}. \end{aligned} \quad (15)$$

从上式可以看出, 由于化学势 μ 是负数, 所以上式级数收敛, 另一方面可知化学势与磁场强度无关. 所以当温度不变时, 化学势 μ 可视为常数, 可以用巨正则系综来计算讨论热力学量. 当温度很高时, 热涨落非常强烈, 将看不到量子振荡现象,

磁场对系统几乎不起作用, 这就是Friedman讨论的情况, 高温时电子气没有朗道抗磁性, 也没有了dHvA振荡现象. 在巨正则系综框架下比热可以用 $c_V = -k_B T \left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial T^2} \right) \Big|_V$ 获得, 当温度非常高, $\beta \rightarrow 0$ 时, 得到比热表达式为

$$C_V \simeq \left[\frac{k_B m^* S}{\pi \hbar^3 \Omega_0} \right] \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m+1} e^{\frac{m\mu}{k_B T}}}{m} \times \left[\frac{6k_B^2 T^2}{m^2} - \frac{4k_B T \mu}{m} + \mu^2 \right], \quad (16)$$

它也不随磁场变化. 因此高温时没有太多值得关注的内容, 接下来我们着重关注低温情形及可能出现的量子现象.

4.2 低温情况: $k_B T < \hbar \omega$

4.2.1 化学式和两种系综的比较

在温度很低时有 $\mu > \frac{\hbar \omega}{2}$, 应用(6)和(11)式得到

$$\langle N \rangle = N_i + N_{ii} + N_{iii}, \quad (17)$$

其中,

$$N_i = \left[\frac{S \omega m^*}{2\pi \hbar^2 \beta^2 \Omega_0} \right] \times \left[\frac{(4\pi^2 + 12\beta^2 \mu^2 - \beta^2 \hbar^2 \omega^2)}{12\hbar \omega} \right], \quad (18)$$

$$N_{ii} = - \left[\frac{S \omega m^*}{2\pi \hbar^2 \beta \Omega_0} \right] \times \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m e^{-m\beta\mu}}{m \sinh\left(\frac{m\beta\hbar\omega}{2}\right)}, \quad (19)$$

$$N_{iii} = - \left[\frac{S \omega m^*}{\pi \hbar^2 \beta \Omega_0} \right] \times \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m \cos\left(\frac{2\pi m \mu}{\hbar \omega}\right)}{m \sinh\left(\frac{2\pi^2 m}{\beta \hbar \omega}\right)}. \quad (20)$$

从上式可以看出平均粒子数 $\langle N \rangle$ 依赖于温度 T 、磁场强度 B 和化学势 μ . 在讨论热力学问题时, 常分为两种情况讨论, 第一种是固定化学势 μ 为常数, 而粒子数是变化的, 这就是巨正则系综; 第二种情况是固定粒子数不变, 这就是正则系综. 固定粒子数不变在实验上一般比固定化学势不变要方便, 所以在实验上往往采用正则系综, 这时当温度恒定时, 化学势 μ 将随着磁场强度的变化而发生振荡.

我们知道, 采用正则系综时得到的表达式通常以隐函数的形式出现, 所以理论上采用巨正则系综比正则系综要方便. 在二维情况中这两种系综差别很大, 化学势的振荡有非常重要的作用, 这方面已经有很多人讨论过. 而三维情形则可能不同, 为此接下来我们固定粒子数来看化学势随磁场强度 B 的变化.

在图2中, 我们用数值的方法得到了化学势随磁场强度振荡的图像, 可以看出随着温度的升高, 化学势逐渐变小, 振幅也逐渐变小, 而在图1中, 可以看到随着尺度的变小, 化学势的振荡周期变大, 而且振荡幅度也变大了, 这与文献[7]中磁振荡现象不同. 但从两幅图中可以看出, 振幅都非常小, 以至于可以忽略不计. 所以在此模型中两种系综的区别非常小, 由于此模型中采用巨正则系综较方便计算, 接下来我们使用巨正则系综进行计算.

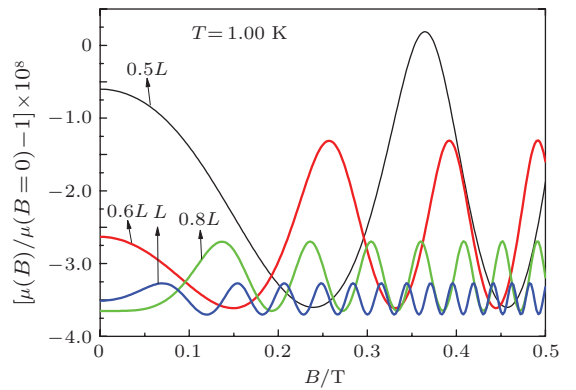


图1 (网刊彩色) 不同尺度 ($0.5L, 0.6L, 0.8L, L$) 下, $\frac{\mu(B)}{\mu(B=0)} - 1$ 与磁场强度 B 的关系. 图中设定 $\mu = 1.7094 \text{ eV}$, $N/A = 10^{22} \text{ m}^{-3}$, $L = 10^{-6} \text{ m}$, $T = 1.0 \text{ K}$

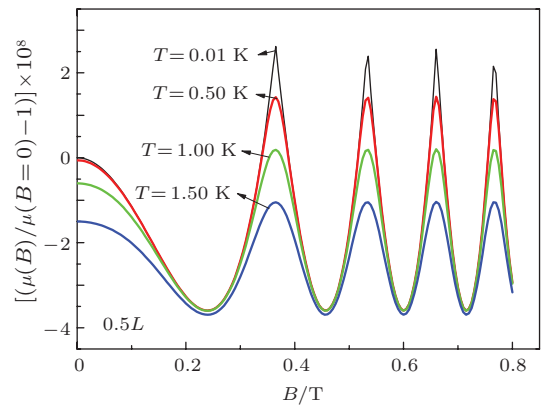


图2 (网刊彩色) 在不同温度 ($0.01, 0.50, 1.00, 1.50 \text{ K}$) 下, $\frac{\mu(B)}{\mu(B=0)} - 1$ 与磁场强度 B 的关系. 图中设定尺寸为 $0.5L$, 其中 $L = 10^{-6} \text{ m}$, 此外设定 $\mu = 1.7094 \text{ eV}$, $N/A = 10^{22} \text{ m}^{-3}$

4.2.2 磁化强度

由于可以根据 $M = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial B}\right)_{T,V,\mu}$ 来计算系统的

磁化强度, 应用 (11) 式通过计算得到

$$M = M_i + M_{ii} + M_{iii}, \quad (21)$$

其中

$$M_i = -\frac{\mu\mu_B\omega_c m^* S}{6\pi\Omega_0\hbar^2}, \quad (22)$$

$$M_{ii} = -\frac{\mu_B\omega_c m^* S}{\pi\hbar^3\Omega_0\omega\beta^2} \times \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m e^{-m\beta\mu}}{m \sinh\left(\frac{m\beta\omega\hbar}{2}\right)} + \frac{\mu_B\omega_c m^* S}{2\pi\hbar^2\Omega_0\beta} \times \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m e^{-m\beta\mu} \cosh\left(\frac{m\beta\omega\hbar}{2}\right)}{m \sinh^2\left(\frac{m\beta\omega\hbar}{2}\right)}, \quad (23)$$

$$M_{iii} = \frac{2\mu\mu_B\omega_c m^* S}{\hbar^3\Omega_0\omega\beta} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m}$$

$$\times \frac{\cos\left(\frac{2m\pi\mu}{\hbar\omega}\right)}{\sinh\left(\frac{2m\pi^2}{\beta\hbar\omega}\right)} - \frac{2\mu_B\omega_c m^* S}{\hbar^2\Omega_0\beta} \times \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m \sin\left(\frac{2m\pi\mu}{\hbar\omega}\right)}{m^2 \sinh\left(\frac{2m\pi^2}{\beta\hbar\omega}\right)} - \frac{2\mu_B m^* S}{\hbar^3\Omega_0\beta^2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m} \times \frac{\cosh\left(\frac{2m\pi^2}{\beta\hbar\omega}\right) \sin\left(\frac{2m\pi\mu}{\hbar\omega}\right)}{\sinh^2\left(\frac{2m\pi^2}{\beta\hbar\omega}\right)}, \quad (24)$$

式中 $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m^*c}$ 是玻尔磁子. 我们根据磁化强度的表达式给出了对比图形. 从图 3 可以看出, 随着尺度的变小, 磁化强度随磁场振荡的频率变小, 而振幅保持不变, 这些结论和文献 [7] 得到的结论是一致的. 从图 4 可以看出, 振荡幅度随着温度升高而减小, 这是可以理解的, 因为当温度升高的时候系统的热涨落占主导地位. 当温度升高到一定程度时, 这种量子振荡现象也就消失了.

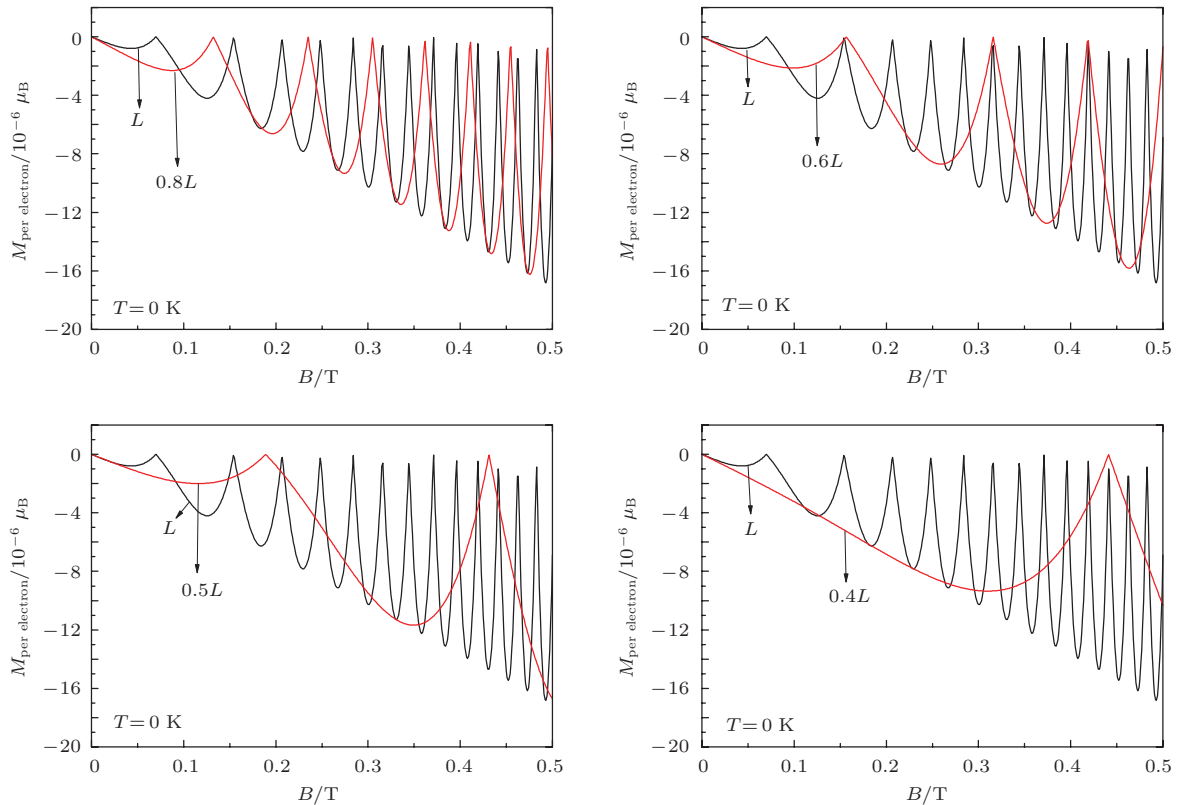


图 3 (网刊彩色) 在不同尺度 ($L, 0.8L, 0.6L, 0.5L, 0.4L$) 下, 磁化强度 $M_{\text{per electron}}$ 随磁场强度 B 的变化. 图中设定 $\mu = 1.7094 \text{ eV}$, $N/A = 10^{22} \text{ m}^{-3}$, $L = 10^{-6} \text{ m}$, $T = 0 \text{ K}$

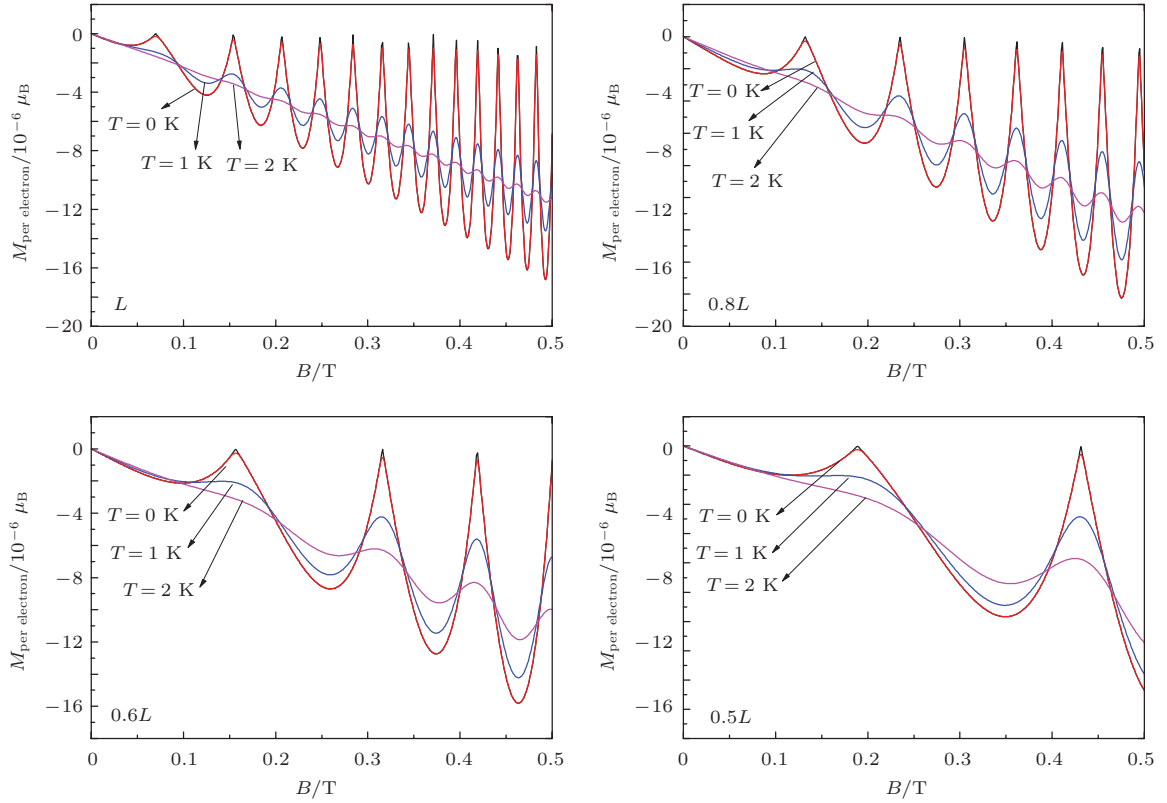


图4 (网刊彩色) 在不同温度 (0, 1, 2 K) 下, 单个粒子平均磁化强度 $M_{\text{per electron}}$ 与磁场强度 B 的关系 图中分别设定固定尺寸在 $(0.5L, 0.6L, 0.8L, L)$, 其中 $L = 10^{-6}$ m; $\mu = 1.7094$ eV, $N/A = 10^{22}$ m $^{-3}$

4.2.3 磁化率

现在讨论磁化率随磁场强度变化情况. 由于磁化率 $\chi = -\left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial B^2}\right)_{T,V,\mu}$, 所以应用 (11) 式, 通过计

算可以得到磁化率的解析表达式为

$$\chi = \chi_i + \chi_{ii} + \chi_{iii}, \quad (25)$$

其中

$$\chi_i = -\frac{\mu\mu_B^2 m^* S}{3\pi\hbar^3 \Omega_0}, \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \chi_{ii} = & -\frac{2\mu_B^2(\omega^2 + \omega_c^2)m^* S(k_B T)^2}{\pi\hbar^4 \omega^3 \Omega_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m} \frac{e^{-\frac{m\mu}{k_B T}}}{\sinh\left(\frac{m\hbar\omega}{2k_B T}\right)}, \\ & -\frac{\mu_B^2 \omega_c m^* S k_B T}{\pi\hbar^3 \omega \Omega_0} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \frac{e^{-\frac{m\mu}{k_B T}} \cosh\left(\frac{m\hbar\omega}{2k_B T}\right)}{\sinh\left(\frac{m\hbar\omega}{2k_B T}\right)} + \frac{\mu_B^2 m^* S k_B T}{\pi\hbar^3 \omega} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m} \frac{e^{-\frac{m\mu}{k_B T}} \cosh\left(\frac{m\hbar\omega}{2k_B T}\right)}{\sinh\left(\frac{m\hbar\omega}{2k_B T}\right)} \\ & -\frac{\mu_B^2 \omega_c^2 m^* S}{2\pi\hbar^2 \omega \Omega_0} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \frac{e^{-\frac{m\mu}{k_B T}}}{\sinh^3\left(\frac{m\hbar\omega}{2k_B T}\right)} \left[\cosh^2\left(\frac{m\hbar\omega}{2k_B T}\right) + 1 \right], \end{aligned} \quad (27)$$

$$\chi_{iii} = \frac{4\mu\mu_B^2 \Omega_0^2 m^* S k_B T}{\hbar^4 \omega^3 \Omega_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m} \frac{\cos\left(\frac{2\pi m \mu}{\hbar\omega}\right)}{\sinh\left(\frac{2m\pi^2 k_B T}{\hbar\omega}\right)}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{8\pi^2\mu\mu_B^2\omega_c^2m^*S(k_B T)^2}{\hbar^5\omega^4\Omega_0} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \frac{\cos\left(\frac{2\pi m\mu}{\hbar\omega}\right) \cosh\left(\frac{2m\pi^2k_B T}{\hbar\omega}\right)}{\sinh^2\left(\frac{2m\pi^2k_B T}{\hbar\omega}\right)} \\
 & + \frac{8\pi\mu^2\mu_B^2\omega_c^2m^*S k_B T}{\hbar^5\omega^4\Omega_0} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \frac{\sin\left(\frac{2\pi m\mu}{\hbar\omega}\right)}{\sinh\left(\frac{2m\pi^2k_B T}{\hbar\omega}\right)} \\
 & - \frac{4\mu_B^2m^*S k_B T}{\hbar^3\Omega_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m^2} \frac{\sin\left(\frac{2\pi m\mu}{\hbar\omega}\right)}{\sinh\left(\frac{2m\pi^2k_B T}{\hbar\omega}\right)} \\
 & - \frac{8\pi^2\mu_B^2\omega_c^2m^*S(k_B T)^3}{\hbar^5\omega^3\Omega_0^2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m} \frac{\sin\left(\frac{2\pi m\mu}{\hbar\omega}\right) \cosh\left(\frac{2m\pi^2k_B T}{\hbar\omega}\right)}{\sinh^2\left(\frac{2m\pi^2k_B T}{\hbar\omega}\right)} \\
 & + \frac{8\pi\mu\mu_B^2\omega_c^2m^*S(k_B T)^2}{\hbar^5\omega^3\Omega_0^2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m} \frac{\cos\left(\frac{2\pi m\mu}{\hbar\omega}\right)}{\sinh\left(\frac{2m\pi^2k_B T}{\hbar\omega}\right)} \\
 & - \frac{8\pi^2\mu_B^2\omega_c m^*S(k_B T)^3}{\hbar^5\omega^2\Omega_0^2} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \\
 & \times \frac{\sin\left(\frac{2\pi m\mu}{\hbar\omega}\right) \left[\cosh\left(\frac{2m\pi^2k_B T}{\hbar\omega}\right) + \sinh\left(\frac{2m\pi^2k_B T}{\hbar\omega}\right) \right]}{\sinh^2\left(\frac{2m\pi^2k_B T}{\hbar\omega}\right)} \\
 & + \frac{8\pi\mu\mu_B^2\omega_c m^*S(k_B T)^2}{\hbar^5\omega^2\Omega_0^2} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \frac{\cos\left(\frac{2\pi m\mu}{\hbar\omega}\right) \cosh\left(\frac{2m\pi^2k_B T}{\hbar\omega}\right)}{\sinh^2\left(\frac{2m\pi^2k_B T}{\hbar\omega}\right)}. \tag{28}
 \end{aligned}$$

由于上式很复杂, 我们借用计算机做图来讨论. 从图 5 和 6 可以看出, 在零温情况下, 磁化率出现了锯齿形状的振荡现象, 这一点和磁化强度不同, 同样随着尺度的缩小振荡频率变小, 当温度升高时, 振荡振幅变小, 这和磁化强度 M 是类似的.

4.2.4 系统比热

类似于高温情况, 我们得到在低温情况下比热为

$$C_V = C^{\text{mon}} + C^{\text{osc}}. \tag{29}$$

这里我们把比热分为两部分, 一部分是与磁场无关的非振荡部分:

$$C^{\text{mon}} = C_{Vi} = \frac{\pi}{3} \left(\frac{m^* S \mu k_B^3}{\hbar^3 \Omega_0} \right) T, \tag{30}$$

这一部分是不随磁场强度变化的, 因此当温度固定不变时可以把它当成常数项. 另一部分是与磁场有关的振荡部分:

$$C^{\text{osc}} = C_{Vii} + C_{Viii}, \tag{31}$$

式中

$$\begin{aligned}
 C_{Vii} = & \left[\frac{-k_B S \omega m^*}{16\pi \hbar^2 \Omega_0 T} \right] \\
 & \times \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m^2 \sinh^3\left(\frac{m\beta\hbar\omega}{2}\right)} \\
 & \times [D_1(m) + D_2(m) \cosh(m\beta\hbar\omega) \\
 & + D_3(m) \sinh(m\beta\hbar\omega)], \tag{32}
 \end{aligned}$$

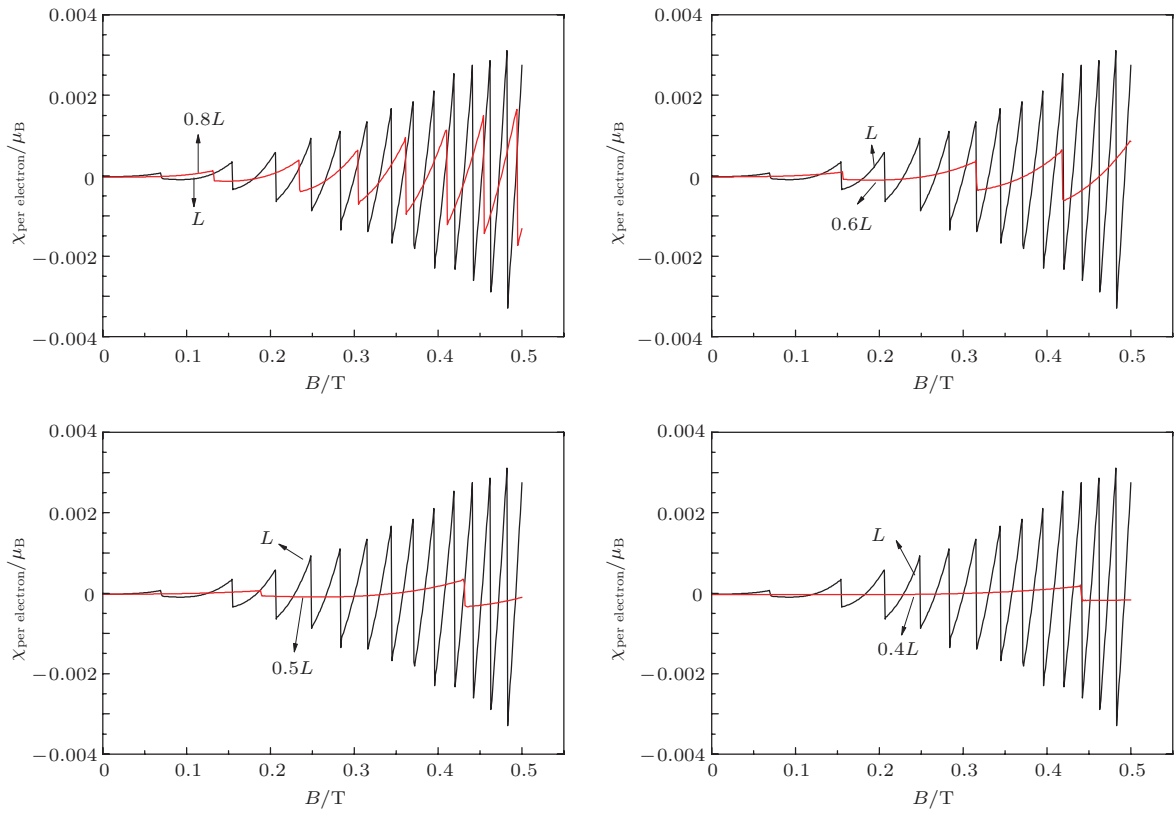


图5 (网刊彩色) 在不同尺度 ($L, 0.8L, 0.6L, 0.5L, 0.4L$) 下, 单个粒子平均磁化率 $\chi_{\text{per electron}}$ 与磁场强度 B 的关系. 图中设定 $\mu = 1.7094 \text{ eV}$, $N/A = 10^{22} \text{ m}^{-3}$, $T = 0 \text{ K}$, $L = 10^{-6} \text{ m}$

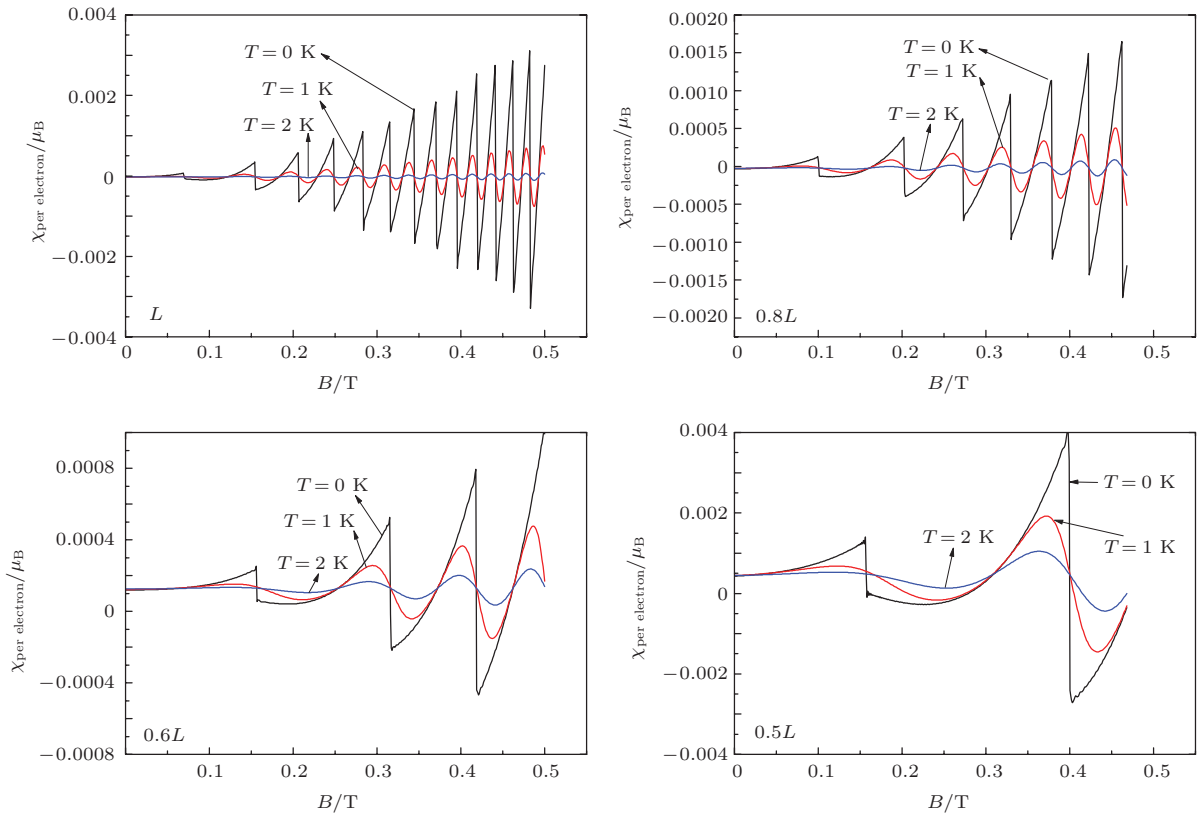


图6 (网刊彩色) 在不同温度 (0, 1, 2 K) 下, 单个粒子平均磁化强度 $\chi_{\text{per electron}}$ 与磁场强度 B 的关系. 图中分别固定尺寸在 ($L, 0.8L, 0.6L, 0.5L$), 其中 $L = 10^{-6} \text{ m}$; $\mu = 1.7094 \text{ eV}$, $N/A = 10^{22} \text{ m}^{-3}$

其中括号内的 D 系数是与 m 相关的系数,

$$D_1(m) = m^2(-4\mu^2 + 3\hbar^2\omega^2) - \frac{8m\mu}{\beta} - \frac{8}{\beta^2}, \quad (33)$$

$$D_2(m) = [4m^2\hbar^2\omega^2 - D_1(m)], \quad (34)$$

$$D_3(m) = 4m\hbar\omega(m\mu + \frac{1}{\beta}). \quad (35)$$

振荡部分的第二部分为

$$C_{V\text{iii}} = \left[\frac{Sm^*k_B^3T}{\hbar^3\Omega_0} \right] \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m \sin\left(\frac{2m\pi\mu}{\hbar\omega}\right)}{m \sinh^3\left(\frac{2m\pi^2}{\hbar\omega\beta}\right)} \times \left[-\frac{3m\pi^2}{\beta} - \frac{m\pi^2}{\beta} \cosh\left(\frac{4m\pi^2}{\hbar\omega\beta}\right) + \hbar\omega \sinh\left(\frac{4m\pi^2}{\hbar\omega\beta}\right) \right]. \quad (36)$$

我们感兴趣的是比热在低温情况下随磁场强度变化的量子现象, 因为在低温情况下电子气处于高度简并状态, 量子现象比较明显. 注意到在低温时 $C_{V\text{i}}$ 是不含磁场强度 B 的部分, 是不随磁场强度 B 振荡的, 而 $C_{V\text{ii}}$ 在低温情况下非常小, 以至于可以忽略不计. $C_{V\text{iii}}$ 是随磁场强度 B 振荡部分, 也是我们感兴趣的部分, 下面主要对比进行分析. 在低温时我们可以给出 $c^{\text{osc}}/c^{\text{mon}}$ 的值如图 7 和图 8, 从图中可以清楚地看到比热振荡部分与非振荡部分比值随磁场的变化情况. 从图 7 可以看出, 在低温时比热的振荡会出现突变现象, 随着温度的升高慢慢变得平滑; 从图 7 和图 8 可以看出, 随着温度的升高振荡振幅减小, 周期不变, 非振荡部分约是振荡部分的 10^4 倍, 所以比热的振荡现象很微弱, 以至于在实验上面很难发现; 我们还可以看到随磁场强度变化是准周期性的.

为了更加清楚地讨论低温下比热随磁场强度的振荡情况, 我们把图 7 和图 8 中的不同温度比热的振荡分开来, 重新绘制了图 9 和图 10. 从图 9 可以看到, 在非常低的温度 $T = 0.01$ K 下, 其振荡部分振荡模式是不光滑的, 上升变化慢、下降变化快, 我们把它标记为振荡模式一. 随着温度的升高, $T = 0.50$ K, 尖锐部分慢慢变得光滑, 而且出现了一个小峰, 当随着温度继续升高, $T = 0.80, 1.00$ K 其尖锐部分变得更加光滑, 小峰慢慢变大, 变得和 $T = 0.01$ K 温度时的模式一不相上下; 再随着温度的升高, 如图 10 所示, $T = 1.20, 1.40, 1.60$ K 时模式一的主要特点(即上升慢、下降快的特点)渐渐

消失, 取而代之的是另一种振荡模式: 上升快、下降慢, 我们称之为模式二. 从上面的讨论以及图像我们可以说在低温区域内随着温度的升高, 比热的振荡模式从模式一演变成模式二, 这一变化是渐变的. 这样的变化同样发生在尺度变化上. 如图 11 和图 12, 当尺度慢慢变大时, 比热的振荡模式同样会从模式一渐进地变到模式二.

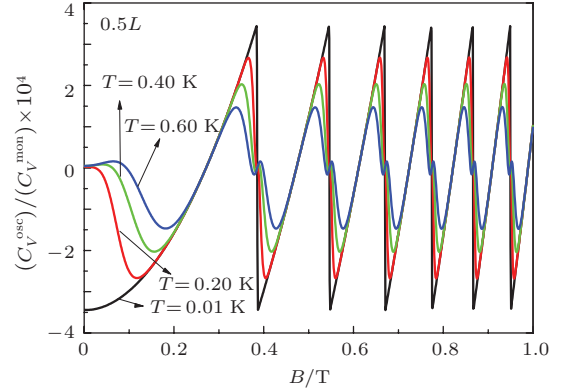


图 7 (网刊彩色) 在不同温度 ($T = 0.01, 0.20, 0.40, 0.60$ K) 下, 比热的振荡 $\left(\frac{c^{\text{osc}}}{c^{\text{mon}}}\right) \times 10^4$ 与磁场强度 B 的关系 图中固定尺寸在 $0.5L$, 其中 $L = 10^{-6}$ m; $\mu = 1.7094$ eV, $N/A = 10^{22}$ m $^{-3}$

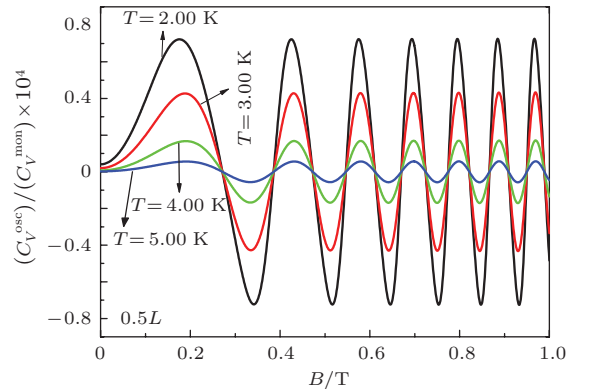


图 8 (网刊彩色) 在不同温度 ($T = 2.00, 3.00, 4.00, 5.00$ K) 下, 比热的振荡 $\left(\frac{c^{\text{osc}}}{c^{\text{mon}}}\right) \times 10^4$ 与磁场强度 B 的关系 图中固定尺寸在 $0.5L$, 其中 $L = 10^{-6}$ m; $\mu = 1.7094$ eV, $N/A = 10^{22}$ m $^{-3}$

下面我们来分析这种变化. 在低温时 $C_{V\text{ii}}$ 的值非常小, 可以忽略. 于是得到

$$\frac{c^{\text{osc}}}{c^{\text{mon}}} \approx \frac{\hbar\omega}{\pi\mu} \arctan\left(\tan\left(\frac{\pi\mu}{\hbar\omega}\right)\right), \quad (37)$$

上式对应了在低温时比热的振荡模式一. 当温度升高时,

$$\sinh\left(\frac{2m\pi^2}{\hbar\omega\beta}\right) \approx e^{\frac{2m\pi^2}{\hbar\omega\beta}}, \quad (38)$$

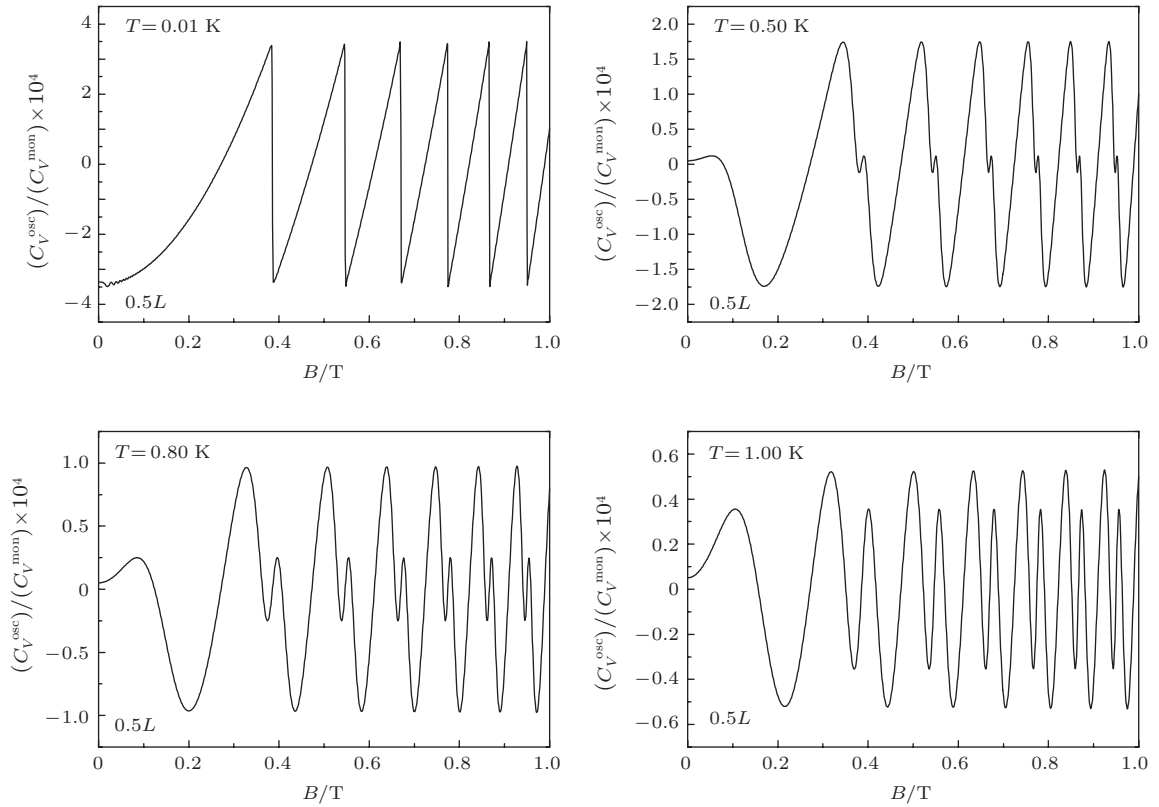


图9 在不同温度 ($T = 0.01, 0.50, 0.80, 1.00$ K) 下, 比热的振荡 $\left(\frac{C_V^{\text{osc}}}{C_V^{\text{mon}}}\right) \times 10^4$ 与磁场强度 B 的关系 图中固定尺寸在 $0.5L$, 其中 $L = 10^{-6}$ m; $\mu = 1.7094$ eV, $N/A = 10^{22}$ m $^{-3}$

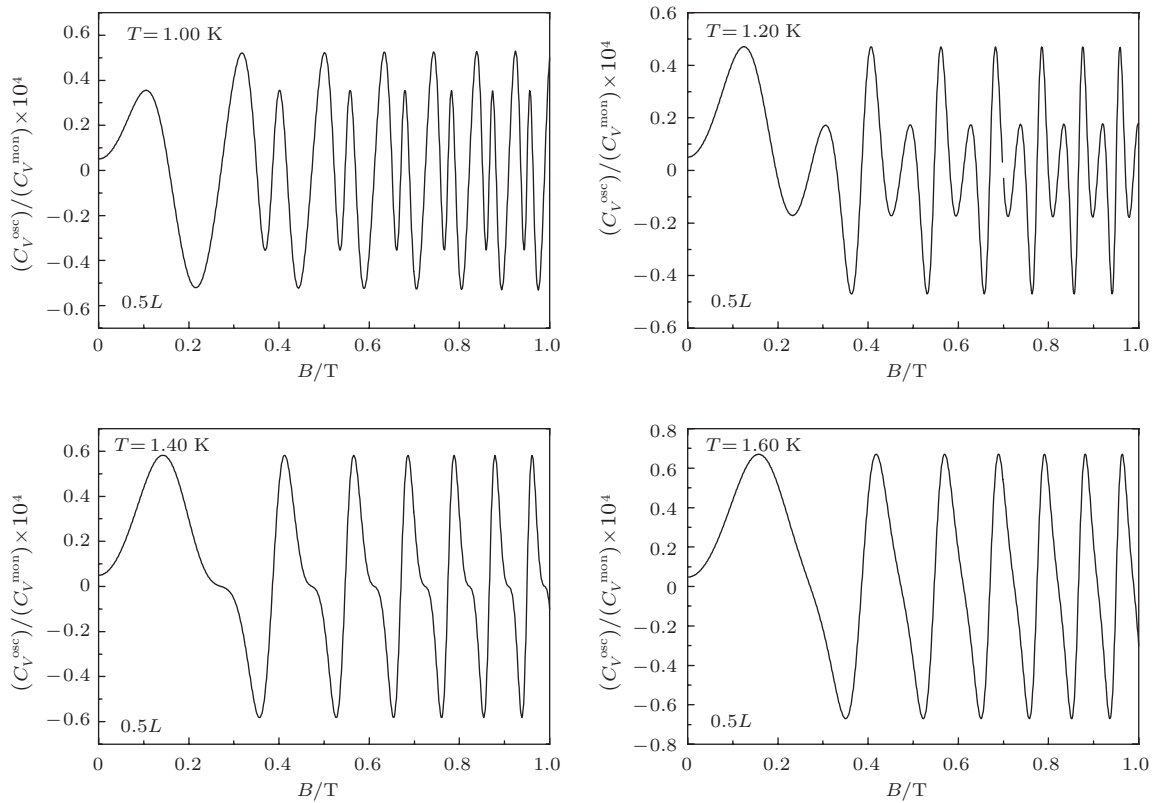


图10 在不同温度 ($T = 1.00, 1.20, 1.40, 1.60$ K) 下, 比热的振荡 $\left(\frac{C_V^{\text{osc}}}{C_V^{\text{mon}}}\right) \times 10^4$ 与磁场强度 B 的关系 图中固定尺寸在 $0.5L$, 其中 $L = 10^{-6}$ m, $\mu = 1.7094$ eV, $N/A = 10^{22}$ m $^{-3}$

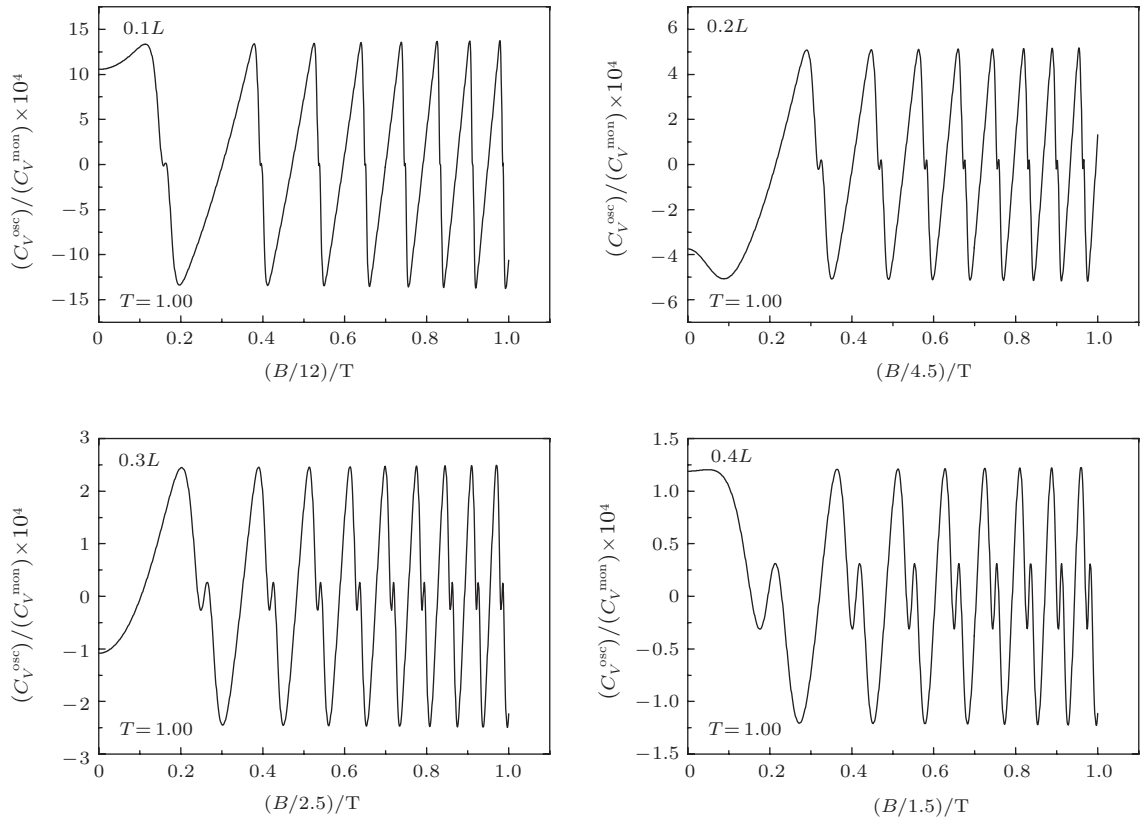


图 11 在不同尺度 ($0.1L, 0.2L, 0.3L, 0.4L$) 下, 其中 $L = 10^{-6}$ m, 比热的振荡 $\left(\frac{c^{\text{osc}}}{c^{\text{mon}}}\right) \times 10^4$ 与磁场强度 B 的关系 图中设定 $\mu = 1.7094$ eV, $T = 1.0$ K, $N/A = 10^{22}$ m $^{-3}$

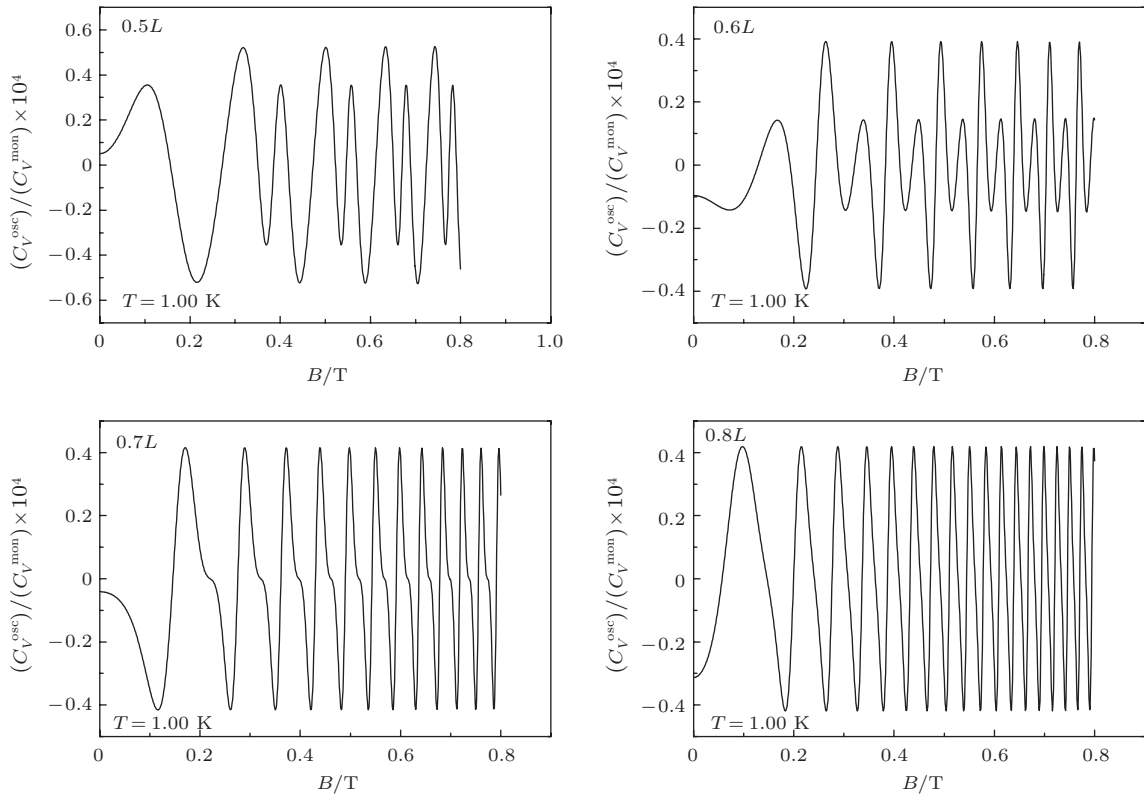


图 12 在不同尺度 ($0.5L, 0.6L, 0.7L, 0.8L$) 下, 其中 $L = 10^{-6}$ m, 比热的振荡 $\left(\frac{c^{\text{osc}}}{c^{\text{mon}}}\right) \times 10^4$ 与磁场强度 B 的关系 图中设定 $\mu = 1.7094$ eV, $T = 1.0$ K, $N/A = 10^{22}$ m $^{-3}$

所以得到

$$\frac{c^{\text{osc}}}{c^{\text{mon}}} \approx \frac{3}{\pi\mu} \left[\frac{\pi^2}{2\beta} \times \left(\frac{e^{-\frac{2m\pi^2}{\hbar\omega\beta}} \sin\left(\frac{2\pi\mu}{\hbar\omega}\right)}{e^{-\frac{4m\pi^2}{\hbar\omega\beta}} + 2e^{-\frac{2m\pi^2}{\hbar\omega\beta}} \cos\left(\frac{2\pi\mu}{\hbar\omega}\right) + 1} \right) - \frac{\hbar\omega}{2} \arctan\left(\frac{e^{-\frac{2m\pi^2}{\hbar\omega\beta}} \sin\left(\frac{2\pi\mu}{\hbar\omega}\right)}{1 + e^{-\frac{2m\pi^2}{\hbar\omega\beta}}}\right) \times \cos\left(\frac{2\pi\mu}{\hbar\omega}\right) \right]. \quad (39)$$

把上式绘图后便得到随着温度升高时模式一逐渐变到模式二的图像. 上述的模式一和模式二的讨论都是围绕着对 $c^{\text{osc}}/c^{\text{mon}}$ 的展开来进行的, 而 $c^{\text{osc}}/c^{\text{mon}}$ 的展开又依赖于 $\frac{2\pi^2}{\hbar\omega\beta} = \frac{2\pi^2 k_B T}{\hbar\sqrt{\omega_c^2 + \Omega_0^2}}$, 从(28)式可以看出 $\frac{1}{L} \propto \Omega_0$, 故升高温度和把尺度变小都可以达到使 $\frac{2\pi^2}{\hbar\omega\beta}$ 变大的效果, 所以都可以使比热的振荡模式从模式一变到模式二. 从这也可以看出, 比热的振荡现象与磁化强度和磁化率不同, 尺度和温度并不是只从频率和振幅方面影响比热. 在温度很低的情况下, 它会出现两种不同的振荡模式, 在这两种不同的振荡模式演变中, 尺度的变小和温度的升高起着类似的作用. 这一点, 只有在得到了系统比热的精确解析表达式的情况下才能够讨论, 所以在文献[6, 7]中都没有提及.

5 结 论

我们应用围路积分公式得到了任意温度下Friedman模型热力学势的精确解析表达式, 应用这一表达式讨论了系综与化学势的联系, 电子气的磁化强度、磁化率、比热在不同温度和不同尺度下随磁场强度的变化情况. 发现高温时由于热涨落占据主导, 磁化强度、磁化率、比热不随磁场强度的变化而振荡. 低温时, 随着尺度的变小, 磁化强度和磁化率都随磁场强度振荡的频率变小而振幅不变; 当温度升高时, 振荡振幅变小. 零温时, 磁化率随磁场强度出现锯齿形振荡. 这与之前的作者所讨论得到的结果基本一致, 验证了他们采用近似方法的

正确性. 比热是之前作者所没有讨论过的. 系统比热可以分为两部分, 振荡部分和非振荡部分, 后者是前者的一万倍左右, 因此振荡幅度非常小, 这和文献[28]的实验结论相符. 本文主要讨论了振荡部分在不同尺度和不同温度下随磁场强度变化的情况, 发现在低温情况下, 温度升高和尺度变大都会使比热出现两种不同的振荡模式, 并从数学上做出了解释. 但这一现象包含的物理意义还有待实验和理论进一步探索.

参考文献

- [1] Halperin W P 1986 *Rev. Mod. Phys.* **58** 533
- [2] Landau L D 1930 *Z. Phys.* **64** 629
- [3] Papapetro A 1939 *Z. Phys.* **112** 587
- [4] Dingle R B 1952 *Proc. Roy. Soc. (London) A* **212** 38
- [5] Ham F S 1953 *Phys. Rev.* **92** 1113
- [6] Friedman L 1964 *Phys. Rev.* **134** A336
- [7] Childers D, Pinkus P 1969 *Phys. Rev.* **117** 1036
- [8] Thomas R B 1973 *Phys. Rev.* **7** 4399
- [9] Denton R V 1973 *Z. Phys.* **265** 119
- [10] Meier F, Wyder P 1973 *Phys. Rev. Lett.* **30** 181
- [11] Jennings B K, Bhaduri R K 1976 *Phys. Rev. B* **14** 1202
- [12] Wang L, O'Connell R F 1986 *Phys. Rev. B* **34** 5160
- [13] Horing N J M, Gumbs G, Kamen E, Glasser M L 1990 *Phys. Rev. B* **41** 10453
- [14] Grzesik J A 2012 *AIP Advances* **2** 012105
- [15] van Leeuwen J H 1921 *J. Phys.* **2** 361
- [16] van Vleck J H 1932 *The Theory of Electric and Magnetic Susceptibility* (Oxford: Clarendon Press)
- [17] Chen J W, Pan X Y 2013 *Chin. Phys. B* **22** 117501
- [18] Meir Y, Entin-Wohlman O, Gefen Y 1990 *Phys. Rev. B* **42** 8351
- [19] Geyler V A, Margulis V A 1997 *Phys. Rev. B* **55** 2543
- [20] Wang Z J, Lü G L, Zhu C H, Huo W S 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 179701 (in Chinese) [王兆军, 吕国梁, 朱春花, 霍文生 2012 物理学报 **61** 179701]
- [21] Li Z B, Shen B G, Niu E, Liu R M, Zhang M, Sun J R 2013 *Chin. Phys. B* **22** 117503
- [22] Tian H Y, Wang J 2012 *Chin. Phys. B* **21** 017203
- [23] Gazeau J P, Hsiao P Y, Jellal A 2002 *Phys. Rev. B* **65** 094427
- [24] Champel T 2001 *Phys. Rev. B* **64** 054407
- [25] Kuzmenko N K, Mikhajlov V M 2003 *Phys. Lett. A* **311** 403
- [26] Wendler L, Grigoryan V G 1996 *Phys. Rev. B* **54** 8652
- [27] Alexandrov A S, Bratkovsky A M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 1308
- [28] Sullivan P F, Seidel G 1968 *Phys. Rev.* **173** 679

Thermodynamical properties of a three-dimensional free electron gas confined in a one-dimensional harmonical potential*

Shao Zong-Qian Chen Jin-Wang Li Yu-Qi Pan Xiao-Yin[†]

(Physics Department, Ningbo University, Ningbo 315211, China)

(Received 11 June 2014; revised manuscript received 18 August 2014)

Abstract

We study the thermodynamical properties of a noninteracting electron gas confined in one dimension by a harmonic-oscillator potential. The exact analytical expression for the thermodynamical potential is obtained by using a formula of contour integration. The magnetizations, magnetic susceptibilities, and the specific heats are then studied each as a function of the strength of the magnetic field in different regimes of the temperature and effective thickness. It is shown at low temperature, the magnetization, magnetic susceptibility, and the specific heat oscillate as the strength of the magnetic field increases. Especially, there exist two modes of oscillations for the specific heat in certain regimes of low temperature and effective thickness.

Keywords: thermodynamical potential, magnetization, magnetic susceptibility, specific heat

PACS: 05.30.Fk, 75.20.-g, 75.70.Ak

DOI: [10.7498/aps.63.240502](https://doi.org/10.7498/aps.63.240502)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11275100).

[†] Corresponding author. E-mail: panxiaoyin@nbu.edu.cn