

Fizika trdne snovi 2007/2008
 FMF, Univerza v Ljubljani

Paulijev paramagnetizem pri nizkih temperaturah

Gregor Tavčar
 16. april 2008

Magnetizacija prostih elektronov pri zunanjem magnetnem polju B_0

$$M = \mu_B^2 B_0 \int_0^\infty g'(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$$

kjer so: $g(\varepsilon)$ funkcija odvisnosti gostote elektronskih stanj od energije, $f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$ funkcija Fermi-Diracove porazdelitve in μ_B Bohrov magneton.

Integral v zgornji enačbi po pravilu 'per partes' prepisemo v

$$\int_0^\infty g'(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = [g(\infty) f(\infty) - g(0) f(0)] - \int_0^\infty g(\varepsilon) f'(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^\infty g(\varepsilon) (-f'(\varepsilon)) d\varepsilon$$

Izraz v oglatih oklepajih je nič ker je gostota stanj pri energiji nič enaka nič in ker je Fermi-Diracova funkcija pri neskončni energiji enaka nič.

Funkcijo gostote stanj $g(\varepsilon)$ razvijemo v Taylorjevo vrsto okrog vrednosti kemijskega potenciala μ

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \left[g(\mu) + g'(\mu)(\varepsilon - \mu) + \frac{1}{2} g''(\mu)(\varepsilon - \mu)^2 + \dots \right] (-f'(\varepsilon)) d\varepsilon = \\ & = \int_{-\mu}^\infty \left[g(\mu) + g'(\mu)\varepsilon + \frac{1}{2} g''(\mu)\varepsilon^2 + \dots \right] (-f'(\varepsilon + \mu)) d\varepsilon = \\ & = \int_{-\infty}^\infty \left[g(\mu) + g'(\mu)\varepsilon + \frac{1}{2} g''(\mu)\varepsilon^2 + \dots \right] (-f'(\varepsilon + \mu)) d\varepsilon = \\ & = g(\mu) \int_{-\infty}^\infty (-f'(\varepsilon + \mu)) d\varepsilon + g'(\mu) \int_{-\infty}^\infty (-f'(\varepsilon + \mu)) \varepsilon d\varepsilon + \\ & \quad \frac{g''(\mu)}{2} \int_{-\infty}^\infty (-f'(\varepsilon + \mu)) \varepsilon^2 d\varepsilon + \dots = \\ & = g(\mu) + 0 + \frac{g''(\mu)}{2\beta^2} \int_{-\infty}^\infty \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} d\varepsilon = \\ & = g(\mu) + g''(\mu) \frac{\pi}{6} (k_B T)^2 \end{aligned}$$

Zaradi relativne oddaljenosti μ -ja od ničle smo spodnjo mejo aproksimirali kar z $-\infty$.

Integral $-f'(\varepsilon + \mu)$ je enak 1; $-f'(\varepsilon + \mu)$ je sode funkcija spremenljivke ε , zato je integral v drugem členu enak nič; integral tretjega člena pa smo prepisali v standardno formo.

Seveda je tudi μ in posledično $g(\mu)$ funkcija temperature. Sedaj $g(\mu)$ razvijemo še v Taylorjevo vrsto okrog Fermijeve energije ε_F :

$$g(\mu) = g(\varepsilon_F) + (\mu - \varepsilon_F) g'(\varepsilon_F)$$

Uporabimo pogoj ohranitve števila delcev (n) (glej Sommerfeldov razvoj iz začetka predavanj)

$$\begin{aligned} \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon) d\varepsilon = n &= \int_0^{\infty} g(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \doteq \int_0^{\mu} g(\varepsilon) d\varepsilon + g'(\mu) \frac{\pi}{6\beta^2} \\ \Rightarrow (\mu - \varepsilon_F) g(\varepsilon_F) + g'(\mu) \frac{\pi}{6\beta^2} &= 0 \\ g(\mu) = g(\varepsilon_F) + (\mu - \varepsilon_F) g'(\varepsilon_F) &= g(\varepsilon_F) - \frac{\pi}{6\beta^2} \frac{(g'(\varepsilon_F))^2}{g(\varepsilon_F)} \end{aligned}$$

Končna izraza za magnetizacijo in susceptibilnost se tako glasita:

$$\begin{aligned} M &= \mu_B^2 B_0 \left[g(\varepsilon_F) - \frac{\pi}{6\beta^2} \frac{(g'(\varepsilon_F))^2}{g(\varepsilon_F)} + g''(\mu) \frac{\pi}{6\beta^2} \right] = \\ \mu_B^2 B_0 g(\varepsilon_F) \left(1 + (k_B T)^2 \left[\frac{g''(\varepsilon_F)}{g(\varepsilon_F)} - \left(\frac{g'(\varepsilon_F)}{g(\varepsilon_F)} \right)^2 \right] \right) &= M_0 \left(1 + (k_B T)^2 \left[\frac{g''(\varepsilon_F)}{g(\varepsilon_F)} - \left(\frac{g'(\varepsilon_F)}{g(\varepsilon_F)} \right)^2 \right] \right) \\ \chi &= \mu_0 \mu_B^2 g(\varepsilon_F) \left(1 + (k_B T)^2 \left[\frac{g''(\varepsilon_F)}{g(\varepsilon_F)} - \left(\frac{g'(\varepsilon_F)}{g(\varepsilon_F)} \right)^2 \right] \right) \end{aligned}$$

Kjer smo $g''(\mu)$ aproksimirali z $g''(\varepsilon_F)$ in z $M_0 = \mu_B^2 B_0 g(\varepsilon_F)$ zapisali magnetizacijo pri temperaturi $T = 0$