Fizika trdne snovi 2007/2008
FMF, Univerza v Ljubljani

Paulijev paramagnetizem pri nizkih temperaturah

Gregor Tavčar
16. april 2008

Magnetizacija prostih elektronov pri zunamnem 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' prepišemo 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 nč 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

$$\int_0^\infty \left[g(\mu) + g'(\mu)(\varepsilon-\mu) + \frac{1}{2} g''(\mu)(\varepsilon-\mu)^2 + \ldots\right](-f'(\varepsilon)) \, d\varepsilon =$$

$$= \int_{-\mu}^\infty \left[g(\mu) + g'(\mu)\varepsilon + \frac{1}{2} g''(\mu)\varepsilon^2 + \ldots\right](-f'(\varepsilon+\mu)) \, d\varepsilon \doteq$$

$$\doteq \int_{-\infty}^\infty \left[g(\mu) + g'(\mu)\varepsilon + \frac{1}{2} g''(\mu)\varepsilon^2 + \ldots\right](-f'(\varepsilon+\mu)) \, d\varepsilon =$$

$$= g(\mu) \int_{-\infty}^\infty (-f'(\varepsilon+\mu)) \, d\varepsilon + g'(\mu) +$$

$$\int_{-\infty}^\infty (-f'(\varepsilon+\mu))\,\varepsilon \, d\varepsilon + \frac{g''(\mu)}{2} + \int_{-\infty}^\infty (-f'(\varepsilon+\mu))\,\varepsilon^2 \, d\varepsilon + \ldots =$$

$$= g(\mu) + 0 + \frac{g''(\mu)}{2\beta^2} \int_{-\infty}^\infty \frac{x^2 e^x}{(e^x+1)^2} \, d\varepsilon =$$

$$= g(\mu) + g''(\mu) \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2$$

Zaradi relativne oddaljenosti μ-ja od ničle smo spodnjo mejo aproksimirali kar z -∞.
Integral $-f'(\varepsilon+\mu)$ je enak 1; $-f'(\varepsilon+\mu)$ je soda 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 Somerfeldov razvoj iz začetka predavanj)

$$\int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon)\, d\varepsilon = n = \int_0^{\infty} g(\varepsilon)\, f(\varepsilon)\, d\varepsilon \doteq \int_0^{\mu} g(\varepsilon)\, d\varepsilon + g'(\mu)\, \frac{\pi^2}{6\,\beta^2}$$

$$\Rightarrow\ (\mu - \varepsilon_F)\, g(\varepsilon_F) + g'(\mu)\, \frac{\pi^2}{6\,\beta^2} = 0$$

$$g(\mu) = g(\varepsilon_F) + (\mu - \varepsilon_F)\, g'(\varepsilon_F)\ =\ g(\varepsilon_F) - \frac{\pi^2}{6\,\beta^2}\, \frac{(g'(\varepsilon_F))^2}{g(\varepsilon_F)}$$

Končna izraza za magnetizacijo in susceptibilnost se tako glasita:

$$M = {\mu_B}^2\, B_0 \Big[g(\varepsilon_F) - \frac{\pi^2}{6\,\beta^2}\, \frac{(g'(\varepsilon_F))^2}{g(\varepsilon_F)} + g''(\mu)\, \frac{\pi^2}{6\,\beta^2} \Big] =$$

$$= {\mu_B}^2\, B_0\, g(\varepsilon_F) \left(1 + \frac{\pi^2}{6}\, (k_B\, T)^2 \Big[\frac{g''(\varepsilon_F)}{g(\varepsilon_F)} - \left(\frac{g'(\varepsilon_F)}{g(\varepsilon_F)} \right)^2 \Big] \right) =$$

$$= M_0 \left(1 + \frac{\pi^2}{6}\, (k_B\, T)^2 \Big[\frac{g''(\varepsilon_F)}{g(\varepsilon_F)} - \left(\frac{g'(\varepsilon_F)}{g(\varepsilon_F)} \right)^2 \Big] \right)$$

$$\chi = \mu_0\, {\mu_B}^2\, g(\varepsilon_F) \left(1 + \frac{\pi^2}{6}\, (k_B\, T)^2 \Big[\frac{g''(\varepsilon_F)}{g(\varepsilon_F)} - \left(\frac{g'(\varepsilon_F)}{g(\varepsilon_F)} \right)^2 \Big] \right)$$

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