

注意これは講義ノートではありません。計算の要点を抜粋しただけのものです。

7-A 磁化率

磁化 $M \equiv g\mu_B \langle S_z \rangle = \chi H$ で、 χ (=スピンの磁場の方向への向きやすさ)を磁化率という。

注) 電子の磁気モーメントは $g\mu_B S$ である (μ_B はボーア磁子、 g は定数 ≈ 2)。

7-B Curie 磁化(復習)

古典統計の場合、

$$M = \mu_B (n_{\downarrow} - n_{\uparrow})$$

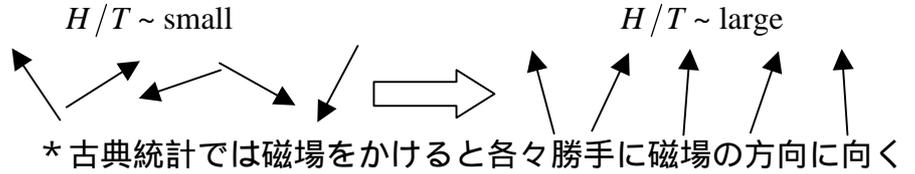
$$n_{\uparrow} + n_{\downarrow} = N$$

$$\varepsilon_{\downarrow} = -\mu_B H \quad \varepsilon_{\uparrow} = +\mu_B H$$

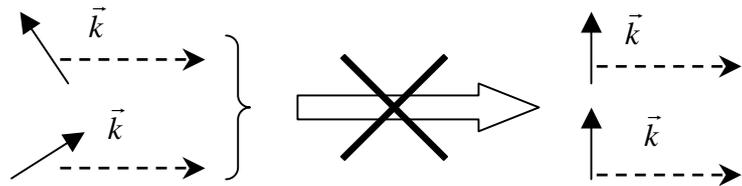
などより、

$$Z = e^{-\beta\varepsilon_{\downarrow}} + e^{-\beta\varepsilon_{\uparrow}}$$

となるので、



* 古典統計では磁場をかけると各々勝手に磁場の方向に向く



* 量子統計ではパウリ排他律のために、同じ運動量を持つ電子 (同じ状態にある電子) は、同じ向きのスピンになれない。

$U(M, S, V) = F(H, T, V) - TS - MH$ に注意すれば、よく知られた結果、

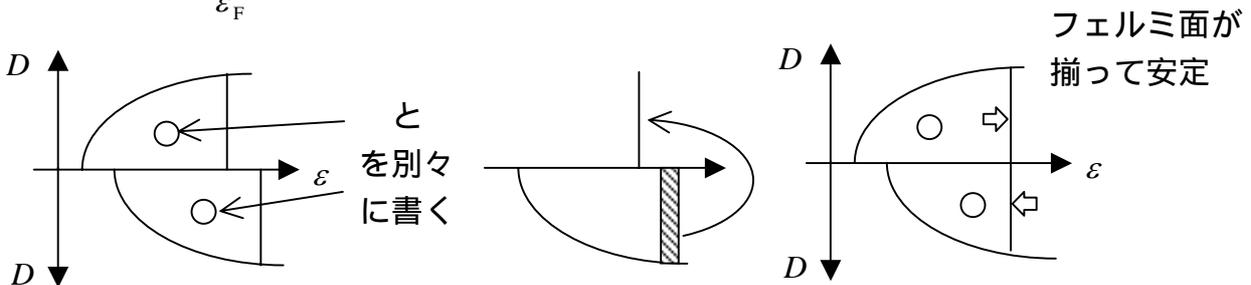
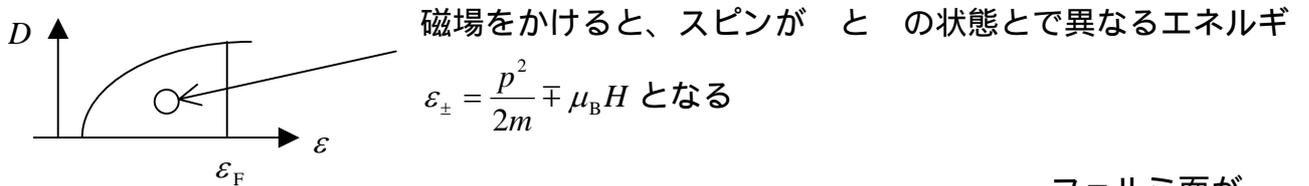
$$M = -\frac{\partial F}{\partial H} = -\frac{\partial (-k_B T \log Z)}{\partial H} = \mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B H}{k_B T}\right) \text{ を得る } \text{Curie の法則。}$$

7-C Pauli 磁化とは

動き回っている電子(自由電子)では、量子効果のために、同じ方向を向けない場合があるので、古典統計に比べて磁化は減少する。

下の図では、磁場をかけると、スピンの上向き電子と下向き電子では、エネルギーが違ってくるので、 ε_F がずれる。すると、エネルギーの高い方の電子はスピンの反転した方がエネルギーが低くなれるので、とフェルミ面が揃うまで反転が起こる。

* 量子統計に従うフェルミ粒子の磁場中でのスピンの振る舞い



上がった方の電子はスピンの反転した方が、 ε を低くできる。

7-D (Pauli 磁化の計算の準備) 化学ポテンシャルの磁場依存性

磁場無: $N = 2 \int_0^{+\infty} f(\varepsilon) D(\varepsilon) d\varepsilon$ 、磁場有: $N = n_+ + n_- = \int_0^{+\infty} [D(\varepsilon_+) + D(\varepsilon_-)] f(\varepsilon) d\varepsilon$

$D(\varepsilon_{\pm} = \varepsilon \pm \mu_B H) = D(\varepsilon) \pm \mu_B H \cdot D'(\varepsilon) + \frac{1}{2} (\mu_B H)^2 D''(\varepsilon)$ より、

$$N(H) = \underbrace{\int_0^{+\infty} D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon}_{N(H=0)} + \frac{1}{2} (\mu_B H)^2 \int_0^{+\infty} D''(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$$

第二項について Sommerfeld の近似式を適用する。注) $G(\varepsilon) \equiv \int_0^{\varepsilon} D''(\varepsilon) d\varepsilon$ とおく。

$$N(H) = N(H=0) + \frac{1}{2} (\mu_B H)^2 \left(D'(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D'''(\mu) \right) \approx N(H=0)$$

であるので、弱磁場で H^2 が無視できる領域では、 μ は磁場に対して不変。

7-E パウリ磁化の近似計算

$$M = \mu_B (n_- - n_+) = \mu_B \int_0^{\infty} D(\varepsilon) (f(\varepsilon - \mu_B H) - f(\varepsilon + \mu_B H)) d\varepsilon$$

$$\approx -\mu_B \cdot 2\mu_B H \int_0^{\infty} D(\varepsilon) f'(\varepsilon) d\varepsilon = \underbrace{-2\mu_B^2 H D(\varepsilon) f(\varepsilon) \Big|_0^{\infty}}_{0-0} + \underbrace{\mu_B \cdot 2\mu_B H \int_0^{\infty} D'(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon}_{\text{Sommerfeldの公式を適用}}$$

$$= 2\mu_B^2 H \cdot \left(D(\mu) + \frac{\pi^2}{6} D''(\mu) k_B^2 T^2 + \dots \right)$$

ここで No.5 の結果 $\mu = \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{6} \frac{D'}{D} (k_B T)^2$ より、 $D(\mu) \approx D(\varepsilon_F) + D'(\varepsilon_F) \cdot \left(-\frac{\pi^2}{6} \frac{D'}{D} (k_B T)^2 \right)$

以上より、

$$M = 2\mu_B^2 H \left(D_0 - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left(\frac{D_0'^2}{D_0} - D_0'' \right) \right) = 2\mu_B^2 D_0 H \left(1 - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left(\frac{D_0'^2}{D_0^2} - \frac{D_0''}{D_0} \right) \right)$$

帯磁率(磁化率)は、 $\chi = \frac{M}{H} = 2\mu_B^2 D_0 + O(T^2)$ と、温度によらずほぼ一定。

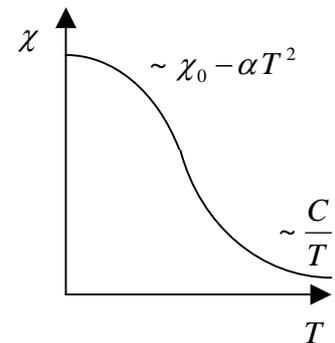
7-F 自由電子の場合(状態密度はスピンを含まないとする)

$D = A\sqrt{\varepsilon}$ とすると、 $D' = \frac{A}{2\sqrt{\varepsilon}}$ 、 $D'' = \frac{-A}{4\sqrt{\varepsilon}^3}$ なので、

$$\left(\frac{D_0'^2}{D_0^2} - \frac{D_0''}{D_0} \right) = \frac{A^2/4\varepsilon_F}{A^2\varepsilon_F} - \frac{-A/4\sqrt{\varepsilon_F^3}}{A\sqrt{\varepsilon_F}} = \frac{1}{4\varepsilon_F^2} + \frac{1}{4\varepsilon_F^2} = \frac{1}{2\varepsilon_F^2} = \frac{1}{2k_B^2 T_F^2}$$

となり、結局、 $\chi = \chi_0 \left(1 - \frac{\pi^2}{12} (T/T_F)^2 \right)$ 但し、 $\chi_0 \equiv 2\mu_B^2 D_0$

温度を上げると減少して行き、高温で古典統計の結果に近づく。



7-G 低温での古典統計(Curie)と量子統計(Pauli)の比

$$\frac{\chi_{\text{Pauli}}}{\chi_{\text{Curie}}} = \frac{2\mu_B^2 D_0}{N\mu_B^2/k_B T} = \frac{3N/\varepsilon_F}{2N/k_B T} = \frac{3k_B T}{2\varepsilon_F} \quad \text{ここで、} D_0 = \frac{Vm^{3/2}}{2\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\varepsilon_F} = \frac{3N}{4\varepsilon_F} \text{ を使った。}$$

Fermi エネルギー近傍の電子だけが Pauli 磁化に寄与。