Susceptibilidad en metales: Paramagnetismo de Pauli

Joseph Panana Vera
Tópicos avanzados II

Facultad de Ciencias Fisicas
Universidad Nacional Mayor de San Marcos
Lima-Perú

06/02/2021

Contenido

Susceptibilidad en metales

El tratamiento de la magnetización para el caso de electrones de conducción en un metal es diferente ya que no estan localizados en capas parcialmente llenas.

Para este caso tomaremos en cuenta solo el momento magnético de espin, ignorando la respuesta del momento orbital al campo,

$$M = -\frac{N}{V}\frac{\partial F}{\partial H} = -\frac{N}{V}\frac{\partial \triangle \varkappa}{\partial H} \tag{1}$$

para

$$\triangle \varkappa = g_0 \mu_B \vec{H} \cdot \vec{S} \tag{2}$$

para el caso de un electrón bajo la influencia del campo aplicado $\vec{H} = H\hat{k}$

$$M = -\frac{2\mu_B}{V}\left(\pm\frac{1}{2}\right) = \begin{cases} -\frac{\mu_B}{V}, \textit{Espin paralelo} \\ \frac{\mu_B}{V}, \textit{Espin antiparalelo} \end{cases} \tag{3}$$

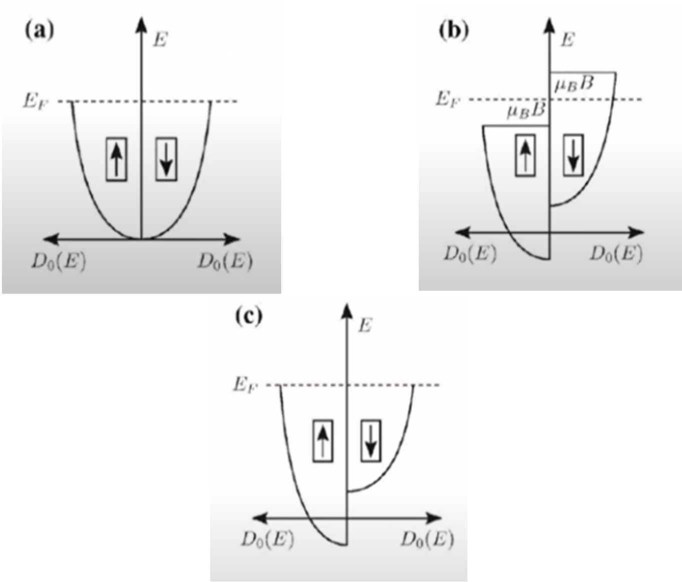
Susceptibilidad en metales (cont.)

Cuando se tiene una densidad $n_\pm$ de electrones con espin paralelo $(+)$ y antiparalelo $(-)$ a H, la densidad de magnetización total será

$$M = -\mu_B(n_+ - n_-) \tag{4}$$

Si sólo consideramos el efecto del campo aplicado a través del espin, entonces el resultado será un corrimiento de $\pm\mu_B H$ en los niveles de energia, lo cual se puede describir por medio de la densidad de estados.

Susceptibilidad en metales (cont.)



Susceptibilidad en metales (cont.)

Definimos $g_{\pm}(\varepsilon)d\varepsilon$ como el número de electrones con espin $\pm$ en el rango de energia de ε a $\varepsilon + d\varepsilon$, entonces

$$g_{\pm}(\varepsilon) = \frac{1}{2}g(\varepsilon), \;\; H = 0 \tag{5}$$

y en la presencia del campo se puede considerar a $g_{\pm}(\varepsilon)$ como,

$$g_{+}(\varepsilon) = \frac{1}{2}g(\varepsilon - \mu_B H) \tag{6}$$

$$g_{-}(\varepsilon) = \frac{1}{2}g(\varepsilon + \mu_B H) \tag{7}$$

Donde $g(\varepsilon)$ es la densidad de estados en ausencia de un campo aplicado.

El número de electrones por unidad de volumen de cada espin esta dado por

$$n_{\pm} = \int g_{\pm}(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon \tag{8}$$

Susceptibilidad en metales (cont.)

Donde f es la función de Fermi

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} \tag{9}$$

El potencial quimico μ es determinado por la condición

$$n = n_+ + n_- \tag{10}$$

cualquier cambio importante en $g(\varepsilon)$ es en el rango de ε_F, mientras que los debidos a la interacción magnética son del órden de $\mu_B H \backsim 10^{-4}\varepsilon_F$, incluso a 10^4 gauss. Podemos expandir $g_\pm$ en Taylor alrededor de ε

$$g_\pm(\varepsilon) = \frac{1}{2}\left[g(\varepsilon) + (\varepsilon \mp \mu_B H - \varepsilon)g^{'}(\varepsilon) + O\left((\mu_B H)^2\right)\right] \tag{11}$$

$$= \frac{1}{2}g(\varepsilon) \mp \frac{1}{2}\mu_B H g^{'}(\varepsilon) \tag{12}$$

Susceptibilidad en metales (cont.)

Reemplazando la ecuación (12) en la (8)

$$n_{\pm} = \frac{1}{2}\int g(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon \mp \frac{1}{2}\mu_B H \int g^{'}(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon \qquad (13)$$

por tanto para la densidad total n tenemos,

$$n = n_+ + n_- = \int g(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon \qquad (14)$$

lo cual es idéntico al caso cuando no se tiene campo aplicado, por tanto para μ es válido tomar la expresión en ausencia de campos magnéticos

$$\mu = \varepsilon_F \left[1 + O\left(\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2\right)\right] \qquad (15)$$

Susceptibilidad en metales (cont.)

Calculando ahora la magnetización para este sistema, reemplazamos la ecuación (13) en la (4)

$$M = \mu_B^2 H \int g^{'}(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \tag{16}$$

Usando la integración por partes

$$M = \mu_B^2 H \left[g(\varepsilon) f(\varepsilon) \right]_0^{\varepsilon_F} + \mu_B^2 H \int g(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon \tag{17}$$

Si ahora consideramos el limite $k_B T \ll \varepsilon_F$ (el cual se cumple para $T \approx 10^4 K$ o menores), entonces

$$f(\varepsilon) = \begin{cases} 1, \varepsilon < \varepsilon_F \\ 0, \varepsilon \geqslant \varepsilon_F \end{cases} \tag{18}$$

y

$$-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \tag{19}$$

Susceptibilidad en metales (cont.)

entonces

$$M = \mu_B^2 H \int g(\varepsilon)\delta(\varepsilon - \varepsilon_F)d\varepsilon = \mu_B^2 H g(\varepsilon_F) \tag{20}$$

Paramagnetismo de Pauli

Teniendo la expresión para la magnetización (Ecuación (20)), podemos calcular la susceptibilidad magnética

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = \mu_B^2 g(\varepsilon_F) \tag{21}$$

Está ecuación es la conocida como susceptibilidad paramagnética de Pauli, se puede observar que es independiente de la temperatura.

Para el caso de un gas de electrones libres

$$g(\varepsilon_F) = \frac{mk_F}{\pi^2 \hbar^2} \tag{22}$$

Teniendo en cuenta que

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}\ ,\ \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}\ ,\ a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \tag{23}$$

Paramagnetismo de Pauli (cont.)

entonces la susceptibilidad de Pauli se expresada como

$$\chi_{Pauli} = \left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2 \frac{mk_F}{\pi^2\hbar^2} = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^2 a_0 k_F \tag{24}$$

Si tenemos en cuenta el número de estados ocupados

$$\frac{N}{2} = \frac{\Omega V}{(2\pi)^3} = \frac{4}{3}\pi k_F^3 \tag{25}$$

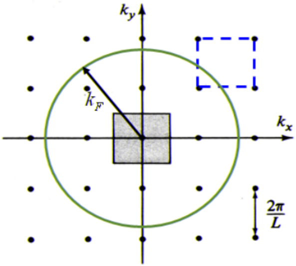
de donde

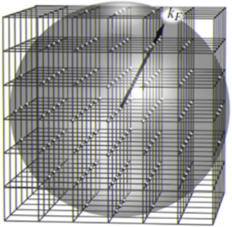
$$n = \frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \tag{26}$$

El vector de onda de Fermi

$$k_F = \left(3\pi^2 n\right)^{\frac{1}{3}} \tag{27}$$

Paramagnetismo de Pauli (cont.)





También podemos expresar en términos del radio r_s, que es el radio de la esfera que ocupa un electrón

$$\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{4}{3}\pi r_s^3 \tag{28}$$

entonces

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{3}{4\pi r_s^3}\right)^{\frac{1}{3}} = \frac{\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{1}{3}}}{r_s} = \frac{1.92}{r_s} \tag{29}$$

Paramagnetismo de Pauli (cont.)

Reemplazando la ecuación (29) en (24)

$$\chi_{Pauli} = \left(\frac{2.59}{\frac{r_s}{a_0}} \right) \times 10^{-6} \tag{30}$$

Se observa que es mucho mas pequeño que el paramagnetismo de Curie (que es para sistemas de iones magnéticos).

$$\chi_{Curie} \sim 10^{-2} \quad , \quad \chi_{Pauli} \sim 10^{-6} \tag{31}$$

Paramagnetismo de Pauli (cont.)

METAL	r_s/a_0	$10^6 \chi_{\text{Pauli}}$ (from Eq. (31.71))	$10^6 \chi_{\text{Pauli}}$ (measured)[a]
Li	3.25	0.80	2.0
Na	3.93	0.66	1.1
K	4.86	0.53	0.8_5
Rb	5.20	0.50	0.8
Cs	5.62	0.46	0.8