Diamagnetismo de Landau

Pedro

1 Derivação

A seguinte derivação foi inspirada nas notas de aula do professor Peter Young, da UCSC, obtidas em `http://physics.ucsc.edu/~peter/231/magnetic_field/node5.html`, acessadas em 6/11/2016, e no livro *Quantum theory of solids*, de R. E. Peierls, Clendon Press, Oxford, 2001. Ambas as discussões são complementares em nível de aprofundamento e notação.

A função de grande partição é definida como:

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr}(\exp\left[\beta(\mu N - \mathcal{H})\right]), \tag{1}$$

onde conseguimos obter o grande potencial da seguinte forma:

$$\Phi = -kT \ln \mathcal{Z}. \tag{2}$$

No ensemble grande canônico, podemos recuperar a termodinâmica através da seguinte relação:

$$N = -\frac{\partial \Phi}{\partial \mu}, \tag{3}$$

ou podemos também utilizar o fato de que o grande potencial está relacionado com a energia livre de Helmholtz ($F = U - TS$) da seguinte forma:

$$F = \Phi + \mu N. \tag{4}$$

Derivando em relação a μ:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F}{\partial \mu} &= \frac{\partial}{\partial \mu}(\Phi + \mu N) && (5)\\
&= \frac{\partial \Phi}{\partial \mu} + \frac{\partial(\mu N)}{\partial \mu} && (6)\\
&= \underbrace{-N}_{\text{vide (3).}} + N\frac{\partial \mu}{\partial \mu} && (7)\\
&= -N + N && (8)\\
&= 0. && (9)
\end{aligned}$$

A magnetização, por sua vez, pode ser determinada por:

$$M = -\left(\frac{\partial F}{\partial H}\right)_N, \tag{10}$$

onde H é o campo magnético responsável pela magnetização do sistema. A susceptibilidade magnética é obtida segundo a derivada da magnetização em relação ao campo, por definição. Logo,

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = -\left(\frac{\partial^2 F}{\partial H^2}\right)_N. \tag{11}$$

Para elétrons livres, teremos que o hamiltoniano será:

$$\mathcal{H} = \begin{cases} 0, \\ \epsilon_k. \end{cases} \tag{12}$$

O grande potencial (2), por sua vez, pode ser expresso como um somatório dos grandes potenciais individuais para cada elétron:

$$\Phi = -2kT \sum_i \ln\left[1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_k)}\right], \tag{13}$$

onde o fator de 2 surge por temos duas possibilidades de spin. Fazendo a analogia para o contínuo, através da densidade de estados, $g(\epsilon)$, teremos

$$\Phi = -kT \int_0^\infty g(\epsilon) \ln\left[1 + e^{\beta(\mu - \epsilon)}\right] d\epsilon. \tag{14}$$

Aqui, o fator 2 foi absorvido em $g(\epsilon)$, que, por sua vez, será constante e terá um valor de $A \cdot m/(\pi\hbar^2)$.

Vamos aplicar um campo magnético na direção z, onde o potencial vetor será da forma

$$\vec{A} = (Hx)\hat{y}, \tag{15}$$

de maneira a garantir que $\nabla\times\vec{A} = \vec{H} = H\hat{z}$. A energia do elétron no campo magnético será

$$E(\vec{p},\vec{r}) = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + V(\vec{r}). \tag{16}$$

Podemos substituir a variável de integração $\vec{p}$ por $\vec{\Pi}$, definido da seguinte forma:

$$\vec{\Pi} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}, \tag{17}$$

de maneira que nossa equação de Schrödinger se apresentará como a seguir:

$$\hat{\mathcal{H}}\psi(\vec{r},t) = \hat{E}\psi(\vec{r},t). \tag{18}$$

Separando a dependência espacial:

$$\left(\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{19}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial}{\partial y} - \frac{ieHx}{\hbar c}\right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{20}$$

$$\frac{\partial^2\psi(\vec{r})}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial}{\partial y} - \frac{ieHx}{\hbar c}\right)^2\psi(\vec{r}) + \frac{\partial^2\psi(\vec{r})}{\partial z^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(\vec{r}) \tag{21}$$

Utilizando a separação de variáveis, nossa solução será da forma:

$$\psi(\vec{r}) = e^{i(k_y y + k_z z)}u(x). \tag{22}$$

A equação para $u(x)$ se dará como

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \left[\frac{2mE_1}{\hbar^2} - \left(k_y - \frac{eH}{\hbar c}x\right)^2\right]u = 0, \tag{23}$$

com

$$E_1 = E - \frac{\hbar^2}{2m}k_z^2. \tag{24}$$

Podemos identificar (23) como uma equação de oscilador harmônico, com frequência eH/mc e centro $x_0 = (\hbar c/eH)k_y$. Os autovalores de energia serão então

$$E_{1n} = (2n+1)\hbar\frac{eH}{2mc} = (2n+1)\mu_B H, \tag{25}$$

onde $\mu_B = \hbar e/2mc$ é o magneton de Bohr. A energia total, segundo (24), será entao:

$$E = (2n+1)\mu_B H + \frac{\hbar^2}{2m}k_z^2, \tag{26}$$

onde teremos $L_1L_2(eH/2\pi\hbar c)$ possíveis níveis de energia, considerando que as dimensões do nosso material sejam L_1, L_2 e L_3, em x, y e z, respectivamente. Sabendo a quantização da energia, podemos calcular o número de estados do nosso sistema, que corresponderá à somatória dos possíveis valores de k_z:

$$\Omega(E) = 2\left(\frac{L_3}{2\pi}\right)\left(\frac{L_1L_2eH}{2\pi\hbar c}\right)\sum_n k_z, \tag{27}$$

onde o primeiro parêntesis corresponde aos possíveis valores de k_y, o segundo parêntesis ao número de estados possíveis de energia e o fator 2 às duas possibilidades de spin. Remanejando k_z em (26):

$$k_z = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\left[E - (2n+1)\mu_B H\right]^{1/2}, \tag{28}$$

podemos obter explicitamente $\Omega(E)$ em (27):

$$\Omega(E) = \frac{2(2m)^{1/2}L_1L_2L_3eH}{(2\pi\hbar)^2c}\sum_n\left[E-(2n+1)\mu_BH\right]^{1/2}. \tag{29}$$

Fazendo $E \to \epsilon$, $g(\epsilon) = d\Omega/d\epsilon$ e substituindo em (14), podemos identificar a função de Fermi, $f(E)$, de tal forma que:

$$\Phi = -2\int_0^{\infty} g(\epsilon)f(\epsilon)d\epsilon. \tag{30}$$

Nossa integral final será

$$\Phi = -A\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(\epsilon)\frac{d}{d\epsilon}\left(\frac{1}{1+e^{(\epsilon-\epsilon_0)/\theta}}\right)d\epsilon, \tag{31}$$

com

$$\phi(\epsilon) = \sum_n(\epsilon-n-1/2)^{2/3}, \tag{32}$$

sendo a soma limitada para todos os valores de n tais quais a soma entre parêntesis permanecer positiva, e

$$\begin{cases} \epsilon_0 = \frac{\mu}{2\mu_BH}, \\ \theta = \frac{kT}{2\mu_BH}, \\ A = \frac{16m^{2/3}(\mu_BH)^{2/3}L_1L_2L_3}{3\pi^2\hbar^3}. \end{cases} \tag{33}$$

Aplicando a fórmula da soma de Poisson, teremos que

$$\phi(\epsilon) = \sum_{l=-\infty}^{\infty}(-1)^l\int_0^{\epsilon}(\epsilon-x)^{2/3}e^{2i\pi lx}dx. \tag{34}$$

Para $l \neq 0$, no domínio $kT \gg 2\mu_BH$, obtemos

$$\Phi = A\int_0^{\epsilon_0}\left(\frac{2}{5}\epsilon^{2/3}-\frac{\sqrt{\epsilon}}{16}\right)\frac{d}{d\epsilon}\left(\frac{1}{1+e^{(\epsilon-\epsilon_0)/\theta}}\right)d\epsilon. \tag{35}$$

Aplicando em (4) para obtermos a energia livre de Helmholtz, teremos

$$F = N\mu - \frac{2}{5}A\epsilon_0^{5/3} + \frac{A}{16}\epsilon_0^{1/2}. \tag{36}$$

Relembrando as definições (33), vemos que somente o último termo depende de H, então ele é quem rege a presença do campo na energia livre. Para este termo, temos:

$$F_1 = \frac{m^{2/3(\mu_BH)^2L_1L_2L_3\sqrt{\mu}}}{3\pi^2\hbar^3\sqrt{2}}. \tag{37}$$

De acordo com (11), a susceptibilidade magnética será

$$\chi = -\frac{\partial^2F}{\partial H^2} = -\frac{e^2}{12\pi^2\hbar c^2}\left(\frac{2\mu}{m}\right)^{1/2}. \tag{38}$$

Em termos do número de onda k_0 dos elétrons na dimensão de fronteira, onde $\mu = (\hbar k_0)^2/2m$, obtemos

$$\chi = -\frac{e^2k_0}{12\pi^2mc^2}, \tag{39}$$

que é a famosa expressão obtida por Landau, para a susceptibilidade por unidade de volume de elétrons livres em 3 dimensões.