Física Teórica 3 − 2do. cuatrimestre de 2014

Algunos problemas resueltos de la Guía 6 (3ra. parte)

Problema 8

Paramagnetismo de Pauli. Un electrón en un campo magnético H tiene una energía $\pm\mu_B H$, dependiendo de que el espín sea paralelo o antiparalelo al campo. Considere un gas de electrones a temperatura cero. Su interacción mutua y el efecto del campo magnético sobre el movimiento orbital de los electrones puede despreciarse.

a) Halle el valor máximo de la densidad N/V tal que todos los espines sean paralelos entre sí. ¿Cuánto vale la energía del gas en ese caso?

b) Ahora suponga como dato una energía de Fermi mayor que $\mu_B H$. Halle la magnetización y a partir de ella la susceptibilidad.

■ **Solución**. (a) Supondremos que $H \geq 0$. Así, los electrones con espín paralelo al campo tienen una energía adicional $\mu_B H$ mayor que cero. Los electrones con espín antiparalelo tienen una energía adicional $-\mu_B H$, menor que cero. Recordar que el espín del electrón es antiparalelo a su momento magnético, de modo que energéticamente se favorece una alineación antiparalela con el campo externo.

Debido a que ahora la energía depende del espín, conviene volver a la expresión para el logaritmo de la función de partición y escribir

$$\log Z = \sum_{\mathbf{p}} \sum_{s=\{1,-1\}} \log\left(1 + z e^{-\beta[\epsilon(\mathbf{p})+\epsilon(s)]}\right) = \sum_{\mathbf{p}} \log\left(1 + z e^{-\beta[\epsilon(\mathbf{p})+\mu_B H]}\right) + \sum_{\mathbf{p}} \log\left(1 + z e^{-\beta[\epsilon(\mathbf{p})-\mu_B H]}\right).$$

Formalmente es como si hubiera dos sistemas de partículas, unas con espín paralelo al campo y otras con espín antiparalelo. Como los sistemas pueden intercambiar partículas entre sí, tienen la misma fugacidad. Todas las cantidades extensivas que se deducen del logaritmo de la función de partición (incluido este mismo logaritmo) se escribirán como la suma de dos términos, cada uno asociado a una proyección del espín. Por ejemplo, el número de partículas es

$$N = N_+ + N_- =$$

$$= 2\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon\, \frac{\epsilon^{1/2}}{z^{-1} e^{\beta(\epsilon+\mu_B H)} + 1} + 2\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon\, \frac{\epsilon^{1/2}}{z^{-1} e^{\beta(\epsilon-\mu_B H)} + 1}. \tag{1}$$

Aquí se han hecho las sustituciones habituales para pasar de una suma sobre impulsos a una integral sobre las energías cinéticas, $\epsilon = p^2/2m$. Cada término tiene la misma forma que la integral para el número de partículas de un sistemas de fermiones sin grados de libertad internos ($g = 1$), pero con una fugacidad efectiva, $z_\pm = z e^{\mp\beta\mu_B H}$,

$$N = 2\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon\, \frac{\epsilon^{1/2}}{z_+^{-1} e^{\beta\epsilon} + 1} + 2\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon\, \frac{\epsilon^{1/2}}{z_-^{-1} e^{\beta\epsilon} + 1}.$$

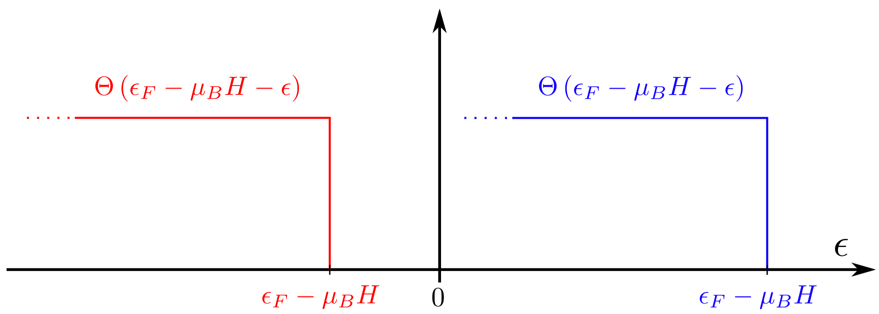
Notar que para $H > 0$ siempre es $N_- > N_+$. Para $T \neq 0$ el cambio de variable $\beta\epsilon = x$ permite introducir las funciones f_ν,

$$N = \frac{V}{\lambda^3} f_{3/2}(z_+) + \frac{V}{\lambda^3} f_{3/2}(z_-).$$

Si la temperatura es cero, el potencial químico es la energía de Fermi, $\mu = \epsilon_F$. Además, cuando $T \to 0$ el número de ocupación tiende a una función escalón, de modo que

$$\int_0^\infty d\epsilon \, \frac{\epsilon^{1/2}}{e^{\beta(\epsilon \pm \mu_B H - \mu)} + 1} \to \int_0^\infty d\epsilon \; \epsilon^{1/2} \;\, \Theta\left(\epsilon_F \mp \mu_B H - \epsilon\right).$$

Debido a que el límite inferior de las integrales es cero, si el argumento de la función escalón es menor que cero para $\epsilon = 0$ (que sería el caso más favorable), el integrando es cero siempre y la integral se anula. La siguiente figura muestra las dos alternativas posibles para el caso de los electrones con espín paralelo al campo. Dependiendo de la diferencia $\epsilon_F - \mu_B H$ se tendrá uno u otro escalón.



Si $\epsilon_F - \mu_B H$ es menor que cero, el escalón nunca alcanza los niveles con energía cinética positiva, y por lo tanto los niveles con espín paralelo al campo están desocupados. En cambio, si $\epsilon_F - \mu_B H$ es mayor que cero, habrá algunos niveles ocupados con espín paralelo al campo. Así, siguiendo con el caso de las partículas con espín paralelo al campo,

$$\int_0^\infty d\epsilon \; \epsilon^{1/2} \;\, \Theta\left(\epsilon_F - \mu_B H - \epsilon\right) = \frac{2}{3}(\epsilon_F - \mu_B H)^{3/2} \;\, \Theta\left(\epsilon_F - \mu_B H\right).$$

Notar especialmente cómo la función escalón sobrevive en cierta forma a la integración, diciendo que si no se satisface $\epsilon_F > \mu_B H$ toda la integral es nula. Para las partículas con espín antiparalelo al campo, resultan las mismas expresiones pero con el signo de H cambiado. En definitiva,

$$N = \frac{4\pi V}{3} \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \Big[(\epsilon_F - \mu_B H)^{3/2} \;\, \Theta\left(\epsilon_F - \mu_B H\right) + (\epsilon_F + \mu_B H)^{3/2} \;\, \Theta\left(\epsilon_F + \mu_B H\right)\Big]. \tag{2}$$

El primer término corresponde a los electrones con espín paralelo al campo, es decir, los que tienen una energía mínima igual a $\mu_B H$ (recordar que estamos suponiendo que $H \geq 0$). La ecuación anterior está diciendo simplemente que si la energía de Fermi no es mayor que ese valor mínimo, entonces no habrá electrones con espín paralelo al campo. No podría ocurrir que ϵ_F fuera también menor que $-\mu_B H$, porque entonces tampoco habría electrones con el espín antiparalelo.

La Ec. (2) es una ecuación para ϵ_F, que podemos escribir como

$$\alpha = f(\epsilon_F), \tag{3}$$

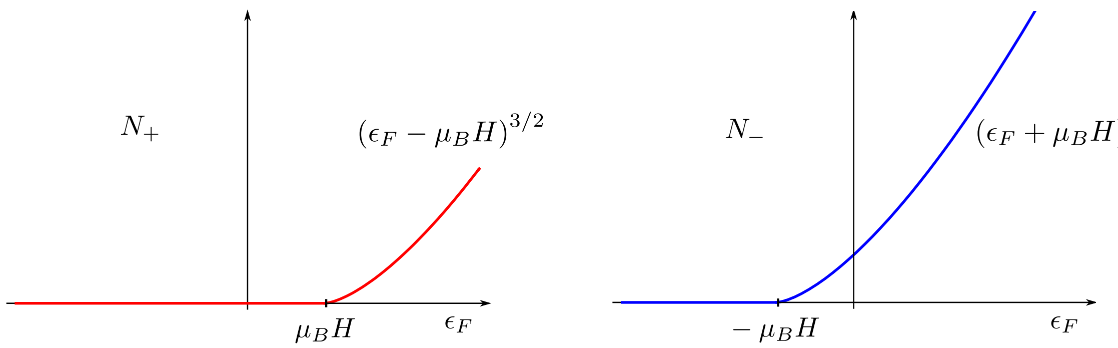
donde

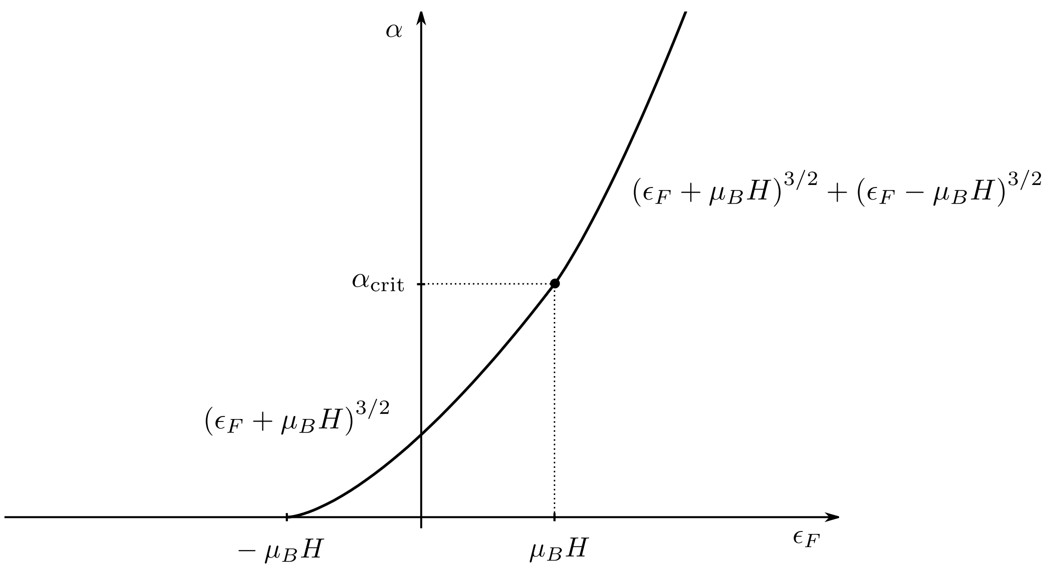
$$\alpha = \frac{3N}{4\pi V}\left(\frac{h^2}{2m}\right)^{3/2}$$

y donde

$$f(\epsilon_F) = (\epsilon_F - \mu_B H)^{3/2}\ \Theta\left(\epsilon_F - \mu_B H\right) + (\epsilon_F + \mu_B H)^{3/2}\ \Theta\left(\epsilon_F + \mu_B H\right).$$

Conviene pensar la ecuación (3) gráficamente. Para cada elección del parámetro α debe buscarse la intersección de la curva de la función $f(\epsilon_F)$ con la cota de nivel α. Las figuras siguientes muestran por separado cada término de la función f, uno asociado a los electrones paralelos y otro a los antiparalelos al campo, y abajo la función f completa, indicando la definición de la función sólo en los tramos en los que es distinta de cero.





Si $0 \le \alpha \le (2\mu_B H)^{3/2}$, la intersección ocurre en el primer tramo de la función f, allí donde $f(\epsilon_F) = (\epsilon_F + \mu_B H)^{3/2}$. Pero si $(2\mu_B H)^{3/2} < \alpha$ la intersección debe buscarse en el segundo tramo de la función f, allí donde $f(\epsilon_F) = (\epsilon_F+\mu_B H)^{3/2}+(\epsilon_F-\mu_B H)^{3/2}$. En el primer caso sólo estarán poblados los niveles con espín antiparalelo al campo; todos los electrones tendrán sus espines alineados. A mayor densidad de partículas, mayor es el valor del parámetro α. Cuando se sobrepasa la cota crítica dada por $\alpha_{\text{crit}} = (2\mu_B H)^{3/2}$, empiezan a poblarse los niveles con espín paralelo al campo y deja de ser cierto que todos los electrones tengan sus espines alineados. La densidad máxima para la que eso ocurre es

$$\left(\frac{N}{V}\right)_{\max} = \frac{4\pi}{3}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}(2\mu_B H)^{3/2} = \frac{4\pi}{3}\left(\frac{4\mu_B H m}{h^2}\right)^{3/2}.$$

■ Respecto a la energía. El cálculo directo a $T = 0$ da

$U = U_+ + U_-$

$$= 2\pi V\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\left[\int_0^\infty d\epsilon\,\epsilon^{1/2}\,\Theta(\epsilon_F - \mu_B H - \epsilon)\,(\epsilon + \mu_B H) + \int_0^\infty d\epsilon\,\epsilon^{1/2}\,\Theta(\epsilon_F + \mu_B H - \epsilon)(\epsilon - \mu_B H)\right].$$

Recordar que $\epsilon = p^2/2m$ sólo representa la energía cinética, asociada con la densidad de estados $\epsilon^{1/2}$. Aquí estamos calculando el valor medio de toda la energía, que aparece en último lugar en las integrales, como $\epsilon \pm \mu_B H$, dependiendo de la orientación del espín. Si la energía de Fermi es menor que $\mu_B H$, el primer término no contribuye y queda sólo la contribución de los electrones antiparalelos al campo:

$$U = 2\pi V\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty d\epsilon\,\epsilon^{1/2}\,\Theta(\epsilon_F + \mu_B H - \epsilon)\,(\epsilon - \mu_B H)$$

$$= \frac{4\pi V}{5}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}(\epsilon_F + \mu_B H)^{5/2} - \frac{4\pi V}{3}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\mu_B H(\epsilon_F + \mu_B H)^{3/2}.$$

La interpretación de esta ecuación es bastante transparente. En primer lugar, comparando con las ecuaciones para los números de partículas, y puesto que $N = N_-$, el último término se reduce a

$$-\frac{4\pi V}{3}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\mu_B H(\epsilon_F + \mu_B H)^{3/2} = -N\mu_B H.$$

Esto es la energía de interacción con el campo externo. El otro término se reescribe de manera similar como

$$\frac{4\pi V}{5}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}(\epsilon_F + \mu_B H)^{5/2} = \frac{3}{5}N(\epsilon_F + \mu_B H).$$

Este sería el término de energía cinética. En resumen, si $N_+ = 0$, entonces

$$U = \frac{4\pi V}{5}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}(\epsilon_F + \mu_B H)^{5/2} = \frac{3}{5}N(\epsilon_F + \mu_B H) - N\mu_B H.$$

Justo cuando $\epsilon_F = \mu_B H$ resulta $U = \frac{1}{5}N\mu_B H$. Al margen de eso, la aparición de $\mu_B H$ en el término cinético tiene que ver con que en el cálculo de ϵ_F interviene tanto la energía cinética ϵ como la energía de interacción con el campo. Por construcción, ϵ_F es la energía máxima de los electrones, e incluye a la energía de interacción, que es negativa para los electrones antiparalelos al campo. Cuando todos los electrones son antiparalelos al campo, alcanzar la energía ϵ_F exige que tengan una energía cinética adicional. Ya para alcanzar el estado con energía igual a cero tienen que tener una energía cinética igual a $\mu_B H$. Matemáticamente, como en esta situación la energía de interacción con el campo es la misma para todos los electrones, todo el problema puede verse como el problema de electrones sin degeneración de espín pero con el cero de energía desplazado en $-\mu_B H$. La redefinición del origen de la energía puede absorberse en la definición del potencial químico, y de ahí que aparezca $\epsilon_F + \mu_B H$ en el término de energía cinética.

Si la temperatura fuera distinta de cero, es fácil demostrar que

$$U = U_+ + U_-,$$

donde la energía de los electrones paralelos al campo es

$$U_+ = \frac{V}{\lambda^3}\left[\frac{3}{2}kT\, f_{5/2}\left(ze^{-\beta\mu_B H}\right) + \mu_B H\, f_{3/2}\left(ze^{-\beta\mu_B H}\right)\right] = \frac{3}{2}\frac{V}{\lambda^3}kT\, f_{5/2}\left(ze^{-\beta\mu_B H}\right) + \mu_B H N_+,$$

y la de los antiparalelos

$$U_- = \frac{V}{\lambda^3}\left[\frac{3}{2}kT\, f_{5/2}\left(ze^{\beta\mu_B H}\right) - \mu_B H f_{3/2}\left(ze^{\beta\mu_B H}\right)\right] = \frac{3}{2}\frac{V}{\lambda^3}kT\, f_{5/2}\left(ze^{\beta\mu_B H}\right) + \mu_B H N_-.$$

Todo se traduce en una redefinición de las fugacidades para cada una de las poblaciones de electrones y en el agregado del término de interacción magnética.

(b) En general la magnetización es

$$M = \mu_B(N_- - N_+),$$

y la susceptibilidad

$$\chi = \left.\frac{\partial M}{\partial H}\right|_{H=0}.$$

Cuando la energía de Fermi es mayor que $\mu_B H$

$$N_\pm = \frac{4\pi V}{3}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} (\epsilon_F \mp \mu_B H)^{3/2}.$$

La magnetización es entonces

$$M = \frac{4\pi V}{3}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \left[(\epsilon_F + \mu_B H)^{3/2} - (\epsilon_F - \mu_B H)^{3/2}\right]\mu_B.$$

Para calcular la susceptibilidad hay que tener en cuenta que la dependencia de los números $N_\pm$ respecto de H aparece explícita e implícitamente, ya que ϵ_F es a su vez una función de H. Por ejemplo,

$$\frac{\partial N_+}{\partial H} = 2\pi V\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} (\epsilon_F - \mu_B H)^{1/2}\left(\frac{\partial \epsilon_F}{\partial H} - \mu_B\right).$$

Si $H = 0$,

$$\left.\frac{\partial N_+}{\partial H}\right|_{H=0} = 2\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \epsilon_F^{1/2} \left(\frac{\partial \epsilon_F}{\partial H} - \mu_B\right),$$

con un resultado análogo para N_-,

$$\left.\frac{\partial N_-}{\partial H}\right|_{H=0} = 2\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \epsilon_F^{1/2} \left(\frac{\partial \epsilon_F}{\partial H} + \mu_B\right).$$

Al hacer la diferencia de los dos términos, la derivada $\partial\epsilon_F/\partial H$ se cancela, y queda

$$\chi = \mu_B \left(\frac{\partial N_-}{\partial H} - \frac{\partial N_+}{\partial H}\right)_{H=0} = 4\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \epsilon_F^{1/2}\,\mu_B^2. \tag{4}$$

Por otro lado cuando $H = 0$, la energía de Fermi está dada por

$$N = \frac{2}{3}\,4\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \epsilon_F^{3/2}.$$

Reemplazando en la Ec. (4) ϵ_F en términos de la densidad, queda

$$\chi = (4\pi V)^{2/3} \left(\frac{2m}{h^2}\right) \left(\frac{3N}{2}\right)^{1/3} \mu_B^2.$$

Más que la susceptibilidad, interesa la cantidad intensiva χ/N, que resulta ser

$$\frac{\chi}{N} = 4\left[\frac{\sqrt{3}\,\pi V}{N}\right]^{2/3} \frac{m\mu_B^2}{h^2}.$$

De haber sido necesario calcular $\partial\epsilon_F/\partial H$, podríamos haber usado la ecuación (2), que da la relación entre ϵ_F y H. Cuando $\epsilon_F > \mu_B H$,

$$N = \frac{4\pi V}{3}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \Big[(\epsilon_F - \mu_B H)^{3/2} + (\epsilon_F + \mu_B H)^{3/2}\Big].$$

Como todo lo que queremos es la derivada de ϵ_F respecto de H, podemos derivar implícitamente. Puesto que N y V están fijos, diferenciando la última ecuación resulta

$$0 = (\epsilon_F - \mu_B H)^{1/2}(d\epsilon_F - \mu_B dH) + (\epsilon_F + \mu_B H)^{1/2}(d\epsilon_F + \mu_B dH).$$

Entonces

$$\frac{\partial \epsilon_F}{\partial H} = \frac{(\epsilon_F - \mu_B H)^{1/2} - (\epsilon_F + \mu_B H)^{1/2}}{(\epsilon_F - \mu_B H)^{1/2} + (\epsilon_F + \mu_B H)^{1/2}}\,\mu_B.$$

Si $H = 0$,

$$\frac{\partial \epsilon_F}{\partial H} = \frac{\epsilon_F^{1/2} - \epsilon_F^{1/2}}{\epsilon_F^{1/2} + \epsilon_F^{1/2}}\,\mu_B = 0.$$