

Física Teórica 3 – segundo cuatrimestre de 2024

Guía 6: paramagnetismo de Pauli*

■ **Paramagnetismo de Pauli I.** Un gas ideal de N electrones está contenido en una caja de volumen V . Los electrones interactúan con un campo magnético externo $\mathbf{H} = H\hat{z}$. La energía de interacción es $\epsilon_s = s\mu_e H$, donde s es el signo de la proyección del espín en la dirección \hat{z} y μ_e es el valor absoluto del momento magnético de los electrones. El sistema está a temperatura cero.

- Escribir la ecuación que determina la energía de Fermi en función de N , V y H . Representar gráficamente.
- Calcular la magnetización por partícula M en función de la densidad de partículas, de la energía de Fermi y H .
- Calcular la susceptibilidad, es decir, la derivada de M respecto de H cuando H tiende a cero. El resultado debe quedar escrito únicamente en términos de ϵ_F .

■ **Solución.** El número de partículas está determinado por la siguiente ecuación:

$$N = \frac{V}{h^3} \sum_{s=\pm 1} \int d^3p \frac{1}{1 + z^{-1} e^{\beta \epsilon(p,s)}}, \quad (1)$$

donde

$$\epsilon(p, s) = \frac{p^2}{2m} + s\mu_e H. \quad (2)$$

A temperatura cero,

$$N = \frac{V}{h^3} \sum_{s=\pm 1} \int d^3p \Theta(\epsilon_F - \epsilon(p, s)) = \frac{4\pi V}{h^3} \sum_{s=\pm 1} \int_0^\infty dp p^2 \Theta(\epsilon_F - \epsilon(p, s)). \quad (3)$$

De modo que, escribiendo los dos términos de la suma,

$$N = \frac{4\pi V}{h^3} \left[\int_0^\infty dp p^2 \Theta\left(\epsilon_F - \frac{p^2}{2m} - \mu_e H\right) + \int_0^\infty dp p^2 \Theta\left(\epsilon_F - \frac{p^2}{2m} + \mu_e H\right) \right]. \quad (4)$$

Hay que tener cuidado al calcular estas integrales, aunque parecen muy inocentes. El efecto de la función escalón no es simplemente fijar el límite superior de integración. En realidad,

$$\int_0^\infty dx f(x) \Theta(a - x) = \Theta(a) \int_0^a dx f(x). \quad (5)$$

Si a es negativo, el resultado debe ser cero. Usualmente, uno se olvida de la función escalón $\Theta(a)$ al frente de la última integral y se limita a fijar extremo superior. Si a es mayor que cero, no pasa nada, pero si a puede ser negativo, eso está mal.

*zanellaj@df.uba.ar

En definitiva, si se tiene esto en cuenta,

$$N = \frac{4\pi V}{3h^3} (2m)^{3/2} \left[\Theta(\epsilon_F - \mu_e H) (\epsilon_F - \mu_e H)^{3/2} + \Theta(\epsilon_F + \mu_e H) (\epsilon_F + \mu_e H)^{3/2} \right]. \quad (6)$$

Escribamos de manera separada la contribución de cada proyección del espín,

$$N = N_+ + N_-, \quad (7)$$

donde

$$N_{\pm} = \frac{4\pi V}{3h^3} (2m)^{3/2} \Theta(\epsilon_F \mp \mu_e H) (\epsilon_F \mp \mu_e H)^{3/2}. \quad (8)$$

Cuando el campo es nulo, la energía de Fermi ϵ_0 está determinada por

$$N = 2 \frac{4\pi V}{3h^3} (2m)^{3/2} \epsilon_0^{3/2}. \quad (9)$$

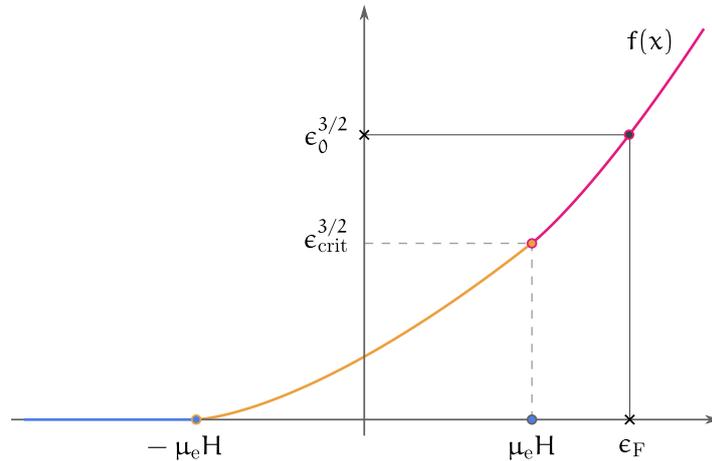
Usando esta definición, podemos escribir la Ec. (8) de una forma compacta y que es a simple vista dimensionalmente correcta,

$$\frac{N_{\pm}}{N} = \frac{1}{2} \Theta(\epsilon_F \mp \mu_e H) \left(\frac{\epsilon_F \mp \mu_e H}{\epsilon_0} \right)^{3/2}. \quad (10)$$

La Ec. (6) se lee como

$$\epsilon_0^{3/2} = \frac{1}{2} \left[\Theta(\epsilon_F - \mu_e H) (\epsilon_F - \mu_e H)^{3/2} + \Theta(\epsilon_F + \mu_e H) (\epsilon_F + \mu_e H)^{3/2} \right] = f(\epsilon_F). \quad (11)$$

Conocer $\epsilon_0^{3/2}$ es equivalente a conocer la densidad; son datos intercambiables. Para $H > 0$, la ecuación anterior se puede representar gráficamente como muestra la figura. Fijado un valor de ϵ_0 , se busca la intersección de la línea de nivel $\epsilon_0^{3/2}$ con el gráfico de $f(x)$.



Existe un régimen en el que los únicos niveles ocupados son los que corresponden a la proyección del espín antiparalela al campo. Los otros niveles sólo empiezan a poblarse cuando $\epsilon_F > \mu_e H$, es decir, cuando

$$\epsilon_0 > 2^{1/3} \mu_e H = \epsilon_{\text{crit}}. \quad (12)$$

Esto determina un valor máximo de la densidad, por debajo del cual todos los electrones tienen su proyección del momento magnético paralela al campo,

$$\left(\frac{N}{V}\right)_{\text{crit}} = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{4m\mu_e H}{h^2}\right)^{3/2}. \quad (13)$$

Siempre en el caso $H > 0$, si $\epsilon_0 \leq \epsilon_{\text{crit}}$, la energía de Fermi es

$$\epsilon_F = 2^{2/3} \epsilon_0 - \mu_e H. \quad (14)$$

Sobrepasado el valor crítico de la densidad, la energía de Fermi es solución de la ecuación

$$2\epsilon_0^{3/2} = (\epsilon_F - \mu_e H)^{3/2} + (\epsilon_F + \mu_e H)^{3/2}. \quad (15)$$

Pasemos al cálculo de la magnetización y de la susceptibilidad. Debido a que el momento magnético del electrón es antiparalelo a su espín, la proyección del momento magnético de un electrón en la dirección del campo es $-\mu_e$. Entonces, la magnetización por partícula es

$$M = \frac{\mu_e}{N} (N_- - N_+) = \frac{\mu_e}{2} \left[\Theta(\epsilon_F + \mu_e H) \left(\frac{\epsilon_F + \mu_e H}{\epsilon_0}\right)^{3/2} - \Theta(\epsilon_F - \mu_e H) \left(\frac{\epsilon_F - \mu_e H}{\epsilon_0}\right)^{3/2} \right]. \quad (16)$$

Para calcular la susceptibilidad, hay que estudiar la magnetización cuando $H \rightarrow 0$, en cuyo caso podemos asumir que $\epsilon_F > \mu_e |H|$,

$$M = \frac{\mu_e}{2} \left[\left(\frac{\epsilon_F + \mu_e H}{\epsilon_0}\right)^{3/2} - \left(\frac{\epsilon_F - \mu_e H}{\epsilon_0}\right)^{3/2} \right]. \quad (17)$$

Tenemos que derivar M respecto de H , con el siguiente cuidado: ϵ_F es función de H . Queda

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} \Big|_{H=0} = \frac{3\mu_e}{4\epsilon_0} \left[\left(\frac{\partial \epsilon_F}{\partial H} \Big|_{H=0} + \mu_e \right) - \left(\frac{\partial \epsilon_F}{\partial H} \Big|_{H=0} - \mu_e \right) \right]. \quad (18)$$

Por suerte, no es necesario calcular la derivada de la energía de Fermi respecto de H , puesto que estos términos se cancelan. Entonces, la susceptibilidad es

$$\chi = \frac{3}{2} \frac{\mu_e^2}{\epsilon_0}. \quad (19)$$

Hasta cierto punto, este resultado era previsible por simples argumentos de análisis dimensional. La susceptibilidad tiene unidades de volumen y puede depender de m , V/N , μ_e^2 y h . La única variable adimensional que podemos formar con estas cantidades es $N\mu_e^2/(V\epsilon_0)$. Luego, debe ser posible escribir la susceptibilidad como

$$\chi = \frac{\mu_e^2}{\epsilon_0} \phi\left(\frac{N\mu_e^2}{V\epsilon_0}\right). \quad (20)$$

■ **Paramagnetismo de Pauli II.** Considere un gas ideal de N electrones en una trampa armónica tridimensional de frecuencia ω en el límite termodinámico. La temperatura es cero. Los electrones interactúan con un campo magnético externo $\mathbf{H} = H\hat{z}$. Es válido aplicar la aproximación semiclásica.

- Escribir la ecuación que determina la energía de Fermi como función de N , ω y H .
- Escribir la magnetización por partícula en función de la energía de Fermi, N , ω y H .
- Calcular la susceptibilidad. El resultado debe quedar escrito sólo en términos de ϵ_F .

■ **Solución.** La energía de Fermi está determinada por la ecuación que da el número de partículas a temperatura cero. Bajo la aproximación semiclásica,

$$N = \frac{1}{h^3} \sum_{s=\pm 1} \int d^3r \int d^3p \Theta\left(\epsilon_F - \frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2 r^2}{2} - s\mu_e H\right) = N_+ + N_-, \quad (21)$$

donde

$$N_{\pm} = \frac{1}{h^3} \int d^3r \int d^3p \Theta\left(\epsilon_F - \frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2 r^2}{2} \mp \mu_e H\right). \quad (22)$$

La integral puede reducirse al volumen de una esfera en seis dimensiones. Definamos

$$\mathbf{x} = \frac{\mathbf{p}}{\sqrt{2m}}, \quad \mathbf{y} = \sqrt{\frac{m\omega^2}{2}} \mathbf{r}. \quad (23)$$

Entonces,

$$N_{\pm} = \frac{8}{(h\omega)^3} \int d^3x \int d^3y \Theta(\epsilon_F - x^2 - y^2 \mp \mu_e H). \quad (24)$$

Ahora definamos un vector \mathbf{z} en \mathbb{R}^6 cuyas componentes cartesianas sean las tres componentes de \mathbf{x} y las tres componentes de \mathbf{y} . Entonces,

$$N_{\pm} = \frac{8}{(h\omega)^3} \int d^6z \Theta(\epsilon_F - z^2 \mp \mu_e H). \quad (25)$$

Esta integral es el volumen de una esfera de radio $(\epsilon_F \mp \mu_e H)^{1/2}$ en seis dimensiones,

$$N_{\pm} = \frac{8\Omega_6}{6(h\omega)^3} \Theta(\epsilon_F \mp \mu_e H) (\epsilon_F \mp \mu_e H)^3. \quad (26)$$

Al igual que en la Ec. (5), la función escalón es necesaria, porque si el radio de la esfera es negativo, el resultado debe ser cero. Recordando que

$$\Omega_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2})}, \quad (27)$$

tenemos $\Omega_6 = \pi^3$. Luego,

$$N_{\pm} = \frac{1}{6(\hbar\omega)^3} \Theta(\epsilon_F \mp \mu_e H) (\epsilon_F \mp \mu_e H)^3. \quad (28)$$

Finalmente, la ecuación que determina la energía de Fermi es

$$6N(\hbar\omega)^3 = \Theta(\epsilon_F - \mu_e H) (\epsilon_F - \mu_e H)^3 + \Theta(\epsilon_F + \mu_e H) (\epsilon_F + \mu_e H)^3. \quad (29)$$

Conviene escribir la ecuación en esta forma puesto que, en el límite termodinámico, el producto $N(\hbar\omega)^3$ se mantiene finito. Si $H = 0$,

$$\epsilon_F \equiv \epsilon_0 = [3N(\hbar\omega)^3]^{1/3}. \quad (30)$$

Esta es una escala de energía característica del sistema. En términos de ϵ_0 , la ecuación que determina la energía de Fermi se lee como

$$2\epsilon_0^3 = \Theta(\epsilon_F - \mu_e H) (\epsilon_F - \mu_e H)^3 + \Theta(\epsilon_F + \mu_e H) (\epsilon_F + \mu_e H)^3. \quad (31)$$

Escrita de esta manera, la ecuación relaciona sólo cantidades intensivas. A su vez,

$$\frac{N_{\pm}}{N} = \frac{1}{2} \Theta(\epsilon_F \mp \mu_e H) \left(\frac{\epsilon_F \mp \mu_e H}{\epsilon_0} \right)^3. \quad (32)$$

Teniendo en cuenta que el momento magnético de los electrones es antiparalelo a su espín, la magnetización por partícula es

$$M = \frac{\mu_e}{N} (N_- - N_+) = \frac{\mu_e}{2} \left[\Theta(\epsilon_F + \mu_e H) \left(\frac{\epsilon_F + \mu_e H}{\epsilon_0} \right)^3 - \Theta(\epsilon_F - \mu_e H) \left(\frac{\epsilon_F - \mu_e H}{\epsilon_0} \right)^3 \right]. \quad (33)$$

Para calcular la susceptibilidad, debido a que interesa el límite $H \rightarrow 0$, podemos asumir que $\epsilon_F > \mu_e |H|$,

$$M = \frac{\mu_e}{2} \left[\left(\frac{\epsilon_F + \mu_e H}{\epsilon_0} \right)^3 - \left(\frac{\epsilon_F - \mu_e H}{\epsilon_0} \right)^3 \right]. \quad (34)$$

La susceptibilidad es

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} \Big|_{H=0} = \frac{\mu_e}{2\epsilon_0} \left[3 \left(\frac{\partial \epsilon_F}{\partial H} \Big|_{H=0} + \mu_e \right) - 3 \left(\frac{\partial \epsilon_F}{\partial H} \Big|_{H=0} - \mu_e \right) \right]. \quad (35)$$

Afortunadamente, no es necesario calcular la derivada de ϵ_F respecto de H , debido a que esos términos se cancelan. El resultado final es

$$\chi = \frac{3\mu_e^2}{\epsilon_0}. \quad (36)$$

Caso general

No es necesario resolver n veces el mismo problema cuando es fácil obtener un resultado general. La magnetización total en la dirección del campo está determinada por la diferencia en los números de electrones cuyos espines son antiparalelos o paralelos al campo,

$$\mathcal{M} = \mu_e (N_- - N_+). \quad (37)$$

Lo que queremos obtener es una expresión general para \mathcal{M} . Si los estados de una partícula están numerados por un índice ℓ y por el signo de la proyección del espín en la dirección del campo, las poblaciones de electrones con un determinado signo de la proyección del espín son

$$N_{\pm}(z, H) = \sum_{\ell} \frac{1}{1 + z^{-1} e^{\beta(\epsilon_{\ell} \pm \mu_e H)}} = \frac{1}{2} N(z e^{\mp \beta \mu_e H}), \quad (38)$$

donde

$$N(z) = 2 \sum_{\ell} \frac{1}{1 + z^{-1} e^{\beta \epsilon_{\ell}}} \quad (39)$$

es el número de partículas como función de la fugacidad y de la temperatura cuando $H = 0$. Sólo interesa aquí su dependencia con z . Vemos que el efecto del campo es introducir fugacidades efectivas para las poblaciones de electrones con cada signo de la proyección del espín. Esto es típico y lo veremos también en el caso de los bosones.

La magnetización total está dada por

$$\mathcal{M} = \frac{\mu_e}{2} \left[N(z e^{\beta \mu_e H}) - N(z e^{-\beta \mu_e H}) \right]. \quad (40)$$

La susceptibilidad es

$$\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial \mathcal{M}}{\partial H} \Big|_{H=0} = \frac{\mu_e^2 z \beta}{N} \frac{\partial N(z)}{\partial z} = \frac{\mu_e^2}{N} \frac{\partial N(\mu)}{\partial \mu}. \quad (41)$$

Este es el resultado principal.

Cuando $T = 0$, el potencial químico es, por definición, la energía de Fermi. Por lo tanto, la susceptibilidad para $T = 0$ es

$$\chi_0 = \frac{\mu_e^2}{N} \frac{\partial N(\epsilon_F)}{\partial \epsilon_F}. \quad (42)$$

Por ejemplo, para el gas en la caja, $N \propto \epsilon_F^{3/2}$ y

$$\chi_0 = \frac{3\mu_e^2}{2\epsilon_F}. \quad (43)$$

Recuperamos el resultado (19). Es igual de sencillo verificar la expresión (36). En el otro límite, cuando $kT \gg \mu$, deberían poder demostrar que

$$N \simeq e^{\beta \mu} Z_1, \quad (44)$$

donde Z_1 es la función de partición canónica de un electrón. Independientemente de la forma de Z_1 , la Ec. (41) implica

$$\chi \simeq \frac{\mu_e^2}{kT}, \quad (45)$$

que es la ley de Curie.

La susceptibilidad a $T = 0$ y la densidad de estados

Existe otra manera de expresar la susceptibilidad para $T = 0$, Ec. (42). En general, la suma sobre estados puede escribirse como una integral en la energía

$$\sum_{\ell} f(\epsilon_{\ell}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon g(\epsilon) f(\epsilon). \quad (46)$$

Esto define la densidad de estados g . Muchas veces la densidad de estados es la magnitud experimentalmente accesible. La definición anterior da la densidad exacta que, por lo general, debido a la discretización de los estados es una suma de deltas de Dirac. Es más usual primero aproximar la suma por una integral y luego introducir una densidad de estados continua:

$$\sum_{\ell} f(\epsilon_{\ell}) \simeq \int d\ell f(\epsilon(\ell)) = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon g(\epsilon) f(\epsilon). \quad (47)$$

La última igualdad involucra un simple cambio en la variable de integración. El paso de la suma a la primera integral suele hacerse invocando la aproximación semiclásica. Si hay grados de libertad cuya suma no puede aproximarse por una integral, como la proyección del espín, esa suma sobrevive hasta la última expresión. En ese caso tendríamos algo así:

$$\sum_{\ell} f(\epsilon_{\ell}) \simeq \sum_s \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon g(\epsilon) f(\epsilon). \quad (48)$$

Por ejemplo, para partículas de espín $\frac{1}{2}$ en una caja cúbica en ausencia de campo magnético y con condiciones de contorno periódicas:

$$\sum_{\ell} f(\epsilon_{\ell}) = 2 \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} f\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{n}^2}{2mV^{2/3}}\right) \simeq 2 \int d^3\mathbf{n} f\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{n}^2}{2mV^{2/3}}\right) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^{\infty} d\epsilon \sqrt{\epsilon} f(\epsilon). \quad (49)$$

El factor 2 es debido a la suma sobre las proyecciones del espín. La densidad de estados es

$$g(\epsilon) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{\epsilon} \Theta(\epsilon). \quad (50)$$

Como quiera que fuese, el número de partículas a $T = 0$ es

$$N(\epsilon_F) = \sum_{\ell} \Theta(\epsilon_F - \epsilon_{\ell}) \simeq \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\epsilon g(\epsilon). \quad (51)$$

Tomaremos el signo aproximado con carácter de igualdad. Luego,

$$\frac{\partial N(\epsilon_F)}{\partial \epsilon_F} = g(\epsilon_F). \quad (52)$$

Entonces, reemplazando en la Ec. (42),

$$\chi_0 = \frac{\mu_e^2}{N} g(\epsilon_F). \quad (53)$$

Este es el otro resultado importante.