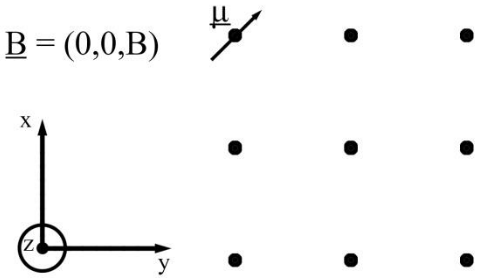
7. óra

Paramágnesség statisztikus fizikája:

<u>Független, lokalizált mágneses atomok, külső mágneses térben</u>

(kanonikus tárgyalásmód)



Legyen mágneses mező B nagyságú és csak z irányú: B = (0, 0, B)

Egy mágneses atom mágneses momentuma a következőképp írható fel:

$$\underline{\mu} = \gamma \hbar \underline{J},$$

ahol $\hbar \underline{J}$ a teljes perdület (impulzus momentum) – J tehát ez esetben egy dimenziótlan szám. γ pedig a giromágneses faktor, mely definíció szerint a mágneses momentum és az impulzus momentum hányadosa, így elektron-rendszerekre a következőképp írható fel:

$$\gamma = -\frac{1}{\hbar}\mu_B g,$$ [1]

ahol μ_B a Bohr magneton, g pedig a Landée-féle állandó:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}; \qquad g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}$$

(Itt $\hbar L$ a pálya perdület, $\hbar S$ pedig a spin perdület.)

Ilyen, elektronoktól származó paramágnesség megfigyelhető többek között bizonyos betöltetlen belső héjú szabad atomok és ionok esetén (bővebben lsd. Kittel: Szilfiz.). Például a Mn^{2+} ion alapállapoti konfigurációja a következőképp írható fel:

$$^{6}S_{\frac{5}{2}},$$

ahol a jelölésrendszer a következő:

$$^{[2S+1]}[L]_{[J]}$$

L = 0,1,2,3,… értékeket vehet fel, melyeket a pályák betűivel jelölnek: S:L=0, P:L=1, D:L=2, F:L=3, … Így a következő olvasható le a Mn^{2+} esetén: S=5/2, L=0, J=5/2.

1 atomra az energia a következőképp írható fel[2]:

$$\varepsilon = -\underline{\mu}\underline{B}$$

---

[1] Az első gyakorlaton a giromágneses faktor helytelenül szerepelt: kimaradt az $1/\hbar$. Ezért jelentek meg később az energiában nemkívánatos $\hbar$ tagok...

[2] Analógia: elektromos dipól <u>E</u> elektromos térben.

Felhasználva az eddigieket:

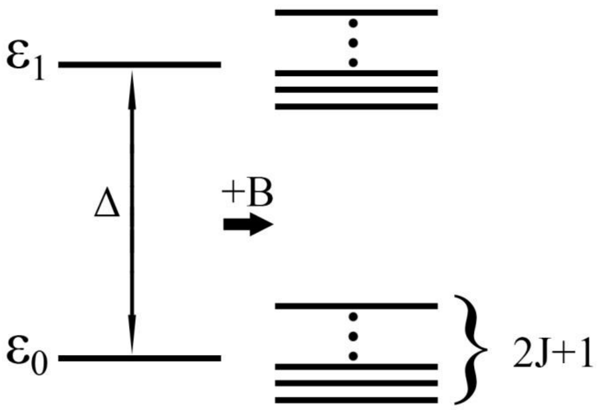
$$\varepsilon = g\mu_B \underline{J}\,\underline{B} \underbrace{=}_{\underline{B}=(0,0,B)} g\mu_B J_z B,$$

ahol $J_z = -J, \dots, +J$ összesen $2J+1$ értéket vehet fel.

N részecskére 1 állapotnak az energiája:

$$E_{\underbrace{m}} = \sum_{i=1}^{N} g\mu_B B J_{zi}$$

Ha $\underline{B}$ mágneses teret kapcsolunk a rendszerre, akkor az energiaszintek felhasadnak: azok az állapotok, melyek eddig azonos energiával rendelkeztek, most eltérő energiájúak lesznek, mivel az energia most függ $\underline{J}$-től és $\underline{B}$-től. Nézzük meg az első két energia szintet:



Alkalmazzuk a következő **közelítést**: tegyük fel, hogy a két energia szint (ε_0 és ε_1) távol esnek egymástól ($\Delta > k_B T$). Ezért most csak az alapállapottal foglalkozunk és csak annak a felhasadását számoljuk (csak az ε_0 nívót számoljuk, ε_1-et elhagyjuk).

Az energia szint 2J+1 részre hasad fel (a felhasadás mértékét B határozza meg).

A rendszer mágnesezettségét a következőképp kaphatjuk meg:

$$-\left(\frac{\partial F}{\partial B}\right)_{N,T} = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial B} = k_B T \frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial B}\sum_{\underbrace{m}} e^{-\beta \sum_{i=1}^{N}\left(-\underline{\mu_i}\underline{B}\right)} = k_B T \frac{1}{Z}\sum_{\underbrace{m}}\frac{\partial}{\partial B} e^{-\beta B \sum_{i=1}^{N}\mu_i} =$$

$$= k_B T \frac{1}{Z}\sum_{\underbrace{m}} e^{-\beta B \sum_{i=1}^{N}\mu_i}\left(\beta \sum_{i=1}^{N}\mu_i\right) = \underbrace{\frac{1}{Z}\sum_{\underbrace{m}} e^{-\beta B \sum_{i=1}^{N}\mu_i}\left(\sum_{i=1}^{N}\mu_i\right)}_{\text{ez egy várható érték}} = \overline{\sum_{i=1}^{N}\mu_i} \equiv VM$$

M az egységnyi térfogatra vett mágnesezettség, ezért a térfogattal megszorozva megkapjuk a rendszer mágnesezettségét.

Mivel az atomok függetlenek és lokalizáltak, ezért használhatjuk a

$$Z = \zeta^N$$

összefüggést. Kiszámolhatjuk az egyrészecske állapotösszeget:

$$\zeta = \sum_{J_z=-J}^{+J} e^{-\overbrace{\frac{1}{k_B T} g\mu_B B}^{\equiv x} J_z} = \underbrace{\sum_{J_z=-J}^{+J} \left(e^{-x}\right)^{J_z}}_{\text{mértani sor}} = e^{Jx}\frac{e^{-x\left(J+\frac{1}{2}\right)}-1}{e^{-x}-1} = \frac{e^{-x(J+1)}-e^{Jx}}{e^{-x}-1} =$$

$$\underbrace{=}_{\substack{\text{bővítünk}\\ \cdot 1-\text{gyel}}} \frac{e^{-x(J+1)} - e^{Jx}}{e^{-x} - 1} \cdot \frac{e^{\frac{x}{2}}}{e^{\frac{x}{2}}} = \frac{e^{-x\left(J+\frac{1}{2}\right)} - e^{x\left(J+\frac{1}{2}\right)}}{e^{-\frac{x}{2}} - e^{\frac{x}{2}}} = \frac{\mathrm{sh}\left(J+\frac{1}{2}\right)x}{\mathrm{sh}\frac{1}{2}x}$$

Ezt felhasználva a rendszer mágnesezettsége:

$$VM = k_B TN \frac{\partial \ln\zeta}{\partial B} \underbrace{=}_{\substack{\text{áttérünk az}\\ x=\beta g\mu_B B\\ \text{szeirnti}\\ \text{deriválásra}}} k_B TN \frac{\partial \ln\zeta}{\partial x}\frac{dx}{dB} = k_B TN \frac{g\mu_B}{k_B T}\frac{\partial}{\partial x}\left[\ln\left(\frac{\mathrm{sh}\left(J+\frac{1}{2}\right)x}{\mathrm{sh}\frac{1}{2}x}\right)\right] =$$

$$= Ng\mu_B \frac{\partial}{\partial x}\left[\ln\left(\mathrm{sh}\left(J+\frac{1}{2}\right)x\right) - \ln\left(\mathrm{sh}\frac{1}{2}x\right)\right] \overset{\mathrm{sh}'(x)=\mathrm{ch}(x)}{=}$$

$$= Ng\mu_B\left[\frac{\mathrm{ch}\left(J+\frac{1}{2}\right)x}{\mathrm{sh}\left(J+\frac{1}{2}\right)x}\left(J+\frac{1}{2}\right) - \frac{\mathrm{ch}\frac{1}{2}x}{\mathrm{sh}\frac{1}{2}x}\left(\frac{1}{2}\right)\right] \overset{\frac{\mathrm{ch}(x)}{\mathrm{sh}(x)}=\mathrm{cth}(x)}{=}$$

$$= Ng\mu_B\left[\left(J+\frac{1}{2}\right)\mathrm{cth}\left(J+\frac{1}{2}\right)x - \frac{1}{2}\mathrm{cth}\frac{1}{2}x\right] \overset{\substack{\text{kiemelünk } J-\text{t}\\ \text{függvényen}\\ \text{belül és kívül is}}}{=}$$

$$= \underbrace{Ng\mu_B J}_{\equiv VM_{\text{telített}}} \underbrace{\left[\left(\frac{2J+1}{2J}\right)\mathrm{cth}\left(\frac{2J+1}{2J}\cdot Jx\right) - \frac{1}{2J}\mathrm{cth}\left(\frac{1}{2J}\cdot Jx\right)\right]}_{\equiv B_J(Jx)\ \rightarrow\ \text{Brillouin-függvény}} = V\cdot M_{\text{telített}}\cdot B_J(Jx)$$

<u>Példa</u>: Ha $J=\frac{1}{2}$; $L=0$; $S=\frac{1}{2}$, akkor $(y=Jx)$ mellett $B_{\frac{1}{2}}(y)=\mathrm{th}(y)$.

HF: Ellenőrizzük a $B_{\frac{1}{2}}(y)=\mathrm{th}(y)$ összefüggést!