Kokojevy

1. Paramagnetismus neinteragujúcivh magnetických momentov

Izolovaný atom s čiastočne zaplnenou valenčnou slupkou

$$\Delta H = -\hat{\mu} \cdot \vec{B} \tag{1}$$

kde $\hat{\mu}$ je magnetický moment slupky daný výrazom $\hat{\mu} = -g\mu_B\hat{J}$, kde $\hat{J}$ je operátor celkového momentu hybnosti a g je Landého faktor.

(a) Statistickým středováním určete střední magnetický moment atomu při teplotě T. Odtud vypočtěte teplotní závislost magnetické susceptibility souboru neinteragujících atomu s koncentrací n. Ukažte, že za vysokých teplot je susceptibilita nepřímo úměrná teplotě (Curieuv zákon).

Štatistickým stredovaním vypočítame magnetický moment pri teplote T ako

$$\Delta H = -g\mu_B\hat{J}\vec{B} = -g\mu_B J_z B_z \tag{2}$$

z kvantovej mechaniky vieme, že orbitálny moment elektrónu je kvantovaný a nadobúda len hodnôt $J_z = m$ kde môže mať hodnoty od $-J$ do $+J$ ($2J+1$ hodnôt) a teda

$$\Delta H = E_m = -g\mu_B B_z m \tag{3}$$

Pravdepodobnosť, že sa atom nachádza v stave s magnetickým kvantovým číslom m je daná

$$P \propto e^{\frac{E_m}{kT}} = e^{\frac{g\mu_B B_z m}{kT}} \tag{4}$$

$$\langle E\rangle = -\frac{\sum_{m=-J}^{J} e^{\frac{g\mu_B B_z m}{kT}} g\mu_B B}{\sum_{m=-J}^{J} e^{\frac{g\mu_B B_z m}{kT}}} \tag{5}$$

$$\langle \mu\rangle = -\frac{\sum_{m=-J}^{J} e^{\frac{g\mu_B B_z m}{kT}} g\mu_B m}{\sum_{m=-J}^{J} e^{\frac{g\mu_B B_z m}{kT}}} \tag{6}$$

čitateľ môžeme vyjadriť ako

$$\sum_{m=-J}^{J} e^{\frac{g\mu_B B_z m}{kT}} g\mu_B m = kT\frac{\partial \sum_{m=-J}^{J} e^{\frac{g\mu_B B_z m}{kT}}}{\partial B_z} \tag{7}$$

ako z bude značená partična suma jedného atómu ktorá je derivovaná v predchádzajúcej rovnici

$$\langle \mu\rangle = \frac{kT}{z}\frac{\partial z}{\partial B_z} = kT\frac{\partial \ln z}{\partial B_z} \tag{8}$$

$$z = \sum_{m=-J}^{J} e^{\frac{g\mu_B B_z m}{kT}} = e^{\frac{g\mu_B B_z}{kT}J}\sum_{k=0}^{2J}\left(e^{\frac{g\mu_B B_z}{kT}}\right)^k = e^{-\frac{g\mu_B B_z}{kT}J}\left(\frac{1-[e^{\frac{g\mu_B B_z}{kT}}]^{2J+1}}{1+e^{\frac{g\mu_B B_z}{kT}}}\right) \tag{9}$$

$$z = \frac{e^{-\frac{g\mu_B B_z}{kT}(J+\frac{1}{2})} + e^{\frac{g\mu_B B_z}{kT}(J+\frac{1}{2})}}{e^{-\frac{g\mu_B B_z}{2kT}} - e^{\frac{g\mu_B B_z}{2kT}}} = \frac{\sinh((J+\frac{1}{2})\frac{g\mu_B B_z}{kT})}{\sinh(\frac{g\mu_B B_z}{kT})} \tag{10}$$

Hyperbolicky tangens je definovany ako

$$\sinh y = \frac{\exp(y) - \exp(-y)}{2} \tag{11}$$

a teda

$$\ln z = \ln \sinh[(J+1/2)\frac{g\mu_B B_z}{kT}] - \ln \sinh(\frac{g\mu_B B_z}{2kT}) \tag{12}$$

$$\langle \mu \rangle = g\mu_B \left(\frac{(J+1/2)\cosh[(J+1/2)\frac{g\mu_B B_z}{kT}]}{\sinh[(J+1/2)\frac{g\mu_B B_z}{kT}]} - \frac{\frac{1}{2}\cosh(\frac{g\mu_B B_z}{2kT})}{\sinh(\frac{g\mu_B B_z}{2kT})} \right) = g\mu_B J \mathbf{B}_J \left(\frac{g\mu_B B_z}{kT} \right) \tag{13}$$

kde $\mathbf{B}_J$ je Brillouinova funkcia

$$\mathbf{B}_J \left(\frac{g\mu_B B_z}{kT} \right) = \frac{1}{J} \left((J+1/2)\coth[(J+1/2)\frac{g\mu_B B_z}{kT}] - \frac{1}{2}\coth(\frac{g\mu_B B_z}{2kT}) \right) \tag{14}$$

V limite vysokých teplôt prejde táto funkcia na tvar

$$B_J \left(\frac{g\mu_B B_z}{kT} \right) = \left(\frac{J+1}{3} \right) \frac{g\mu_B B_z}{kT} \tag{15}$$

$$\langle M \rangle = ng\mu_B J \mathbf{B}_J (\frac{g\mu_B B_z}{kT}) \tag{16}$$

Magnetizacia pre vysoke teploty $\langle M \rangle \propto \frac{g\mu_B B_z}{kT}$

$$\langle M \rangle = n\langle \mu \rangle = \chi \frac{B}{\mu_0} \tag{17}$$

Výsledná susceptibilita je teda rovná

$$\chi = \frac{n\mu_0 \mu_B^2 g^2 J(J+1)}{3kT}. \tag{18}$$

(b) Vypočtěte energii E, tepelnou kapacitu c a entropii S vztaženou na jednotku objemu.

Pre výpočet energie použijeme vzťah

$$E = -N\frac{\partial \ln z}{\partial \beta} \tag{19}$$

a teda

$$E = -NgJ\mu_B B \left(\frac{2J+1}{2J} \coth \left(\frac{(2J+1)\frac{g\mu_B B_z}{kT}}{2} \right) - \frac{1}{2J} \coth \left(\frac{g\mu_B B_z}{2kT} \right) \right). \tag{20}$$

Pre výpočet tepelnej kapacity použijeme vzťah

$$c = \frac{\partial E}{\partial T} \tag{21}$$

a teda výsledná tepelná kapacitá má vzťah

$$c = Nk \left(\frac{gJ\mu_B B}{kT} \right)^2 \left(\left(\frac{1}{2J\sinh(\frac{g\mu_B B_z}{2kT})} \right)^2 - \left(\frac{2J+1}{2J\sinh((2J+1)\frac{g\mu_B B_z}{2kT})} \right)^2 \right). \tag{22}$$

K výpočtu entropie použijeme vzťah

$$S = \frac{E-F}{T} \qquad \text{a} \qquad F = -kT\ln z \tag{23}$$

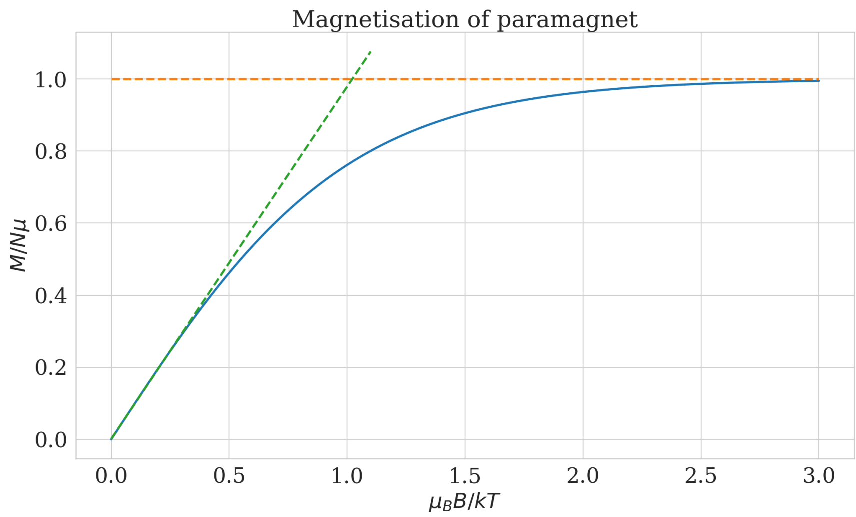
kde F je voľná energia, tým pádom je výsledný vzťah pre entropiu rovný

$$S = -\frac{NgJ\mu_B B}{T}\left(\frac{2J+1}{2J}\coth\left(\frac{(2J+1)g\mu_B B_z}{2kT}\right)\frac{1}{2J}\coth\left(\frac{g\mu_B B_z}{2kT}\right)\right) + \\ + Nk\ln\left(\frac{\sinh\left((J+1/2)\frac{g\mu_B B_z}{kT}\right)}{\sinh\left(\frac{g\mu_B B_z}{2kT}\right)}\right). \quad (24)$$

(c) Zjednodušte výsledky bodov (a) a (b) pro případ $J = 1/2$, $g = 2$ a vykreslete teplotní závislost magnetizace M a veličin E, c a S. Teplotu přitom charakterizujte veličinou $kT/\mu_B B$.

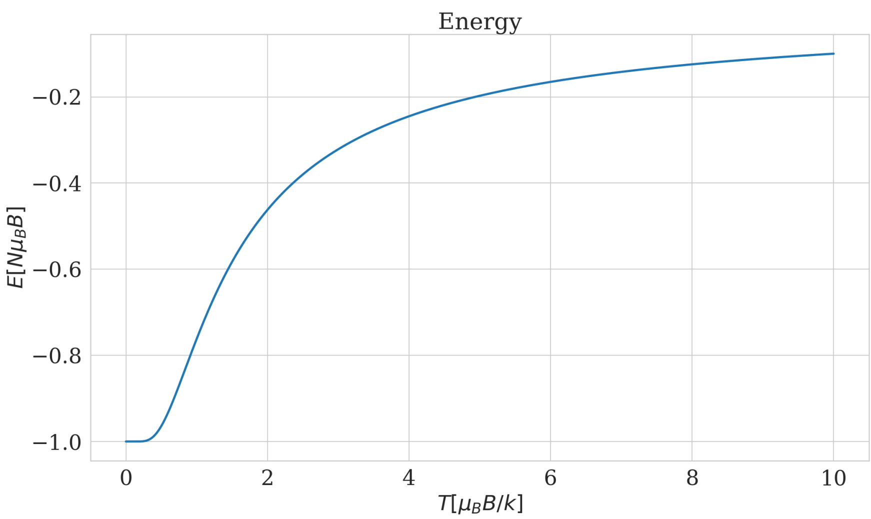
Magnetizácia

$$M = -\frac{N\mu_B}{V}\tanh\frac{\mu_B B}{kT} \quad (25)$$



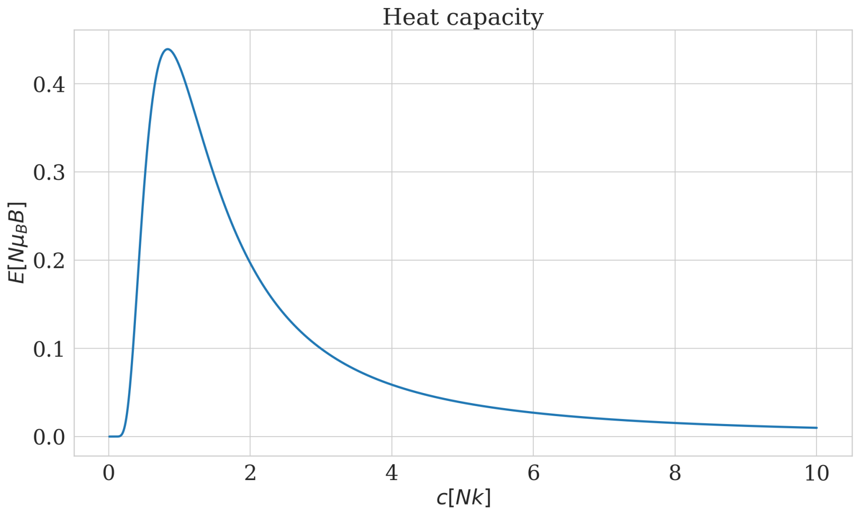
Energia

$$E = -N\mu_B B\tanh\left(\frac{\mu_B B}{kT}\right) \quad (26)$$



Tepelná kapacita

$$C = Nk\left(\frac{\mu_B B}{kT}\right)^2 \frac{1}{\cosh^2(\mu_B B/kT)} \tag{27}$$



Entropia

$$S = \frac{N\mu_B B}{T}\tanh\left(\frac{\mu_B B}{kT}\right) + Nk\ln\left(2\cosh\left(\frac{\mu_B B}{kT}\right)\right) \tag{28}$$