4.2 パウリ常磁性 (固体中の電子の磁性)

前節の議論に従って，磁場下ではスピンによるエネルギー分裂を考慮すると電子系のハミルトニアンは

$$
\boxed{H = \sum_k \sum_{s=\pm\frac{1}{2}} \epsilon_{ks} n_{ks}, \quad n_{ks} = c^\dagger_{ks} c_{ks},}
$$

$$
\epsilon_{ks} = \epsilon_k - \mu_s B
$$

$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$
\mu_s = -g\mu_B s B, \quad \mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m}
$$

となる。ここで μ_s はスピンによる磁気モーメント，$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ は自由電子のエネルギー分散である。

よって温度 T $(\beta = 1/k_B T)$，化学ポテンシャル μ の系の大分配集団の自由エネルギー $J(T, \mu)$ として

$N = \sum_{k,s} \hat{n}_{ks}$

$$
\Xi = \boxed{e^{-\beta J}} = \mathrm{Tr} e^{-\beta(H - \mu \hat{N})} = \mathrm{Tr} e^{-\beta \sum_{ks}(\epsilon_{ks} - \mu) n_{ks}} = \boxed{\prod_{ks} (1 + e^{-\beta(\epsilon_{ks} - \mu)})}
$$

$$
J = -\frac{1}{\beta} \sum_{ks} \log(1 + e^{-\beta(\epsilon_{ks} - \mu)})
$$

$$
= -\frac{1}{\beta} \sum_k \log(1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \frac{1}{2} g\mu_B B - \mu)})(1 + e^{-\beta(\epsilon_k + \frac{1}{2} g\mu_B B - \mu)})
$$

μ 一定での磁化 M は

$\Xi = e^{-\beta J}$

$$M = \langle \mu_s \rangle \equiv \frac{1}{\Xi}\mathrm{Tr}\mu_s e^{-\beta(H-\mu N)} = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial B}\log \Xi = -\frac{\partial J}{\partial B}$$

$$= \frac{1}{2}g\mu_B \sum_k \Big[- f(\epsilon_k - \mu - \frac{1}{2}g\mu_B B) + f(\epsilon_k - \mu + \frac{1}{2}g\mu_B B)\Big]$$

$$= \frac{1}{2}g\mu_B \int d\epsilon\, D(\epsilon)\Big[- f(\epsilon - \mu - \frac{1}{2}g\mu_B B) + f(\epsilon - \mu + \frac{1}{2}g\mu_B B)\Big]$$

ここで $f(x) = \frac{1}{e^{\beta x}+1}$ はフェルミ分布関数であり，$D(\epsilon)$ は状態密度である。更に絶対零度 $T \to +0,\ \beta \to +\infty$ で $f(x) = 1 - \theta(x)$(ステップ関数) であるから，$f'(x) = -\delta(x)$ となる。$B \to 0$ の絶対零度では $\mu \to \epsilon_F$(フェルミエネルギー) となることに注意すれば

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B}\bigg|_{T\to 0, B\to 0}$$

$$= \Big(\frac{1}{2}g\mu_B\Big)^2(2)\int d\epsilon\, D(\epsilon)\delta(\epsilon - \overset{\epsilon_F}{\cancel{\mu_F}})$$

$$= \frac{1}{2}g^2\mu_B^2 D(\epsilon_F) > 0$$

温度に依存しない!

とフェルミエネルギーの状態密度のみで帯磁率が定まる。この磁性をパウリ常磁性という。