

УДК 537.6

<https://doi.org/10.17721/1812-5409.2023/1.15>

Андреев В.О., к.ф.-м.н, доц.

V.O. Andreyev, PhD.

Розрахунок магнітної сприйнятливості виродженого ідеального газу електронів у випадку анізотропної ефективної маси

Calculation of the magnetic susceptibility of a degenerate ideal gas of electrons in the case of anisotropic effective mass

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13,
e-mail: volodymyr.andreev@knu.ua

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13.
e-mail: volodymyr.andreev@knu.ua

Розглянуто вплив анізотропії ефективної маси на компоненти тензора діамagnetної сприйнятливості виродженого ідеального газу електронів провідності у кристалах. Обраховано залежність цих компонент від орієнтації магнітного поля відносно кристалічних висей. Отримані результати можуть бути використані для відокремлення діамagnetної сприйнятливості електронів провідності від сприйнятливостей обумовлених іншими механізмами.

Ключові слова: ідеальний газ електронів, магнітна сприйнятливість, ефективна маса.

Dependence of the diamagnetic susceptibility of a degenerate ideal gas of electrons on the orientation of the magnetic field strength vector relative to the crystal axes, which is due to the anisotropy of the effective mass of electrons is considered. The presence of a diamagnetic susceptibility of a degenerate ideal gas of electrons is one of the fundamental results of the application of quantum mechanics and statistical physics to the description of magnetic phenomena. For an ideal gas of electrons in vacuum, the magnetic susceptibility has diamagnetic and paramagnetic components, the origin of which is due to different mechanisms. At low values of the magnetic field strength and high temperatures, their values are proportional to each other. Since the total value of the susceptibility is measured, it is impossible to separate them. Moreover, when measuring the magnetic susceptibility of a crystal, the contribution of conduction electrons cannot be separated from the contributions of the electrons of atoms, unless some features of the behavior of the magnetic susceptibility of conduction electrons are known. In this article, the calculation of the angular dependence of the effective mass of electrons due to the anisotropy is carried out. The angular dependence of the diamagnetic susceptibility is calculated for the practically important case when the distances between the nearest magnetic levels are small compared to the temperature. It is shown that the angular dependence of the diamagnetic susceptibility coincides with the angular dependence of the cyclotron mass squared, which can be determined from independent cyclotron resonance experiments. It is proposed to use the results obtained to separate the diamagnetic susceptibility of conduction electrons from susceptibilities due to other mechanisms.

Key words: ideal electron gas, magnetic susceptibility, effective mass.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М.В.

1. Вступ

Як було показано Ландау, у зовнішньому магнітному полі виникає квантування орбіт електронів [3]. Це квантування приводить до появи діамagnetизму ідеального газу електронів, який неможна описати у межах класичної фізики [4].

Практично важливим прикладом системи де можна спостерігати ефекти, пов'язані з діамagnetизмом Ландау, є газ електронів провідності у металах та вироджених напівпровідниках, в яких при великих значеннях напруженості магнітного поля та низьких температурах, квантування орбіт електронів приводить до осциляцій магнітної сприйнятливості. В інших випадках діамagnetизм Ландау на експерименті маскується внесками сприйнятливостей, обумовлених іншими механізмами. Тому, щоб відокремити діамagnetну сприйнятливість Ландау від сприйнятливостей, обумовлених іншими механізмами важливо знати її специфічні

властивості, наприклад, її залежність від орієнтації зовнішнього магнітного поля, яка вивчається в цій роботі.

2. Опис моделі

Для проведення розрахунків магнітної сприйнятливості потрібно знати спектр енергій електрону провідності, який розглядається у наближенні ефективної маси [1, 5], причому часто вважають, що за відсутності магнітного поля залежність енергії електрона від хвильового вектору, у квадратичному наближенні, має вигляд:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \sum_{j=x,y,z} \frac{\hbar^2 k_j^2}{2m_j^*}, \quad (1)$$

де m_j^* - компоненти тензора ефективна маса електрону, які подані у власній системі координат, зв'язаної з висями кристалу.

З розрахунків [1], впливає, при наявності магнітного поля рівні енергії електрона у випадку анізотропної ефективної маси описуються співвідношенням, яке має вигляд подібний до випадку вільних електронів у вакуумі:

$$\varepsilon(k_H, n, M) = \frac{\hbar^2 k_H^2}{2m_H} + \hbar\omega_s M + \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (2)$$

де $n = 0, 1, 2, \dots$ - індекс рівня Ландау, k_H - проекція хвильового вектору, а $M = \pm 1/2$ - значення проекції спіну електрону на напрямок вектору напруженості магнітного поля $\mathbf{H}$, H - величина цього вектору, m_H - відповідна компонента тензору ефективної маси

$$\omega_z = \frac{|e|H}{cm_e}, \quad (3)$$

частота, пов'язана з розчепленням спінових рівнів енергії електрону,

$$\omega_c = \frac{|e|H}{cm_c}, \quad (4)$$

циклотронна частота. В останніх формулах e та m_e - заряд та маса електрону, а m_c - циклотронна маса, яка у межах даної моделі описується виразом

$$m_c(\mathbf{n}) = \left(\frac{n_1^2}{m_2^* m_3^*} + \frac{n_2^2}{m_3^* m_1^*} + \frac{n_3^2}{m_1^* m_2^*} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (5)$$

в якому n_i - проекції вектору $\mathbf{n} = \mathbf{H}/H$ на напрямки власних векторів тензору ефективної маси.

Зауважимо також, що для вільних електронів у вакуумі, $m_j^* = m_e$ і некої кутової залежності циклотронної частоти немає.

Згідно до результатів [1] рівні Ландау є виродженими зі ступеню виродження яка не залежить від значення квантового числа n і описується формулою

$$g = \frac{m_c(\mathbf{n})}{2\pi\hbar} \omega_c S, \quad (6)$$

де S - площа системи у напрямку перпендикулярному до $\mathbf{H}$.

3. Розрахунок магнітної сприйнятливості

Для аналізу властивостей ідеального газу Ферміонів звичайно використовують великий канонічний розподіл Гіббса [1]. При цьому вираз для великого потенціалу має вигляд

$$\Omega(T, V, \mu, H) = -\frac{1}{\beta} \sum_r \ln(e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}), \quad (7)$$

де μ - хімічний потенціал, $\beta = 1/k_B T$, ε_r - енергія стані, який нумерується індексом r . У випадку, який розглядається в цій роботі, ε_r описується виразом (2), тому великий потенціал залежить від напруженості магнітного поля. З термодинаміки відомо, що

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \Omega(T, V, \mu, H) = -N(T, V, \mu, H), \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial H} \Omega(T, V, \mu, H) = -M(T, V, \mu, H), \quad (9)$$

де N та M - кількість частинок та магнітний момент газу, з виразу для якого і визначається магнітна сприйнятливості $\chi = M/VH$.

Зауважимо, що кінцеві результати необхідно подати через контрольовані на експерименті параметри системи (T, V, N, H) . Для цього використовують вираз для вільної енергії

$$F = N\mu(T, V, N, H) + \Omega(T, V, \mu(T, V, N, H), H), \quad (10)$$

Оскільки

$$N \frac{\partial}{\partial H} \mu + \frac{\partial}{\partial \mu} \Omega(T, V, \mu, H) \frac{\partial}{\partial H} \mu = 0, \quad (11)$$

то

$$M(T, V, N, H) = M(T, V, \mu(T, V, N, H), H). \quad (12)$$

Тобто, магнітний момент у змінних (T, V, N, H) отримується з виразу для $M(T, V, \mu, H)$, який обчислюється з рівняння (9), підстановкою хімічного потенціалу $\mu(T, V, N, H)$, який неявно заданий рівнянням (8) при фіксованій кількості частинок N .

З вигляду спектру енергії (2) впливає, що великий потенціал можна подати у вигляді

$$\Omega(T, V, \mu, H) = \sum_{n=0}^{\infty} F\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (13)$$

де

$$F(x) = -\frac{\hbar\omega_c}{2} \sum_M f(\mu - \hbar\omega_z M - \hbar\omega_c x), \quad (14)$$

і

$$f(y) = -\frac{Vm_c}{2\beta\pi^2\hbar^2} \int \ln\left(1 + e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2 k_H^2}{2m_H} - y\right)}\right) dk_H, \quad (15)$$

Нехай значення H і T такі, що $\beta\hbar\omega_s \ll 1$ та $\beta\hbar\omega_c \ll 1$, а $\beta\mu \gg 1$. Тобто, величина хімічного

потенціалу є великою і газ електронів провідності є виродженим.

За цих умов $F(x)$ мало змінюється, при змінах аргументу на одиницю і для підсумування у формулі (13) застосовують формулу Ейлера-Маклорена [4,6] у вигляді

$$\sum_{n=0}^{\infty} F\left(n + \frac{1}{2}\right) \approx \int_0^{\infty} F(x) dx + \frac{1}{24} \left(\frac{dF}{dx}\right)_{x=0}. \quad (16)$$

Обчислення величин, які входять у праву частину виразу (16) дає

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} F(x) dx &= -\frac{\hbar\omega_c}{2} \sum_M \int_0^{\infty} f(\mu - \hbar\omega_s M - \hbar\omega_o x) dx \\ &= \frac{1}{2} \sum_M \int_{\mu - \hbar\omega_s M}^{\mu} f(y) dy \\ &\approx \int_{-\infty}^{\mu} f(y) dy + \frac{\partial f(\mu)}{\partial \mu} \left(\frac{\hbar\omega_s}{2}\right)^2, \end{aligned} \quad (17)$$

і

$$\begin{aligned} \left(\frac{dF}{dx}\right)_{x=0} &= \frac{\hbar\omega_o}{2} \sum_M \left(\frac{d}{dx} f(\mu - \hbar\omega_s M - \hbar\omega_o x)\right)_{x=0} \\ &= -\frac{(\hbar\omega_o)^2}{2} \sum_M \frac{\partial f(\mu - \hbar\omega_s M)}{\partial \mu} \\ &\approx -2(\hbar\omega_o)^2 \frac{\partial f(\mu)}{\partial \mu}. \end{aligned} \quad (18)$$

Оскільки

$$\int_{-\infty}^{\mu} f(y) dy = \Omega(T, V, \mu, 0), \quad (19)$$

то з формули (19) випливає, що

$$\frac{\partial}{\partial \mu} f(\mu) = \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \Omega(T, V, \mu, 0) = -\frac{\partial}{\partial \mu} N(T, V, \mu, 0), \quad (20).$$

При цьому

$$\begin{aligned} \Omega(T, V, \mu, H) &= \Omega(T, V, \mu, 0) \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{4} \left(\omega_z^2 - \frac{1}{3}\omega_c^2\right) \frac{\partial}{\partial \mu} N(T, V, \mu, 0), \end{aligned} \quad (21)$$

а для магнітного моменту газу справедливе рівняння

$$M(T, V, \mu, H) = \frac{\hbar^2}{4} \frac{\partial}{\partial \mu} N(T, V, \mu, 0) \frac{\partial}{\partial H} \left(\omega_z^2 - \frac{1}{3}\omega_c^2\right). \quad (22)$$

Таким чином,

$$\chi = \frac{1}{2} \left(\frac{e\hbar}{c}\right)^2 \left(\frac{1}{m_e^2} - \frac{1}{3m_c^2}\right) = \chi_P + \chi_D. \quad (23)$$

Перша частина в виразі (23) описує парамагнітну сприйнятливості (парамагнетизм Паулі), яка не залежить від орієнтації H а друга відповідає діамагнітній складовій Ландау.

З точністю до величин порядку $\left(\frac{\hbar\omega_c}{\varepsilon_F}\right)^2$ і

$\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2$ можна покласти

$$\mu(T, V, N, H) = \mu(0, V, N, 0) = \varepsilon_F, \quad (24)$$

де ε_F – енергія Фермі газу електронів провідності при $H = 0$, яка описується виразом

$$\varepsilon_F = \left(\frac{3N}{8\pi V}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2(m_1^* m_2^* m_3^*)^{1/3}}, \quad (25)$$

Таким чином, з формул (5),(22),(25) випливає, що у випадку анізотропної ефективної маси діамагнітна сприйнятливості виродженого ідеального газу електронів описується формулою

$$\chi_D(\mathbf{n}) = -\frac{2N}{3V\varepsilon_F} \left(\frac{e\hbar}{3c}\right)^2 \left(\frac{n_1^2}{m_2^* m_3^*} + \frac{n_2^2}{m_3^* m_1^*} + \frac{n_3^2}{m_1^* m_2^*}\right), \quad (26)$$

4. Висновки

У наслідок анізотропії ефективної маси, χ_D залежить від напрямку, який утворює вектор напруженості магнітного поля з вісями кристалу. Кутова залежність $\chi_D(\mathbf{n})$ пов'язана з кутовою залежністю циклотронної маси (5), яка звичайно вимірюється за допомогою циклотронного резонансу з метою отримання значень компонент тензору ефективної маси [5]. Таким чином, при порівнянні результатів вимірювання магнітної сприйнятливості з результатами циклотронного резонансу можна виділити діамагнітну сприйнятливості Ландау на фоні інших механізмів, які дають внесок у магнітну сприйнятливості металу.

Список використаних джерел

1. Bassani F. Electronic States and Optical Transitions in Solids / F. Bassani and G. Pastori Parravicini. Edited by R. A. Ballinger // Pergamon Press, -1975. 300 p.
2. Боровик Е.С. Лекции по магнетизму / Е.С.Боровик, В.В.Еременко, А.С.Мильнер // М.: ФИЗМАТЛИТ. - 2005. - 512 с.
3. Ландау Л.Д. Теоретическая физика: Т.III: Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц // М.: Наука. - 1974. -768 с.
4. Ландау Л.Д. Теоретическая физика: Т.V: Статистическая физика: Ч.1./ Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц // М.: Наука. - 1976.-584 с.
5. Пінкевич І.П. Теорія твердого тіла / І.П. Пінкевич, В.Й. Сугаков // К.: Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет". - 2006. - 334 с.
6. Shoenberg D. Magnetic oscillation in metals / D.Shoenberg // Cambridge University Press. — 1984. - 680 p.

References

1. BASSANI F., PASTORI PARRAVICINI G.(1975) *Electronic States and Optical Transitions in Solids*. Pergamon Press. - 300 p.
2. BOROVIK E.S., EREMENKO V.V., MILNER A.S. (2005) *Lectures on magnetism*. Fizmatlit Publishing House. - 512 p.
3. LANDAU L. D. LIFSHITS E.M. (1974). *Theoretical physics: Volume III: Quantum mechanics. Non-relativistic theory*. Nauka Publishing House -768 p.
4. LANDAU L. D. LIFSHITS E.M. (1974). *Theoretical physics: T.V: Statistical physics: Part 1* . Nauka Publishing House -584 p.
5. PINKTVICH I.P., SUGAKOV V.Y. (2006). *Solid State Theory*. Kyiv University Publishing and Printing Center. - 334 p.
6. SHOENBERG D.(1984) *Magnetic oscillation in metals*. Cambridge University Press. — 680 p.

Надійшла до редакції 2.06.2023