



*Кондратьев Александр Сергеевич,  
Ляпцев Александр Викторович,  
Скоропад Дмитрий Владимирович*

## МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОВ

### Аннотация

Обсуждается соотношение между аналитическими и вычислительными методами исследования математических моделей реальных систем на примере расчета магнитных свойств металлов.

**Ключевые слова:** магнитный момент, термодинамический потенциал, осцилляции термодинамических характеристик, интеграл Ферми-Дирака.

В настоящей работе мы продолжим начатое в [1, 2] сопоставление аналитических и вычислительных методов при изучении различных вопросов физики. Здесь речь пойдет об изучении магнитных свойств вещества в курсе теоретической физики. Как известно, магнитные свойства вещества представляют собой квантовый эффект, так как, согласно теореме Бора – ван Левен, система, подчиняющаяся законам классической физики, не может обладать магнитными свойствами [3].

Основы квантовой теории магнитных свойств металлов были заложены Л. Ландау и В. Паули. Ландау рассмотрел диамагнитные свойства, возникающие благодаря квантованию движения свободных носителей электрического заряда внешним магнитным полем [4], а Паули – парамагнитные свойства, обязанные своим происхождением спину и связанным с ним собственным магнитным моментам частиц [5].

Заметим, что диамагнетизм и парамагнетизм для электронов можно рассматри-

вать по отдельности в случае слабых магнитных полей. В теории магнетизма вещества естественным образом возникают два безразмерных параметра. Первый параметр (обозначим его через  $\alpha$ ) равен отношению химического потенциала к энергии теплового движения:  $\alpha = \mu / (kT)$ . Второй параметр (обозначим его через  $\eta$ ) равен отношению характерной энергии взаимодействия электрона с магнитным полем к энергии теплового движения:  $\eta = \hbar\omega_c / (kT)$ , где  $\omega_c = eB / (mc)$  – циклотронная частота,  $B$  – индукция магнитного поля,  $e$  и  $m$  – заряд и масса электрона,  $c$  – скорость света. Слабые магнитные поля, при которых разделяются орбитальный диамагнетизм и спиновый парамагнетизм, соответствуют условию  $\eta \ll 1$ .

При более сильных полях, таких что  $1 \leq \eta \ll \alpha$ , возникает новый качественный эффект – осцилляции термодинамических характеристик системы – магнитного момента, теплоемкости, магнетосопротивления и т.д. при изменении внешнего магнитного поля. В пионерских работах Ландау, вошедших в золотой фонд

---

© А.С. Кондратьев, А.В. Ляпцев,  
Д.В. Скоропад, 2010

теоретической физики, рассмотрение этого эффекта основывалось на использовании приближенной формулы суммирования Пуассона [5]:

$$\frac{1}{2} F(0) + \sum_{n=1}^{\infty} F(n) = \int_0^{\infty} F(x) dx + 2 \operatorname{Re} \sum_{l=1}^{\infty} \int_0^{\infty} F(x) e^{2\pi i l x} dx,$$

позволяющей выделить осциллирующую с полем часть выражения для большого термодинамического потенциала системы  $\Omega$ , определяющего все ее термодинамические свойства. Использование формулы Пуассона сопряжено с громоздкими аналитическими преобразованиями, связанными с вычислением интеграла методом перевала. Далее, при вычислении с помощью полученного приближенного выражения для  $\Omega$  термодинамических характеристик системы дифференцированию подвергаются лишь наиболее быстро меняющиеся множители, что приводит к потере некоторых точных соотношений, определяющих картину формирования статистических свойств системы на основе известной квантовой динамики составляющих ее частиц. Кроме того, на основании приближенных вычислений Ландау был сделан вывод о том, что квантование свободного движения приводит исключительно к диамагнетизму системы [4], тогда как в действительности существуют области значений магнитного поля, в которых система парамагнитна.

При еще более сильных магнитных полях, назовем их сверхсильными, то есть в случае, когда параметры  $\alpha$  и  $\eta$  являются величинами одного порядка, приближенный аналитический расчет оказывается затруднительным. Однако в этом случае возникает новый качественный эффект – влияние магнитного поля на величину химического потенциала.

Использование современных вычислительных средств позволяет существенно улучшить изложение рассматриваемого вопроса, обеспечивая получение как точных фундаментальных соотношений, свя-

зывающих различные термодинамические характеристики системы, так и полной картины осцилляций за гораздо меньшее время.

Рассмотрение основывается на использовании общего выражения для большого термодинамического потенциала  $\Omega$  для системы фермионов [5]:

$$\Omega = -kT \sum_{\lambda} \ln \left( 1 + \exp \frac{\mu - \varepsilon_{\lambda}}{kT} \right),$$

где  $\lambda$  – полный набор квантовых чисел, определяющих состояние частицы и ее энергию  $\varepsilon_{\lambda}$ ,  $\mu$  – химический потенциал,  $T$  – абсолютная температура.

Рассмотрим вначале модельный случай «бесспиновых» частиц, что соответствует ситуации, когда магнитный момент, связанный со спином, пренебрежимо мал по сравнению с магнитным моментом, обусловленным орбитальным движением. Наличие спина при этом учитывается только при подсчете плотности состояний [4], выражение для которой в квантующем магнитном поле получается в виде [3]:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{Vm^{3/2} \omega_c}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^2}} \sum_n \left( \varepsilon - \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) \right)^{-1/2},$$

где  $V$  – объем системы,  $m$  – масса частицы, а суммирование проводится по таким значениям  $n = 1, 2, 3, \dots$ , при которых выражение, стоящее под знаком суммы, вещественно. В результате приходим к точному выражению для термодинамического потенциала  $\Omega$  [3]:

$$\Omega = - \frac{Vm^{3/2} \omega_c (kT)^{3/2}}{\sqrt{2\pi^3 \hbar^2}} \sum_{n=0}^{\infty} F_{1/2} \left( \frac{\mu - \hbar \omega_c (n + \frac{1}{2})}{kT} \right).$$

Здесь  $F_k(\eta)$  – интеграл Ферми-Дирака, определяемый соотношением:

$$F_k(\eta) = \frac{1}{\Gamma(k+1)} \int_0^{\infty} \frac{x^k dx}{1 + \exp(x - \eta)},$$

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt.$$

Интегралы Ферми-Дирака обладают свойством

$$\frac{d}{d\eta} F_k(\eta) = F_{k-1}(\eta),$$

что делает их особенно удобными для вычисления термодинамических характеристик системы. Например, для магнитного момента  $M$  получаем:

$$M = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial B}\right)_{T, \mu} = \frac{e}{mc\omega_c} \Omega - \frac{Vm^{1/2}\omega_c e}{\sqrt{2\pi^3} c\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} F_{-1/2} \left( \frac{\mu - \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2})}{kT} \right) \cdot \left( n + \frac{1}{2} \right).$$

С помощью термодинамического равенства

$$d\Omega = -SdT - MdB - Nd\mu \quad (1)$$

можно также вычислить энтропию  $S$  и среднее число частиц  $N$  и, используя явный вид этих выражений, убедиться в справедливости точного соотношения:

$$\frac{5}{2} \Omega + TS + \mu N + MB = 0. \quad (2)$$

Это равенство соответствует выражению  $\Omega = -\frac{2}{3} E_k$ , где  $E_k$  – средняя энергия хаотического движения частиц, равная полной энергии  $E$  за вычетом энергии магнитного момента в поле, равной  $MB$ . Отметим, что аналогичное соотношение справедливо и при учете спинового расщепления энергетических уровней в магнитном поле. Оно остается справедливым и во всех остальных случаях, когда из полной энергии системы удастся выделить энергию хаотического движения частиц  $E_k$ , например, в случае квантования движения носителей в тонкой пленке магнитным полем и размерами образца [6].

Наиболее просто соотношение (2) можно доказать, основываясь на том, что термодинамический потенциал можно представить в виде:

$$\Omega = BT^\gamma f(\alpha, \eta),$$

где  $f$  – некоторая функция от двух переменных,  $\alpha$  и  $\eta$  – определенные выше параметры, а параметр  $\gamma$  принимает значение  $3/2$  для электронного газа или некоторое другое значение при моделировании движения электронов в тонкой пленке в зависимости от используемой модели [6]. Из формулы (2) получим:

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T} = -\gamma BT^{\gamma-1} f + BT^\gamma \left( \frac{\mu}{T^2} f_\alpha + \frac{B}{T^2} f_\eta \right) = -\gamma BT^{\gamma-1} f + T^{\gamma-2} (B\mu f_\alpha + B^2 f_\eta),$$

где

$$f_\alpha = \frac{\partial f}{\partial \alpha}, \quad f_\eta = \frac{\partial f}{\partial \eta}.$$

Аналогично получают формулы:

$$M = -\frac{\partial \Omega}{\partial B} = -BT^{\gamma-1} f_\eta - T^\gamma f,$$

$$N = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = -BT^{\gamma-1} f_\alpha.$$

Выражая из последних равенств функции  $f_\eta$  и  $f_\alpha$  и подставляя их в выражение для  $S$ , после несложных преобразований, получим соотношение:

$$(\gamma+1)\Omega + TS + \mu N + MB = 0.$$

Это фундаментальное статистическое свойство системы многих частиц осталось невыявленным при приближенном аналитическом вычислении термодинамических характеристик с помощью формулы Пуассона [4, 5] и было впервые установлено только при точном их представлении с помощью интегралов Ферми-Дирака [7].

Численный расчет удобно проводить, используя атомную систему единиц:  $h = m = e = 1$ , в которой температура выражается в энергетических единицах атомной системы единиц. В этой системе скорость света  $c = 137$ ,  $\omega_c = B/c$ . После некоторых простых преобразований можно получить формулы:

$$n = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} T^{3/2} \eta \sum_{j=0}^{\infty} F_{-1/2}(\alpha - \eta(j+1/2)), \quad (3)$$

$$Mc/V = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} T^{3/2} \left( \sum_{j=0}^{\infty} F_{1/2}(\alpha - \eta(j+1/2)) - \eta \sum_{j=0}^{\infty} j F_{-1/2}(\alpha - \eta(j+1/2)) \right) - \frac{1}{2} n, \quad (4)$$

где  $n$  – плотность электронов (количество в единице объема). В соответствии с выражением (3) при сверхсильных магнит-

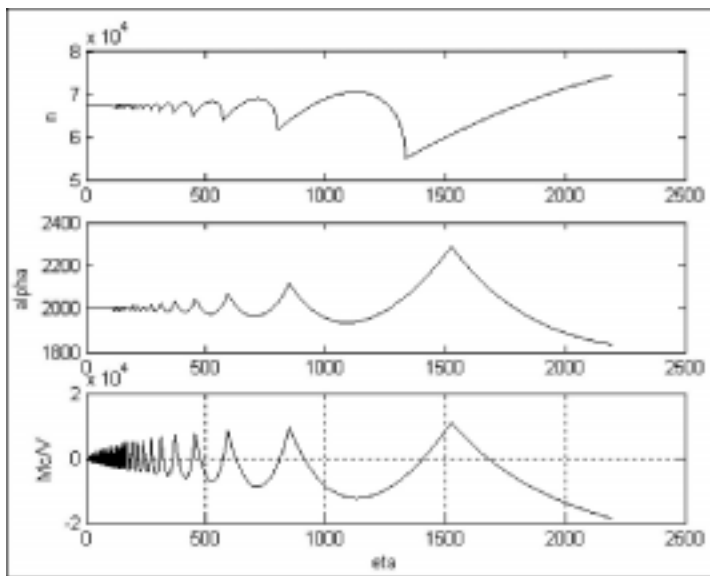


Рис. 1

ных полях, когда параметры  $\alpha$  и  $\eta$  сравниваются по величине, плотность электронов начинает зависеть от величины магнитного поля. Воспользуемся теоремой Дарвина – Фаулера о термодинамической эквивалентности различных статистических ансамблей. В случае, когда рассматривается конечный объем газа с фиксированным числом частиц, плотность не должна изменяться при изменении магнитного поля. Это означает, что формула (3) неявно определяет зависимость параметра

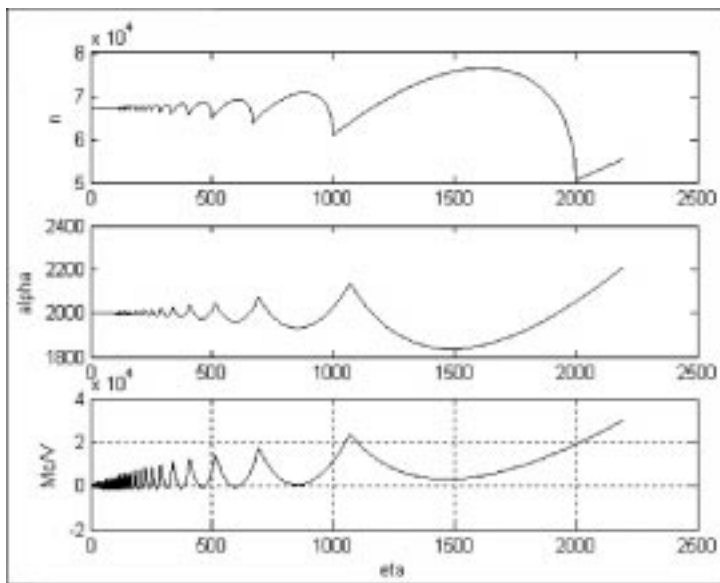


Рис. 2

$\alpha$ , то есть значение химического потенциала  $m$  от величины магнитного поля. Таким образом, расчет следует проводить, зафиксировав некоторое значение  $\alpha_0$ , соответствующее значению химического потенциала в отсутствие поля и заданной температуре, вычислив с помощью формулы (3) значение  $n_0$ , и далее при значениях  $\eta \neq 0$ , использовать формулу (3) с  $n = n_0$  для вычисления значения  $\alpha$ , которое затем подставляется в формулу (4).

Значение  $\alpha_0$  можно вычислить, используя значение температуры вырождения электронного газа и положив  $T = 300$  К [5].

Округлив соответствующее значение, получим  $\alpha_0 = 2000$ . Результаты численного расчета приведены на рис. 1. Параметр  $\eta$  при расчете варьировался от 1 до 2200.

Верхний график – результат расчета величины  $\sqrt{2\pi^3 T^{-3/2}} n$  по формуле (3) при фиксированном значении  $\alpha = \alpha_0$ . Средний график – зависимость  $\alpha(\beta)$ , полученная приравнением  $n$  к  $n_0$ . Нижний график –

зависимость  $\sqrt{2\pi^3 T^{-3/2}} Mc / V$  от  $\eta$ .

Из приведенных графиков наглядно видна зависимость химического потенциала (параметр  $\alpha$ ) от индукции магнитного поля при сверхсильных магнитных полях. Вторая качественная особенность – осцилляции магнитного момента при изменении индукции магнитного поля с переходом через нулевое значение. Это означает, что даже при пренебрежении взаимодействием магнитного поля с магнитным моментом, обусловленным спином, диамагнетизм в слабом магнитном поле (отрица-

тельное значение магнитного момента) превращается в парамагнетизм (при определенных значениях индукции магнитного поля).

Полученные формулы и расчеты легко обобщаются при учете взаимодействия спинового магнитного момента электронов с магнитным полем. В частности, в атомной системе единиц вместо формул (3) и (4) получим:

$$n = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} T^{3/2} \eta \left( \sum_{j=1}^{\infty} F_{-1/2}(\alpha - \eta j) + \frac{1}{2} F_{-1/2}(\alpha) \right), \quad (5)$$

$$M_c / V = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} T^{3/2} \left( \sum_{j=1}^{\infty} F_{1/2}(\alpha - \eta j) + \frac{1}{2} F_{1/2}(\alpha) - \eta \sum_{j=0}^{\infty} j F_{-1/2}(\alpha - \eta j) \right). \quad (6)$$

Расчет, аналогичный тому, что сделан без учета спина, приведен на рис. 2.

Результаты расчета показывают, что качественные особенности при учете спина остаются неизменными, однако магнитный момент, осциллируя при изменении магнитного поля, остается в основном положительным. Но, как видно из графика, существуют узкие области значений магнитного поля, в которых, несмотря на наличие спина, система оказывается диамагнитной. Более детально это можно увидеть на графиках на рис. 3, где приведены результаты расчетов по точным ((5), (6)) и приближенной ((9)) формулам.

При более слабых магнитных полях, то есть при выполнении соотношения  $1 \leq \eta \ll \alpha$  данные, полученные при численном расчете, могут быть сравнены с приближенными формулами, приведенными в [5]. Магнитный момент в области таких магнитных полей складывается из осциллирующей части:

$$M = - \frac{\sqrt{2\beta} m^{3/2} \mu T V}{\pi \hbar^3 \sqrt{H}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sin\left(\frac{\pi \mu}{\beta H} k - \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{k} \operatorname{sh}(\pi^2 k T / \beta H)} \quad (7)$$

и монотонной добавки:

$$\bar{M} = \frac{2}{3} \frac{\beta^2 p_F m}{\pi^2 \hbar^3} H. \quad (8)$$

В этих формулах мы используем обозначения авторов [5]:  $p_F$  – граничный импульс Ферми,  $H$  – напряженность магнитного поля,  $\beta = |e| \hbar / (2mc)$  – магнетон Бора. Переходя к атомным единицам, получим для суммы моментов следующее выражение:

$$M_c / V = \frac{T^{3/2}}{4c} \eta \sqrt{\alpha} - \frac{\alpha T^{3/2}}{\pi \sqrt{\eta}} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\sin\left(\frac{2\pi \alpha}{\eta} j - \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{j} \operatorname{sh}(2\pi^2 j / \eta)}. \quad (9)$$

Сравнение расчетов по формулам (5) и (6) с расчетом по приближенной формуле (9) приведено на рис. 3.

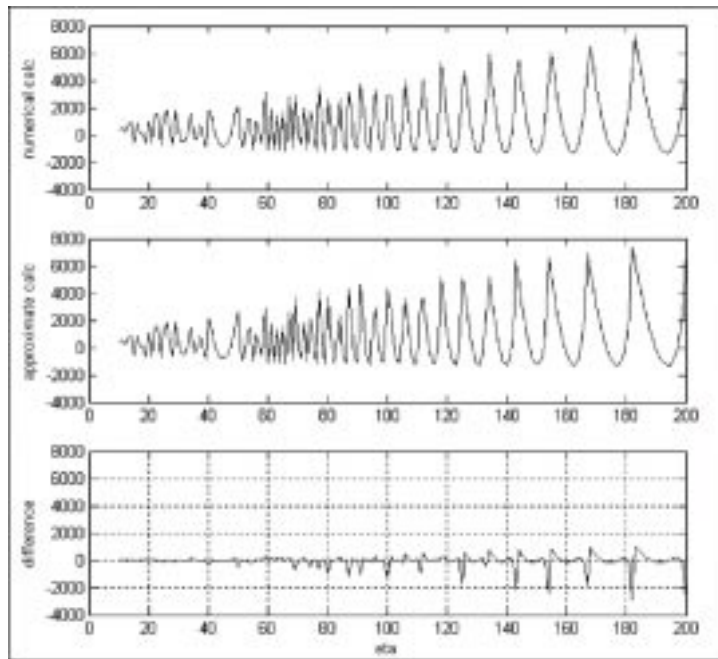


Рис. 3

Как и на предыдущих рисунках по горизонтальной оси отложено значение  $\eta$ , а по вертикальной оси – значения  $\sqrt{2\pi^3 T^{-3/2}} Mc/V$ . Как видно из расчетов, в данной области значений параметра  $\eta$  приближенная формула хорошо описывает зависимость магнитного момента от величины магнитного поля. На нижнем графике приведена разность значений, полу-

чаемых по точной и приближенной формулам.

Приведенные результаты позволяют сделать вывод о том, что при изучении магнитных свойств систем более предпочтительным является рассмотрение, основанное на использовании точных выражений для термодинамических характеристик с помощью интегралов Ферми-Дирака с последующим численным расчетом.

## Литература

1. Кондратьев А.С., Ляцев А.В., Ситнова Е.В. Компьютерное моделирование при изучении физики. Проверка корректности вычислений // Компьютерные инструменты в образовании, № 2, 2006. С. 52–57.
2. Кондратьев А.С., Ляцев А.В. Математическое моделирование: аналитические и вычислительные методы // Компьютерные инструменты в образовании, № 5, 2007. С. 20–24.
3. Кондратьев А.С., Райгородский П.А. Задачи по термодинамике, статистической физике и кинетической теории. М., Физматлит, 2007.
4. Ландау Л.Д. Диамагнетизм металлов. Zs. Phys., v. 64, 1930, p. 629.  
Ландау Л.Д. Собрание трудов 1. М., «Наука», 1969. С. 47–55.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том V. Статистическая физика, часть 1. М., Наука, 2001.
6. Кондратьев А.С., Кучма А.Е. Электронная жидкость нормальных металлов. ЛГУ, Л., 1980.
7. Анохин С.Б., Кондратьев А.С. Термодинамические свойства электронного газа в магнитном поле // Вестник ЛГУ, № 16, 1970. С. 7–11.

## Abstract

The relationship between analytical and computational methods of investigation of mathematical models of real systems is discussed for the calculation of magnetic properties of metals.

**Keywords:** magnetic moment, thermodynamic potential, oscillations of thermodynamic characteristics, Fermi-Dirac integral.

*Кондратьев Александр Сергеевич,  
академик РАО, доктор физико-  
математических наук, профессор  
кафедры методики обучения физике  
РГПУ им. А.И. Герцена,  
kondr6125@mail.ru,*

*Ляцев Александр Викторович,  
доктор физико-математических  
наук, профессор, заведующий  
кафедрой методики обучения  
физике РГПУ им. А.И. Герцена,  
irp\_eno@mail.ru,*

*Скоропад Дмитрий Владимирович,  
аспирант кафедры методики  
обучения физике РГПУ  
им. А.И. Герцена.*



Наши авторы, 2010.  
Our authors, 2010.