磁化率の定義

$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{H}+4\pi\boldsymbol{M}=\boldsymbol{H}(1+4\pi\chi)$, $\chi=\dfrac{\boldsymbol{M}}{\boldsymbol{H}}$, (cgs)、 Meissner effect (ME): $\boldsymbol{B}=0$, $\chi=-\dfrac{1}{4\pi}$

$\boldsymbol{B}=\mu_0(\boldsymbol{H}+\boldsymbol{M})=\boldsymbol{B}_0(1+\dfrac{\mu_0\boldsymbol{M}}{\boldsymbol{B}_0})=\mu_0(1+\mu_0\chi)\boldsymbol{H}$, $\chi=\dfrac{\boldsymbol{M}}{\boldsymbol{B}_0}$, (SI: EB)、ME: $\boldsymbol{B}=0$, $\chi=-\dfrac{1}{\mu_0}$

$\boldsymbol{B}=\mu_0(\boldsymbol{H}+\boldsymbol{M})=\boldsymbol{B}_0(1+\dfrac{\boldsymbol{M}}{\boldsymbol{H}})=\boldsymbol{B}_0(1+\chi)$, $\chi=\mu_0\dfrac{\boldsymbol{M}}{\boldsymbol{B}_0}$, (SI: EB), ME: $\boldsymbol{B}=0$, $\chi=-1$

$\boldsymbol{B}=\mu_0\boldsymbol{H}+\boldsymbol{M}=\boldsymbol{B}_0(1+\chi)=\mu\boldsymbol{H}$, $\chi=\dfrac{\boldsymbol{M}}{\boldsymbol{B}_0}$ (SI: EH), ME: $\boldsymbol{B}=0$, $\chi=-1$

磁化率の単位は、例えば cgs で書いてみると、

$$\chi\propto\frac{N\mu_{\mathrm{B}}^2}{k_{\mathrm{B}}T}=N\left[\frac{\mathrm{erg}^2/\mathrm{Oe}^2}{\mathrm{erg}}\right]=N\left[\frac{\mathrm{erg}}{\mathrm{Oe}^2}\right]=N\left[\frac{\mathrm{erg}}{\mathrm{erg}/\mathrm{cm}^3}\right]=N\left[\mathrm{cm}^3\right]$$

となるので、 N を単位体積当りで取れば無次元量である．そのかわりに、次のような取り方もある．

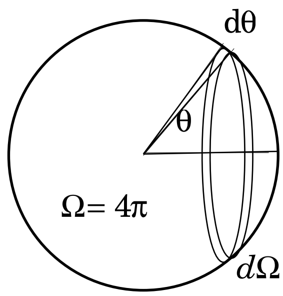
$N[\mathrm{atom/cm}^3]$：体積磁化率

$N[\mathrm{atom/mol}]$：モル磁化率（組成が分かっている時、質量より）

$N[\mathrm{atom/g}]$：グラム磁化率（体積を測るより容易）

自由電子の常磁性磁化率（Curie susceptibility）

古典論（$J=\infty$）



$$\frac{d\Omega}{\Omega}=\frac{2\pi\sin\theta d\theta}{4\pi}=\frac{1}{2}\sin\theta d\theta$$

$W=-\mu\bullet\boldsymbol{B}=-\mu_zB_z=-\mu B\cos\theta$、 （$B=(0,0,B)$）

モーメントが角 θ を取る確率はボルツマン因子を用いて、

$e^{-\frac{W}{k_{\mathrm{B}}T}}=e^{\frac{\mu B\cos\theta}{k_{\mathrm{B}}T}}$.

$\theta\sim\theta+\mathrm{d}\theta$ に入る確率は、

$$e^{\frac{\mu B\cos\theta}{k_{\mathrm{B}}T}}\frac{d\Omega}{\Omega}=\frac{e^{\frac{\mu B\cos\theta}{k_{\mathrm{B}}T}}}{2}\sin\theta d\theta$$

従って、μ_zの期待値は

$$\langle\mu_z\rangle=\frac{\int_0^{\pi}e^{\frac{\mu B\cos\theta}{k_{\mathrm{B}}T}}\sin\theta\mu\cos\theta d\theta}{\int_0^{\pi}e^{\frac{\mu B\cos\theta}{k_{\mathrm{B}}T}}\sin\theta d\theta}=\mu\frac{\int_{-1}^{1}xe^{ax}dx}{\int_{-1}^{1}e^{ax}dx}\text{、}\quad(x=\cos\theta\text{、}a=\frac{\mu B}{k_{\mathrm{B}}T})$$

$$\int_{-1}^{1}xe^{ax}dx=\frac{x}{a}e^{ax}\Big|_{-1}^{1}+\int_{-1}^{1}\frac{e^{ax}}{a}dx=\frac{1}{a}(xe^{ax}-\frac{e^{ax}}{a})\Big|_{-1}^{1}=\frac{e^{a}+e^{-a}}{a}-\frac{e^{a}-e^{-a}}{a^2}$$

$\displaystyle\int_{-1}^{1}e^{ax}dx=\frac{e^{ax}}{a}\Big|_{-1}^{1}=\frac{e^{a}-e^{-a}}{a}$ を用いて、$\displaystyle\langle\mu_z\rangle=\mu\left(\frac{e^{a}+e^{-a}}{e^{a}-e^{-a}}-\frac{1}{a}\right)=\mu(\coth a-\frac{1}{a})=\mu L(a)$

とLangevin関数で与えられる。従って、磁化 M は

$M = N\langle \mu_z \rangle = N\mu L(a)$、

となる。高温領域では、近似

$$L(a) = \coth a - \frac{1}{a} \approx \frac{a}{3} = \frac{\mu B}{3k_B T}, \quad a << 1 \;\; or \;\; k_B T >> \mu B$$

を用いて、キュリー磁化率 ($\chi = M/B$)

$$\chi_C = \frac{N\mu^2}{3k_B T} = \frac{Ng^2\mu_B^2 S(S+1)}{3k_B T}$$

が得られる。

========================

量子論（J=1/2, 1, 3/2,...）

Brillouin 関数（$\mu = -g_J\mu_B JB$, $a = \dfrac{g_J\mu_B JB}{k_B T}$ ）

$M = Ng_J\mu_B JB_J(a)$、 $E_{M_J} = -\mu_{M_J} \bullet B = g_J\mu_B M_J B$

$$B_J(a) = \frac{2J+1}{2J}\coth\frac{2J+1}{2J}a - \frac{1}{2J}\coth\frac{1}{2J}a$$

$$\approx \frac{J+1}{3J}a, \;\; a << 1$$

$$B_{\frac{1}{2}}(a) = \tanh a \quad \text{for} \quad J = \frac{1}{2}$$

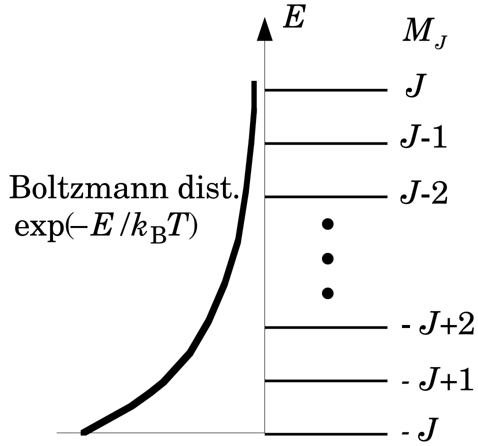
$$\langle M_J \rangle = N\mu_{M_J} P_{M_J}, \;\; P_{M_J} = \frac{\exp(-E_{M_J}/k_B T)}{\sum_{M_J=-J}^{J}\exp(-E_{M_J}/k_B T)}, \;\; E_{M_J} = g_J\mu_B M_J B$$ より,

$$M = \frac{-Ng_J\mu_B \sum_{M_J=-J}^{J} M_J \exp\left(-\dfrac{g_J\mu_B M_J B}{k_B T}\right)}{\sum_{M_J=-J}^{J}\exp\left(-\dfrac{g_J\mu_B M_J B}{k_B T}\right)}$$

$$= k_B T\frac{\partial}{\partial B}\ln Z$$

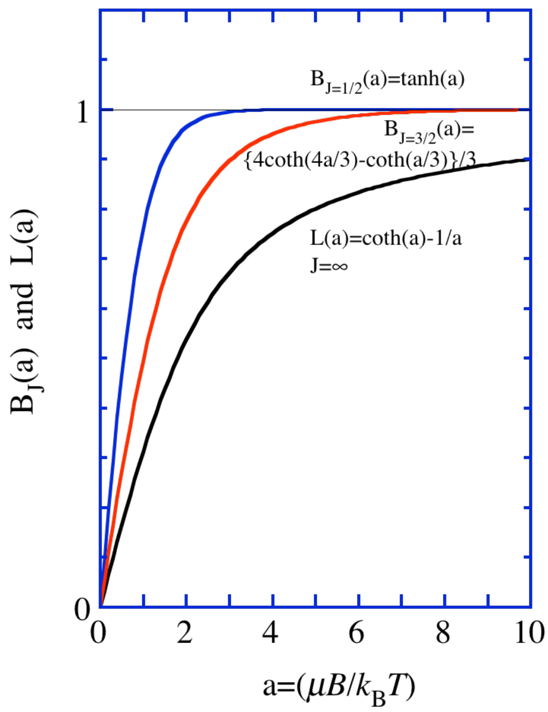
ここで、

$$Z = \left\{\frac{\sinh\left(\dfrac{g_J\mu_B(J+1/2)B}{k_B T}\right)}{\sinh\left(\dfrac{g_J\mu_B B}{2k_B T}\right)}\right\}^N, \quad F = -k_B T\ln Z$$



1 Tesla=10^4 Gaussの磁場中の電子スピンのエネルギーは何Kelvin？

k_B=1.38x10^{-23} J/K



課題1：上のMの式（分数式）に$J = \dfrac{1}{2}$を代入して $M = N\langle \mu_z \rangle = N\mu_B \tanh a$となることを確認しよう.

課題2：磁化の式が上のような分配関数で表されることを確認してみよう.

Brillouin 関数の導出

ボルツマン因子で各 M_J 状態の占有割合を足しあげて、

$$M=\frac{-Ng\mu_{\mathrm{B}}\sum_{M_J=-J}^{J}M_J\exp\left(-\frac{g\mu_{\mathrm{B}}M_JB}{k_{\mathrm{B}}T}\right)}{\sum_{M_J=-J}^{J}\exp\left(-\frac{g\mu_{\mathrm{B}}M_JB}{k_{\mathrm{B}}T}\right)}$$

が得られる。M_J に関する和を実行してブリルアン関数を求めよう。

まず、分母から考えると、$-J$ から J までの和は、$a = g\mu_{\mathrm{B}}JB/k_{\mathrm{B}}T$ と置くと、

$$\sum_{M_J=-J}^{J}\exp(-M_Ja/J)=\frac{\exp(a)-\exp(-(J+1)a/J)}{1-\exp(-a/J)}=\frac{\exp\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)-\exp\left(-\frac{2J+1}{2J}a\right)}{\exp(a/2J)-\exp(-a/2J)}$$

$$=\frac{\sinh\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)}{\sinh\left(\frac{1}{2J}a\right)}$$

一方、分子の方は、

$$\sum_{M_J=-J}^{J}M_J\exp(-M_Ja/J)=-J\frac{\partial}{\partial a}\sum_{M_J=-J}^{J}\exp(-M_Ja/J)$$

と書けるので、分母の級数和の結果を用いて、

$$\sum_{M_J=-J}^{J}M_J\exp(-M_Ja/J)=-J\frac{\partial}{\partial a}\frac{\sinh\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)}{\sinh\left(\frac{1}{2J}a\right)}$$

$$=-J\frac{\frac{2J+1}{2J}\cosh\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)\sinh\left(\frac{1}{2J}a\right)-\frac{1}{2J}\cosh\left(\frac{1}{2J}a\right)\sinh\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)}{\sinh^2\left(\frac{1}{2J}a\right)}$$

が得られる。従って、磁化 M は、

$$M=Ng\mu_BJ\frac{\frac{2J+1}{2J}\cosh\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)\sinh\left(\frac{1}{2J}a\right)-\frac{1}{2J}\cosh\left(\frac{1}{2J}a\right)\sinh\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)}{\sinh^2\left(\frac{1}{2J}a\right)}\frac{\sinh\left(\frac{1}{2J}a\right)}{\sinh\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)}$$

$$=Ng\mu_BJ\left\{\left(\frac{2J+1}{2J}\right)\coth\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)-\frac{1}{2J}\coth\left(\frac{1}{2J}a\right)\right\}=Ng\mu_BJB_J(a)$$

ここで、ブリルアン関数 $B_J(a)$ は、$a = \mu H/k_{\mathrm{B}}T = gJ\mu_{\mathrm{B}}H/k_{\mathrm{B}}T$ の関数として、

$$M=Ng\mu_BJ\left\{\frac{2J+1}{2J}\coth\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)-\frac{1}{2J}\coth\left(\frac{1}{2J}a\right)\right\}=Ng\mu_BJB_J(a)$$

が得られる。ここで、ブリルアン関数 $B_J(a)$ は、$a = g\mu_B JB/k_B T$ の関数として、

$$B_J(a)=\frac{2J+1}{2J}\coth\left(\frac{2J+1}{2J}a\right)-\frac{1}{2J}\coth\left(\frac{1}{2J}a\right)$$

で与えられる。

$a << 1$ （$k_B T >> g\mu_B JB$）を満たすような高温領域では、

$$\coth x=\frac{\cosh x}{\sinh x}=\frac{e^x+e^{-x}}{e^x-e^{-x}}\approx\frac{(1+x+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^3}{3!}+\frac{x^4}{4!})+(1-x+\frac{x^2}{2!}-\frac{x^3}{3!}+\frac{x^4}{4!})}{(1+x+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^3}{3!})-(1-x+\frac{x^2}{2!}-\frac{x^3}{3!})}=\frac{1+\frac{x^2}{2}+\frac{x^4}{24}}{x+\frac{x^3}{6}}$$

$$=\frac{\frac{24+12x^2+x^4}{24}}{\frac{6x+x^3}{6}}=\frac{24+12x^2+x^4}{x(24+4x^2)}=\frac{1}{x}\left(1+\frac{x^2}{3}\frac{8+x^2}{8+4x^2/3}\right)=\frac{1}{x}\left(1+\frac{x^2}{3}\left(1-\frac{x^2/3}{8+4x^2/3}\right)\right)$$

$$\approx\frac{1}{x}+\frac{x}{3}$$

と近似できるので、

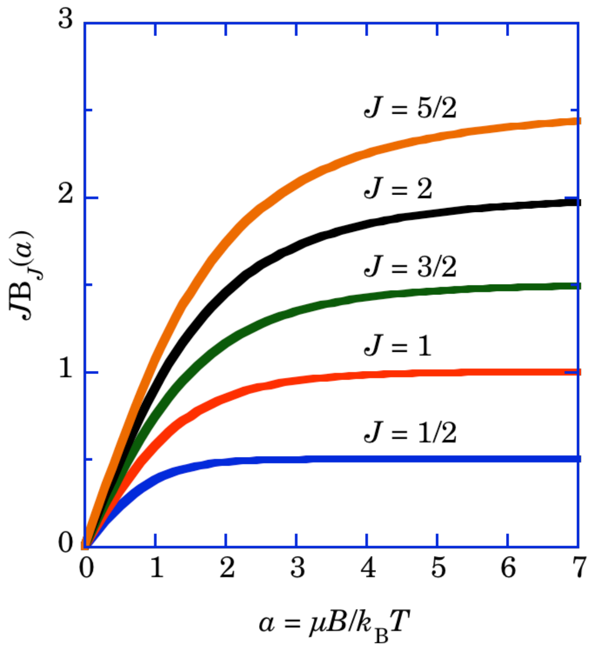
$$B_J(a)\approx\frac{2J+1}{2J}\left(\frac{1}{\frac{2J+1}{2J}a}+\frac{2J+1}{6J}a\right)-\frac{1}{2J}\left(\frac{2J}{a}+\frac{1}{6J}a\right)=\left(\frac{1}{a}+\frac{(2J+1)^2}{12J^2}a\right)-\left(\frac{1}{a}+\frac{1}{12J^2}a\right)$$

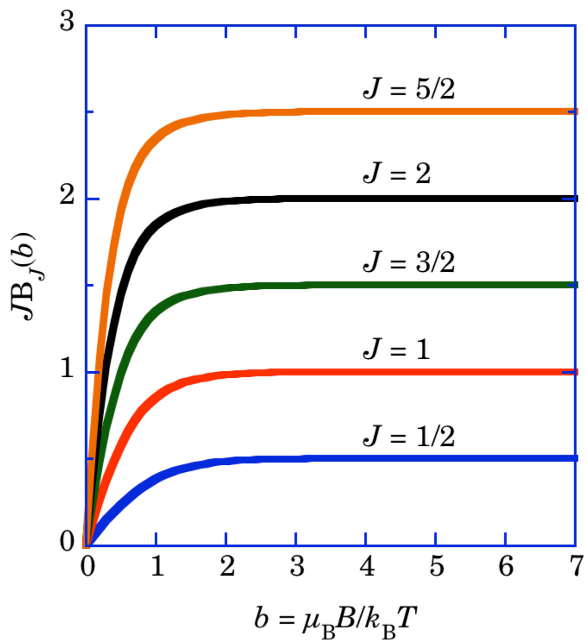
$$=\frac{(2J+1)^2}{12J^2}a-\frac{1}{12J^2}a=\frac{4J^2+4J+1-1}{12J^2}a=\frac{J+1}{3J}a$$

従って、磁化は、

$$M=Ng\mu_B J\frac{J+1}{3J}\frac{g\mu_B J}{k_B T}B=\frac{Ng^2\mu_B{}^2J(J+1)}{3k_B T}B$$

と、温度の逆数に比例する、キュリー則が得られる。





Brillouin 関数の導出２

g-因子が g で、角運動量 J を持つ磁気モーメントの N 個の集団の全磁気モーメントを表す Brillouin 関数を求める。分配関数 Z、$F = -k_B T \ln Z$ 、$M = N\langle\mu\rangle = -\partial F/\partial B$ を用いて、

$$Z = \left\{ \frac{\sinh\left(\frac{g\mu_B (J+1/2)B}{k_B T} \right)}{\sinh\left(\frac{g\mu_B B}{2k_B T} \right)} \right\}^N$$

を $M = N\mu = k_B T \frac{\partial}{\partial B} \ln Z$ に代入して、

$$M = N\mu = Nk_B T \frac{\partial}{\partial B} \ln \left\{ \frac{\sinh\left(\frac{g\mu_B (J+1/2)B}{k_B T} \right)}{\sinh\left(\frac{g\mu_B B}{2k_B T} \right)} \right\}$$

$$= Nk_B T \frac{\partial}{\partial B} \left\{ \ln\left[\sinh\left(\frac{g\mu_B (J+1/2)B}{k_B T} \right) \right] - \ln\left[\sinh\left(\frac{g\mu_B B}{2k_B T} \right) \right] \right\}$$

$$= Nk_B T \left\{ \frac{\frac{g\mu_B (J+1/2)}{k_B T} \cosh\left(\frac{g\mu_B (J+1/2)B}{k_B T} \right)}{\sinh\left(\frac{g\mu_B (J+1/2)B}{k_B T} \right)} - \frac{\frac{g\mu_B}{2k_B T} \cosh\left(\frac{g\mu_B B}{2k_B T} \right)}{\sinh\left(\frac{g\mu_B B}{2k_B T} \right)} \right\}$$

$$= Ng\mu_B J \left\{ \frac{(2J+1)\cosh\left(\frac{g\mu_B (J+1/2)B}{k_B T} \right)}{2J \sinh\left(\frac{g\mu_B (J+1/2)B}{k_B T} \right)} - \frac{\cosh\left(\frac{g\mu_B B}{2k_B T} \right)}{2J \sinh\left(\frac{g\mu_B B}{2k_B T} \right)} \right\}$$

ここで、

$$a = \frac{\mu B}{k_B T} = \frac{g\mu_B J B}{k_B T}$$

と置くと、

$$= Ng\mu_B J \left\{ \frac{(2J+1)}{2J} \coth\left(\frac{(2J+1)}{2J} a \right) - \frac{1}{2J} \cosh\left(\frac{1}{2J} a \right) \right\} = Ng\mu_B J B_J(a)$$

が得られる。