

8. statisztikus fizika gyakorlat

1. Ideális kvantumgázok

Az elméleti összefoglaló során általánosan kezeljük a fermionokat és bozonokat:

- **Állapotsűrűség:** Tetszőleges fizikai mennyiség átlagos értékének meghatározásánál összegeznünk kell egy a Hilbert-téren vett tetszőleges bázis sajátállapotaira, amely során az adott mérhető mennyiség értékeit súlyozzuk az adott állapotok átlagos betöltési számaival, vagyis fermionok esetén a Fermi-függvénnyel, bozonok esetén a Bose-függvénnyel:

$$\langle F \rangle = \sum_{\mathbf{p}, s} \langle n(\mathbf{p}) \rangle F(\mathbf{p}). \quad (1)$$

Ahol $\langle n(\mathbf{p}) \rangle \equiv \frac{1}{\exp(\beta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu)) + \Theta}$, $\Theta = 1$ esetén a Fermi-függvény, illetve $\Theta = -1$ esetén a Bose-függvény, amely megadja a vizsgált állapot (jelen esetben impulzus és spin sajátállapot) átlagos betöltési számát. Az előadáson tanultak alapján, az energia és impulzus közötti diszperziós reláció alapján, speciálisan $d = 3$ dimenzióban klasszikusan, $\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$, áttérhetünk az energia szerinti összegzésre, ami végsősoron az

$$\langle F \rangle = \int_0^\infty F(\varepsilon) \rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon) \rangle d\varepsilon \quad (2)$$

integrálra vezet, ahol először az impulzusokra való összegzésnél áttértünk a $\sum_{\mathbf{p}} \rightarrow \frac{V}{h^3} \int d^3\mathbf{p}$ integrálásra (ahol V a vizsgált rendszer térfogata) és elvégeztük az $\varepsilon = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ diszperziós reláció segítségével a ε energia szerinti integrálásra való áttérést, $\frac{Vg}{h^3} d^3\mathbf{p} = \frac{Vg}{h^3} 4\pi dp p^2 = \rho(\varepsilon) d\varepsilon$, ahonnan $\rho(\varepsilon) = g \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} \equiv A\sqrt{\varepsilon}$, ahol $g = 2S + 1$ a spin állapotokhoz tartozó degenerációs szám, ha (legtöbbször ez az eset) spin függetlennek tételezzük fel a Hamilton operátort. Kiemelünk két fontos példát, az átlagos energia és az átlagos részecskeszámot megadó energia integrálokat:

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty \varepsilon \rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon) \rangle d\varepsilon, \quad (3)$$

$$\langle N \rangle = \int_0^\infty \rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon) \rangle d\varepsilon. \quad (4)$$

- **Nagykanonikus potenciál:** Az előadáson tanultak alapján ehhez először a \mathcal{Z} nagykanonikus állapotösszeget számítjuk ki a következő módon: először az egyes állapotok nagykanonikus állapotösszegeit adjuk meg, majd vesszük ezek szorzatát:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{n_j\}} e^{-\beta(n_j \varepsilon_j - \mu n_j)} = \prod_j \sum_{n_j=0}^{n_{max}} e^{-\beta(n_j \varepsilon_j - \mu n_j)} = \prod_j \left(1 + \Theta e^{-\beta(\varepsilon_j - \mu)}\right)^\Theta, \quad (5)$$

ahol fermionok esetén ($\Theta = 1$) $n_{max} = 1$, az összegzést minden j állapot esetén csak az $n_j = 0, 1$ részecskeszámokra, illetve bozonok esetén ($\Theta = -1$) $n_{max} = \infty$, mivel tetszőleges számú részecske tartózkodhat egy adott állapotban. Véve a fenti kifejezés logaritmusát és ismét áttérve az energia szerinti integrálásra, a következő összefüggés adódik a nagykanonikus potenciálra:

$$\Phi = -\Theta k_B T \int_0^\infty \rho(\varepsilon) \ln\left(1 + \Theta e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}\right) d\varepsilon. \quad (6)$$

1. Állapotsűrűség

Határozzuk meg az állapotsűrűséget d dimenzióban $\varepsilon = c|\mathbf{p}|^\gamma$ diszperziós reláció esetén, $\gamma > 0$ és S spin szabadsági fok jelenlétében.

Az állapotsűrűség impulzus térben d dimenzió esetén

$$\rho(\mathbf{p}) = \frac{gV}{h^d}, \quad g = 2S + 1 \quad (7)$$

Az energiaterületi állapotsűrűséghez a következőt használjuk fel:

$$\rho(\mathbf{p})d\mathbf{p}^d = \varrho(\varepsilon)d\varepsilon, \quad (8)$$

azaz megköveteljük, hogy egy adott $d\mathbf{p}^d$ impulzustérbeli térfogatban ugyanannyi állapot legyen mint egy $d\varepsilon$ szélességű energia ablakban. Innen már könnyen kifejezhető az állapotsűrűség a diszperziós reláció ismeretében:

$$\varrho(\varepsilon) = \frac{gV}{h^d} \Omega_d p^{d-1} \left(\frac{d\varepsilon}{dp} \right)^{-1} = \frac{gV}{h^d c^\gamma} \Omega_d \left(\frac{\varepsilon}{c} \right)^{\frac{d}{\gamma}-1}, \quad (9)$$

ahol $p = |\mathbf{p}|$. Itt egyszerűen $p^{d-1} = \left(\frac{\varepsilon}{c} \right)^{\frac{d-1}{\gamma}}$, illetve $\left(\frac{d\varepsilon}{dp} \right)^{-1} = \frac{p^{1-\gamma}}{c^\gamma} = \frac{\left(\frac{\varepsilon}{c} \right)^{\frac{1-\gamma}{\gamma}}}{c^\gamma}$. Illetve itt Ω_d a d dimenziós térszög.

2. Nagykanonikus potenciál és állapotegyenlet

Lássuk be, hogy ideális bozonikus kvantumgázban, háromdimenzióban és kvadratikus diszperziós reláció esetén, $\varepsilon = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$, a nagykanonikus potenciál felírható a betöltési szám és az integrált állapotsűrűség segítségével az alábbi módon:

$$\Phi = - \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \langle n(\varepsilon) \rangle R(\varepsilon), \quad (10)$$

ahol $R(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon d\varepsilon \rho(\varepsilon)$.

Az előadáson tanultak alapján a nagykanonikus potenciálhoz először a \mathcal{Z} nagykanonikus állapotösszeget számítjuk ki a következő módon: először az egyes állapotok nagykanonikus állapotösszegeit adjuk meg, majd vesszük ezek szorzatát:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{n_j\}} e^{-\beta(n_j \varepsilon_j - \mu n_j)} = \prod_j \sum_{n_j=0}^{n_{max}} e^{-\beta(n_j \varepsilon_j - \mu n_j)} = \prod_j \left(1 + \Theta e^{-\beta(\varepsilon_j - \mu)} \right), \quad (11)$$

ahol fermionok esetén $n_{max} = 1$, az összegzést minden j állapot esetén csak az $n_j = 0, 1$ részecskeszámokra végezzük el ($\Theta = 1$), illetve bozonok esetén ($\Theta = -1$) $n_{max} = \infty$, de a továbbiakban csak a fermionikus esetre fogunk koncentrálni. Véve a fenti kifejezés logaritmusát és ismét áttérve az energia szerinti integrálásra, a következő összefüggés adódik a nagykanonikus potenciálra:

$$\Phi = k_B T \int_0^\infty \rho(\varepsilon) \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)} \right) d\varepsilon. \quad (12)$$

Most használuk fel az előző feladatbeli eredményünket az állapotsűrűségre, $d = 3$, $\gamma = 2$, $c = \frac{1}{2m}$:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2mgV}{h^3} 4\pi \sqrt{2m\varepsilon} = \frac{(2m)^{3/2} 4\pi gV}{h^3} \sqrt{\varepsilon}. \quad (13)$$

Innen az integrál kifejezés először általánosan végrehajtva egy parciális integrálási lépést:

$$\Phi = -k_B T R(\varepsilon) \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)} \right) \Big|_0^\infty - \int_0^\infty R(\varepsilon) \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1} \equiv - \int_0^\infty d\varepsilon R(\varepsilon) f(\varepsilon) = -pV. \quad (14)$$

Az első tag triviálisan 0, mivel $R(0) = \int_0^0 d\varepsilon \rho(\varepsilon) = 0$ és $R(\infty) \ln \left(1 + e^{-\beta(\infty - \mu)} \right) = 0$, míg a második tagban egyszerűen csak vettük az általános deriváltat, $\ln(1 + e^{-x})' = \frac{1}{e^x + 1}$. Általánosan ez a következő általános állapotegyenlethez vezet, a következő jeöléssel $\varrho(\varepsilon) = AV \varepsilon^{\frac{d}{\gamma}-1}$:

$$pV = AV \frac{\gamma}{d} \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon \varrho(\varepsilon) f(\varepsilon) \equiv \frac{\gamma}{d} \langle E \rangle, \quad (15)$$

esetünkben $pV = \frac{2}{3} \langle E \rangle$, illetve $p = \frac{2}{3} A \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^{3/2} f(\varepsilon)$

3. Klasszikus limesz kvantumkorrekciói

Határozzuk meg a nem relativisztikus S spinű, fermionikus ideális kvantumgáz állapotegyenletének, kémiai potenciáljának és nyomásának kvantumkorrekcióját a klasszikus limeszhez képest!

- Határozzuk meg az energia-állapotsűrűséget!
- Írjuk fel az átlagos részecskeszámot meghatározó integrált!
- Fejezzük ki a kémiai potenciált a részecskesűrűséggel a klasszikus limeszben.
- Fejtsük sorba vezetőrendben az átlagos részecskeszámot a klasszikus limesz körül a $e^{\beta\mu}$ szerint.
- Innen pedig határozzuk meg a kémiai potenciál sorfejtését vezetőrendi a klasszikus limesz körül a $n = \frac{\langle N \rangle}{V}$ részecskesűrűség függvényében.
- Ismételjük meg a fenti sorfejtést a nagykanonikus potenciál esetén is az előző feladatban levezetett összefüggés segítségével
- Ennek segítségével határozzuk meg a nyomás kvantumkorrekcióját a klasszikus limeszhez képest a részecskesűrűség függvényében.
- Tegyük ezt meg az átlagos energiára is!
- Határozzuk meg a kettő hányadosából az állapotegyenletet és annak kvantumkorrekcióit!

Most $\varepsilon = c\mathbf{p}^2$, az állapotsűrűség pedig nemnegatív energiákra, azaz $\gamma = 2$ és $c = \frac{1}{2m}$.

$$\rho(\varepsilon) = \frac{(2m)^{3/2} 2\pi g V}{h^3} \sqrt{\varepsilon}. \quad (16)$$

Célunk a klasszikus határeset vezetőrendbeli kvantum korrekcióinak kiszámítása. Ehhez először sorba fejtjük az egyes energiaállapotok átlagos részecskeszámait a klasszikus limesz körül, ahol a részecskék sűrűsége a kicsi paraméter, $n = \frac{\langle N \rangle}{V} \ll 1$, mivel ekkor a ritka gázban a kvantumos effektusok elhanyagolhatóak, illetve kiindulva az ideális gáz példájából, $n = \frac{\langle N \rangle}{V} = g\lambda_T^{-3} e^{\beta\mu}$, látható, hogy esetünkben a megfelelő "kicsi" paraméter nem más mint $n \sim e^{\beta\mu} \ll 1$. $\langle n(\varepsilon) \rangle \approx e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}$ (ami a klasszikus Boltzmann-súllyal azonosítható). A kvantumos hatások vezetőrendbeli korrekciójához tehát úgy juthatunk el, ha $e^{\beta\mu}$ szerinti sorfejtésben megadjuk a következő tagot is:

$$f(\varepsilon) = \frac{e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}}{1 + e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}} \approx e^{-\beta\varepsilon} e^{\beta\mu} (1 - e^{-\beta\varepsilon} e^{\beta\mu}). \quad (17)$$

A fenti sorfejtést behelyettesítve a részecske számot megadó energiaállapotokon végig menő integrálba, a következő adódik:

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \int_0^\infty \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \approx \frac{gAV}{h^3} \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} (e^{-\beta\varepsilon} e^{\beta\mu} - e^{-2\beta\varepsilon} e^{2\beta\mu}) d\varepsilon \\ &= \frac{gAV}{h^3} \left(e^{\beta\mu} \beta^{-3/2} \underbrace{\Gamma(3/2)}_{\sqrt{\pi}/2} - e^{2\beta\mu} (2\beta)^{-3/2} \Gamma(3/2) \right) \\ &= gV \lambda_T^{-3} e^{\beta\mu} \left(1 - \frac{1}{2^{3/2}} e^{\beta\mu} \right), \end{aligned} \quad (18)$$

ahol ismét bevezettük a $\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$ termikus hullámhosszot. Ennek a mennyiségnek a függvényében

$$e^{\beta\mu_{kl}} = \frac{\lambda_T^3 \langle N \rangle}{g V} \equiv \frac{\lambda_T^3 n}{g} \quad (19)$$

Most megadjuk a kémiai potenciál kvantum korrekcióját is. Ehhez osszuk át a (18) egyenletet $(1 - \frac{1}{2^{3/2}} e^{\beta\mu})$ -vel, majd ezt fejtsük sorba vezetőrendig a kis paraméter, $e^{\beta\mu} \ll 1$ szerint

$$\frac{\langle N \rangle}{1 - \frac{1}{2^{3/2}} e^{\beta\mu}} \approx \langle N \rangle \left(1 + \frac{1}{2^{3/2}} e^{\beta\mu} \right) = \frac{gV}{\lambda_T^3} e^{\beta\mu} \quad (20)$$

Innen már kitudjuk fejezni a kémiai potenciált a kicsi paraméter, $n\lambda_T^3 = \frac{\langle N \rangle}{V} \lambda_T^3$, függvényében:

$$e^{\beta\mu} = \frac{n\lambda_T^3}{g - \frac{1}{2^{3/2}} n\lambda_T^3} = \frac{\lambda_T^3 n}{g} + \frac{1}{2^{3/2} g^2} (\lambda_T^3 n)^2 = e^{\beta\mu_{kl}} + e^{\beta\delta\mu} \quad (21)$$

Vagy maguknak a kémiai potenciáloknak a nyelvén

$$\beta\mu \approx \ln\left(\frac{\lambda_T^3}{g}n\right) + \ln\left(1 + \frac{1}{2^{3/2}}\frac{\lambda_T^3}{g}n\right) \approx \ln\left(\frac{\lambda_T^3}{g}n\right) + \frac{1}{2^{3/2}}\frac{\lambda_T^3}{g}n = \beta\mu_{\text{kl}} + \beta\delta\mu \quad (22)$$

ahonnan $\delta\mu = \frac{1}{2^{3/2}}\frac{\lambda_T^3}{g}n$.

Most nézzük a nagykanonikus potenciál általános alakját:

$$\begin{aligned} \Phi &= -\frac{2}{3}\frac{gAV}{h^3}\int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^{3/2} f(\varepsilon) \approx -\frac{2}{3}gAV\int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^{3/2} (e^{-\beta\varepsilon} e^{\beta\mu} - e^{-2\beta\varepsilon} e^{2\beta\mu}) \\ &= -\frac{2}{3}\frac{gAV}{h^3}\left(e^{\beta\mu}\beta^{-5/2}\underbrace{\Gamma(5/2)}_{3\sqrt{\pi}/4} - e^{2\beta\mu}(2\beta)^{-4}\Gamma(5/2)\right) \\ &= -gV\lambda_T^{-3}k_B T e^{\beta\mu}\left(1 - \frac{1}{2^{5/2}}e^{\beta\mu}\right) = -pV. \end{aligned}$$

A klasszikus nyomás a fenti kifejezés első tagja, míg a másodikat sorba fejtjük ismét az $e^{\beta\mu}$ kis paraméter szerint, illetve még az $e^{\beta\mu}$ -nek is vennünk kell a klasszikus limesz körüli sorfejtését.

$$\begin{aligned} p_{\text{kl}} &= g\lambda_T^{-3}k_B T e^{\beta\mu}\left(1 - \frac{1}{2^{5/2}}e^{\beta\mu}\right) = \frac{\langle N \rangle k_B T}{V} \frac{1 - \frac{1}{2^{5/2}}e^{\beta\mu}}{1 - \frac{1}{2^{3/2}}e^{\beta\mu}} \approx p_{\text{kl}}\left(1 - \left(\frac{1}{2^{3/2}} - \frac{1}{2^{5/2}}\right)e^{\beta\mu}\right) \\ &\approx p_{\text{kl}}\left(1 - \left(\frac{1}{2^{3/2}} - \frac{1}{2^{5/2}}\right)e^{\beta\mu_{\text{kl}}}\right) = p_{\text{kl}} + \left(\frac{1}{2^{3/2}} - \frac{1}{2^{5/2}}\right)k_B T \frac{\lambda_T^3 n^2}{g}, \end{aligned} \quad (23)$$

ahol $p_{\text{kl}} = \frac{\langle N \rangle k_B T}{V}$

Most nézzük meg ugyanezt az átlagos energia segítségével is:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int_{-\infty}^\infty \varepsilon \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \approx g\frac{VA}{h^3}\int_0^\infty \varepsilon^{3/2} (e^{-\beta\varepsilon} e^{\beta\mu} - \Theta e^{-2\beta\varepsilon} e^{2\beta\mu}) d\varepsilon \\ &= g\frac{VA}{h^3}\left(e^{\beta\mu}\beta^{-5/2}\underbrace{\Gamma(5/2)}_{3\sqrt{\pi}/4} - e^{2\beta\mu}(2\beta)^{-5/2}\Gamma(5/2)\right) \\ &= \frac{3}{2}gV\lambda_T^{-3}e^{\beta\mu}k_B T\left(1 - \frac{1}{2^{5/2}}e^{\beta\mu}\right). \end{aligned} \quad (24)$$

A releváns közelítések hányadosából az egy részecskére jutó átlagos energia

$$\frac{\langle E \rangle}{\langle N \rangle} \approx \frac{3}{2}k_B T \frac{1 - \frac{1}{2^{5/2}}e^{\beta\mu}}{1 - \frac{1}{2^{3/2}}e^{\beta\mu}} \approx \frac{3}{2}k_B T\left(1 - \frac{1}{2^{5/2}}e^{\beta\mu}\right)\left(1 + \frac{1}{2^{3/2}}e^{\beta\mu}\right) \approx \frac{3}{2}k_B T\left[1 + \left(\frac{1}{2^{3/2}} - \frac{1}{2^{5/2}}\right)e^{\beta\mu}\right] \quad (25)$$

ahol az első tag ismét a klasszikus eredmény, így a második tag a vezető kvantumkorrekció. Ez utóbbi tag pedig ugyancsak vezető rendben $e^{\beta\mu}$ nulladrendű közelítéséből következik, vagyis vezető rendben

$$\frac{\langle E \rangle}{\langle N \rangle} \approx \frac{3}{2}k_B T\left[1 + \frac{1}{2^{5/2}}e^{\beta\mu_{\text{kl}}}\right] = \frac{3}{2}k_B T\left[1 + \left(\frac{1}{2^{3/2}} - \frac{1}{2^{5/2}}\right)\frac{\lambda_T^3 \langle N \rangle}{gV}\right]. \quad (26)$$

Az állapotegyenlet viszont a 2. feladat állításának értelmében

$$pV = \frac{\gamma}{d}\langle E \rangle = \frac{2}{3}\frac{\langle E \rangle}{\langle N \rangle}\langle N \rangle \approx \langle N \rangle k_B T\left[1 + \left(\frac{1}{2^{3/2}} - \frac{1}{2^{5/2}}\right)\frac{\lambda_T^3 \langle N \rangle}{gV}\right]. \quad (27)$$

Az első tag a klasszikus állapotegyenletet adná, a második tag ehhez a vezető kvantumkorrekció.

Megjegyezzük, hogy ahogy nemrelativisztikus gáznál, úgy most is igaz, hogy a gyengén kvantumos gáz nyomása

$$p \approx \frac{\langle N \rangle}{V}k_B T\left[1 + \left(\frac{1}{2^{3/2}} - \frac{1}{2^{5/2}}\right)\frac{\lambda_T^3 \langle N \rangle}{gV}\right] = p_{\text{kl}} + \left(\frac{1}{2^{3/2}} - \frac{1}{2^{5/2}}\right)k_B T \frac{\lambda_T^3 n^2}{g}. \quad (28)$$

Tehát visszakaptuk a korábbi nagykanonikus potenciál segítségével levezetett eredményt, kiemelendő, hogy fermionikus természet miatt láthatóan érvényesül, hogy

$$p_{\text{kl}} < p_{\text{F}}, \quad (29)$$

vagyis fermion-gázok nyomása nagyobb, mint az azonos sűrűségű klasszikus gázé. Ezt a tendenciát szokás a kvantumgázok által kifejtett effektív taszításnak illetve effektív vonzásnak tulajdonítani.

4. Pauli-féle paramágneses szuszceptibilitás

Tekintsük a háromdimenziós (és nem relativisztikus) szabad elektrongázt külső B mágneses térben!

- Írjuk fel (z irányú mágneses teret feltételezve) a kétféle spinvetületű elektronok E_{\pm} energiáját!
 - Határozzuk meg adott hőmérséklet és kémiai potenciál mellett a kétféle spinvetületű elektronok N_{\pm} darabszámát!
 - Számoljuk ki az M átlagos mágnesezettséget!
 - Magas hőmérsékleten milyen a χ szuszceptibilitás hőmérsékletfüggése?
 - Mit mondhatunk ugyanerről alacsony hőmérsékleten?
- (a) A Pauli tag az egyrészesecske Hamilton operátorban:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{\mu_B B}{\hbar} \hat{S}_z, \quad (30)$$

ahonnan a korábbi ε energiák $\mp \frac{\mu_B B}{2}$ -vel fognak eltolódni, azaz $E_{\pm} = \varepsilon \mp \frac{\mu_B B}{2}$

- Most tekintsük a mágneses tér nélküli állapotsűrűséget, $\rho_0(\varepsilon)$, ami azt adja meg, hogy milyen sűrűn vannak az állapotok ε energia körül. Ha bekapcsoljuk a mágneses teret és eltoljuk az eredeti energiákat, akkor ennek megfelelően kell eltolnunk az állapotsűrűség argumentumát, $\rho_0(\varepsilon) \rightarrow \frac{1}{2} \rho_0(E_{\pm})$, ahol az $\frac{1}{2}$ faktor az eredetileg 2-szeres spin degeneráció felhasadása miatt jelent meg. Az adott fel és le spin állapotú elektronok számában ekkor az eltolt állapotsűrűség fog megjelenni, viszont a Fermi-függvényben továbbra is az eredeti, tér nélküli energiákat kell tekintenünk. Teljesen analóg módon megtehetjük azt is, hogy maradunk az eredeti állapotsűrűségnél, viszont ekkor cserébe a Fermi-függvényben kell eltolnunk a ‘másik irányba’ az energiákat, ami egyszerűen az előző felírásban csak egy integrál változó cserének felel meg. Ekkor

$$N_{\pm} = \int d\varepsilon \frac{1}{2} \rho_0(E_{\pm}) f(\varepsilon - \mu) \equiv \int d\varepsilon \frac{1}{2} \rho_0(\varepsilon) \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon \pm \mu_B B/2 - \mu)} + 1}, \quad (31)$$

ahol az utolsó eredmény úgy is értelmezhető, mint szabad elektronok egy effektív kémiai potenciál jelenlétében, $\mu_{\pm} = \mu \pm \mu_B B/2$. Bár jelenleg általános állapotsűrűséggel dolgozunk, háromdimenziós nemrelativisztikus elektronok esetén $\rho_0(\varepsilon) = 2 \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar}\right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon}$, ha $\varepsilon > 0$. Itt pontosan a gyökjel alatt lévő energiák fognak eltolódni E_{\pm} -el, illetve az eredetileg meglévő $g = 2$ spindegenerációs faktor is eltűnik, mivel spinfüggő lesz a Hamilton operátor!

- Az átlagos mágnesezettség sűrűség a korábban tanultak alapján:

$$M = -\mu_B \frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-}. \quad (32)$$

Eddig teljesen általánosan dolgoztunk, mostantól a korábban is felírt állapotsűrűséggel fogunk tovább dolgozni, $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$, illetve $\rho_0 = 2 \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar}\right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} \equiv A\sqrt{\varepsilon}$, ha $\varepsilon > 0$. Ekkor a következő adódik a számunkra releváns számlálóra a mágnesezettség kifejezésében:

$$N_+ - N_- = \frac{A}{2} \int_0^{\infty} d\varepsilon \sqrt{\varepsilon} \left(\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu_B B/2 - \mu)} + 1} - \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon + \mu_B B/2 - \mu)} + 1} \right) \quad (33)$$

- Most a magas hőmérsékletű limeszben, szokásos módon az $e^{\beta\mu} \ll 1$ kis paraméter segítségével $\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon \mp \mu_B B/2 - \mu)} + 1} \approx e^{-\beta(\varepsilon \mp \mu_B B/2 - \mu)}$, ahonnan a mágnesezettség egyszerűen

$$M = -\mu_B \tanh(\beta\mu_B B/2). \quad (34)$$

Erre az egyszerű eredmény úgy jutottunk el, hogy kihasználtuk, hogy a részecskeszámokban lévő integrál $N_{\pm} = A \int_0^{\infty} d\varepsilon \sqrt{\varepsilon} e^{-\beta(\varepsilon \mp \mu_B B/2 - \mu)} = A \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{\beta\mu} e^{\pm\beta\mu_B B/2}$ ugyanolyan konstansokat tartalmaz

mind a nevezőben, mind a számlálóban, amik így kiegyeszerűsödnek és csak az exponenciálisok maradnak meg. Ekkor a szuszceptibilitáshoz legegyszerűbben a $\tanh(x) = x + o(x^3)$ elsőrendű közelítéssel jutunk el,

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} \Big|_{B=0} = -\mu_B^2 B / 2\beta, \quad (35)$$

ami a Curie-szuszeptibilitás.

- (e) Az alacsony hőmérsékletű limeszben, ismét használjuk a Bethe-Sommerfeld sorfejtést, de most az effektív kémiai potenciálok nyelvén, azaz $\mu_{\pm} = \mu \pm \mu_B B/2$, vagyis a nulla hőmérsékletű eredmények éppen kiesnek

$$N_{\pm} \approx \frac{A}{2} \left(\int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \sqrt{\varepsilon} + \int_{\varepsilon_F}^{\mu_{\pm}} d\varepsilon \sqrt{\varepsilon} + \frac{\pi^2 (k_B T)^2}{6} \frac{1}{2\sqrt{\mu_{\pm}}} \right), \quad (36)$$

ahonnan a számláló a mágnesezettség kifejezésében

$$N_+ - N_- = \frac{A}{3} \left(\mu_+^{3/2} - \mu_-^{3/2} + \frac{\pi^2 (k_B T)^2}{8} (\mu_+^{-1/2} - \mu_-^{-1/2}) \right). \quad (37)$$

Most a szuszceptibilitás meghatározásához a fenti kifejezés vezetőrendbeli sorfejtésére van szükségünk a kisterű limeszben, ahol továbbra is $\mu_{\pm} = \mu \pm \mu_B B/2$:

$$N_+ - N_- \approx \frac{A}{6} \left(3\mu^{1/2} \mu_B - \frac{\pi^2 (k_B T)^2}{8\mu^{3/2}} \mu_B \right) B. \quad (38)$$

A mágnesezettség ekkor a következő:

$$M = -\frac{A\mu_B^2}{2N} \left(\frac{3\varepsilon_F^{1/2}}{2} B - \frac{\pi^2 (k_B T)^2}{12\varepsilon_F^{3/2}} \right) B, \quad (39)$$

ahol az utolsó lépésben átírhattunk minden μ kémiai potenciált a Fermi energiára, mivel a köztük lévő eltérés kicsi T -ben, $\mu_{\pm} - \varepsilon_F \sim (k_B T)^2$. Vagyis az alacsony hőmérsékletű szuszceptibilitás:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} \Big|_{B=0} = -\frac{A\mu_B^2}{2N} \left(\frac{3\varepsilon_F^{1/2}}{2} - \frac{\pi^2 (k_B T)^2}{12\varepsilon_F^{3/2}} \right). \quad (40)$$