# On the Diamagnetism of the Conduction Electrons in the Alkali Metals

Der

## EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN HOCHSCHULE IN ZÜRICH

zur Erlangung der Würde eines Doktors der Naturwissenschaften vorgelegte

#### **PROMOTIONSARBEIT**

von

#### ADRIAAN MARINUS DE GRAAF

dipl. Natuurkundig Ing., T. H. Delft niederländischer Staatsangehöriger

Referent: Herr Prof. Dr. M. Fierz

Korreferent: Herr P.-D. Dr. W. Baltensperger

Basel Buchdruckerei Birkhäuser AG. 1962

### On the Diamagnetism of the Conduction Electrons in the Alkali Metals

Summary. The field independent diamagnetic susceptibility of the conduction electrons in the alkali metals has been calculated. The method for determining the energy levels of Bloch electrons in a magnetic field, recently proposed by Y. YAFET, has been used. Special attention is paid to magnetic field induced band transitions. In the case of lithium an s-p band model is used, while sodium is represented by a p-s-p band model. The s bands are considered to be parabolic in both cases. The band interaction is included to all orders. Although a reasonable description of the susceptibility is obtained in this way, higher bands play an important role. KJeldars and Kohn in an earlier calculation considered all bands, but the band interaction up to fourth order only. It is shown that the band interaction of higher order cannot be neglected.

Zusammenfassung. Es wurde die feldunabhängige diamagnetische Suszeptibilität der Leitungselektronen in den Alkalimetallen berechnet. Zur Bestimmung der Energie-Niveaux der Bloch-Elektronen in einem Magnetfeld wurde die kürzlich von Y. Yafet vorgeschlagene Methode verwendet; spezielle Beachtung wurde den durch ein Magnetfeld induzierten Bandübergängen geschenkt. Für Lithium wurde ein s-p-Bänder-Modell benützt, während Natrium durch ein p-s-p-Bänder-Modell dargestellt wird; in beiden Fällen werden die s-Bänder parabolisch angenommen. Innerhalb dieser Voraussetzungen wird die Bandwechselwirkung exakt berücksichtigt. Obwohl man auf diese Weise eine zweckmässige Darstellung der Suszeptibilität erhält, müsste sie noch durch Hinzunahme weiterer Bänder ergänzt werden. Kjeldas und Kohn behandeln in einer früheren Rechnung alle Bänder. Sie berücksichtigen die Bandwechselwirkung jedoch nur bis zur vierten Ordnung. Es wird gezeigt, dass die höheren Ordnungen der Bandwechselwirkung nicht vernachlässigt werden dürfen.

#### 1. Introduction

Despite many attempts to explain the magnetic susceptibility of the alkali metals theoretically, there still remains a discrepancy between theory and experiment 1). If we assume that the conduction electrons and