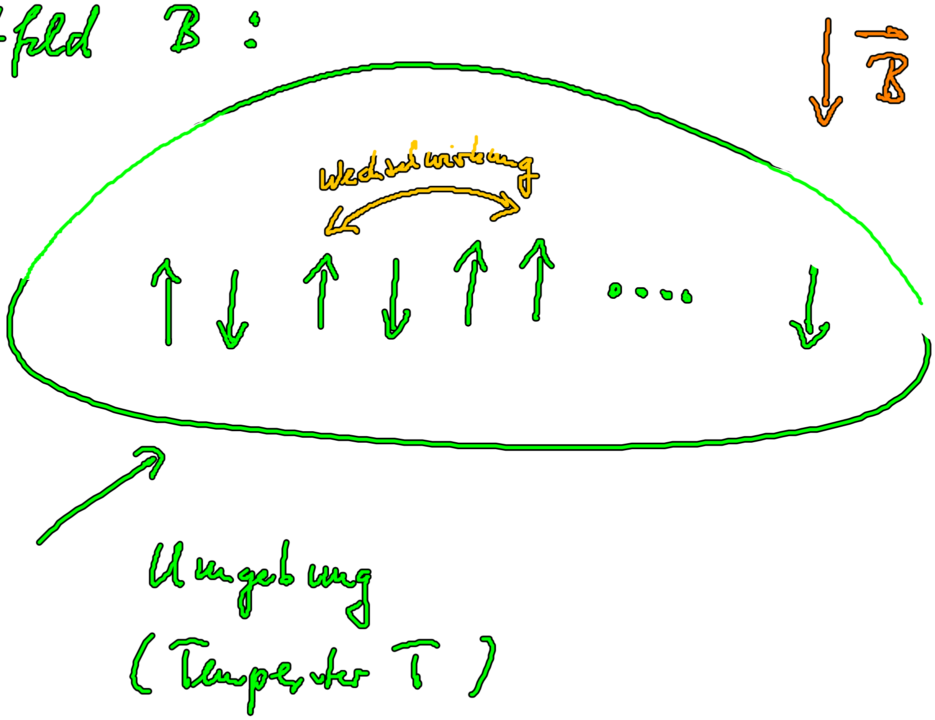
4.3 Para- und Ferromagnetismus

betrachten eine Ansammlung von Spins im externen Magnetfeld $\vec{B}$:



Magnetismus hervorgerufen durch:

- Bahndrehimpuls der Elektronen (Elektrodynamik)
- Spins der Elektronen (quantenmechanischer Beitrag)

reagieren auf magnetische Felder

hier nur Spins!

untersuchtes System zeigt Konkurrenz zwischen dem Ausrichteffekt d. Magnetfeld und dem Temperatureffekt der Umgebung, die die Spins versucht gleich zu verteilen.

nehmen $\vec{B} = B\hat{e}_z$ nur in z-Richtung

<u>Wann gutes Modell?</u> Bahndrehimpuls beitrag gering ($\ell = 0$ Zustände)

→ Magnetfelder koppeln nur an Spin an.

<u>Idee:</u> Magnetisierung als Funktion von T, B über Z_K (kanonisch), dazu brauchen wir H

H für ein Spin:

$\vec{S} \nearrow \swarrow \vec{B}$

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

magnetisch Moment ($\sim \vec{S}$)

Magnetfeld

(<u>analog</u>

$\vec{d} \nearrow \swarrow \vec{E}$

$$H_{el\text{-}dipol} = -\vec{d}\cdot\vec{E} \qquad)$$

aus Quantenmechanik: (Pauligleichung)

$$\vec{\mu} = g\,\mu_B\,\vec{S} \qquad \vec{S} = \text{Spinvektoroperator}$$

g: gyromagnetischer Faktor = 2

μ_B: Bohrsches Magneton

$$H = -g\,\mu_B\,B\,S_z$$

S_z: z-Komponente d. Spins

Magnetisierungsdichte berechnen:

$$\vec{M} \simeq \frac{1}{V}\langle\vec{\mu}\rangle \qquad \text{analog} \quad \vec{P} \simeq \frac{1}{V}\langle\vec{d}\rangle$$

V: Volumen

$\langle\vec{\mu}\rangle$: gesamtes Moment von allen Spins + quant + statist. Mittel

$$\sim \operatorname{sp}(\rho\, \mu_z)$$

$$= \operatorname{sp}\Big(\rho\; g \mu_B \sum_{\nu=1}^{N} S_z^{\nu}\Big)$$

Summe über alle Spins mit Index ν, Gesamtzahl N im Volumen V

statistischer Operator

bestimmt die Magnetisierung als Meßgröße

$$M \sim \frac{1}{Z_K} \operatorname{sp}\Big(e^{-\beta H}\, g \mu_B \sum_{\nu=1}^{N} S_z^{\nu}\Big)$$

$$= \frac{1}{Z_K B} \operatorname{sp}\Big(e^{-\beta H}\, g \mu_B \sum_{\nu=1}^{N} S_z^{\nu}\, B\Big)$$

$$= -\frac{1}{Z_K B} \operatorname{sp}\big(e^{-\beta H} H\big)$$

$$= \frac{1}{Z_K B}\, \partial_\beta \operatorname{sp}\big(e^{-\beta H}\big)$$

$$M = \frac{1}{V} \frac{1}{Z_K B}\, \partial_\beta Z_K$$

Magnetisierungsdichte kann sehr einfach über die Zustandssumme berechnet werden. M ist Quelle in den Maxwellgleichungen und wird hier mikroskopisch berechnet.

Z_K gesucht $\quad Z_K = sp\left(e^{-\beta H}\right)$

$$sp \mathrel{\hat{=}} \sum_n \langle n| \cdots |n\rangle$$

vollständiges System

vollständige System wählen über

$$S_z^\nu |m_s^\nu\rangle = m_s^\nu |m_s^\nu\rangle$$

$m_s = \pm \frac{1}{2}$

verwendet

$$Z_K = \sum_n e^{-\beta \varepsilon_n}$$

$$\varepsilon_n = \sum_{\nu=1}^{N} \varepsilon_\nu = -2\mu_B \sum_{\nu=1}^{N} m_s^\nu B$$

die mögl. E-Zustände sind durch die Ausrichtung der Spins bzgl. d. Felds gegeben:

1 Spin $\quad \varepsilon_1 \mathrel{\hat{=}} \uparrow \quad , \quad \varepsilon_2 \mathrel{\hat{=}} \downarrow$

N

$$Z_k = \sum_{\substack{\text{alle mögl.}\\ \{m_s^\nu\} \text{ anzunehmen}}} e^{+\beta 2\mu_B B \sum_{\nu=1} m_s^\nu}$$

$$= \sum_{\text{alle mögl.}} \left(e^{\beta 2\mu_B B m_s^1} \, e^{\beta 2\mu_B m_s^2} \cdots e^{\beta 2\mu_B m_s^N} \right)$$

$$= \sum_{m_s^1 = \pm\frac{1}{2}} \sum_{m_s^2 = \pm\frac{1}{2}} \cdots \sum_{m_s^N = \pm\frac{1}{2}} \Big(\qquad \Big)$$

N-Faktoren! identisch

$$= \left(\sum_{m_s^1 = \pm\frac{1}{2}} e^{\beta 2\mu_B B m_s^1} \right)^N$$

$$Z_k = \left[2 \cosh\left(\beta \mu_B B \right) \right]^N \qquad \cosh(x) = \frac{1}{2}\left(e^{x} + e^{-x}\right)$$

mit Z_k kann man M berechnet werden:

$$M \sim \frac{1}{B Z_k} \partial_\beta Z_k$$

$$= \frac{1}{\cancel{\beta} Z_k} N \left(2\cosh(\beta\mu_B B) \right)^{N-1} \cdot 2\mu_B \cancel{B} \sinh(\beta \mu_B B)$$

$$M = \frac{\mu_B N}{V} \tanh(\beta \mu_B B)$$

$$= \underbrace{\mu_B}_{\text{Magnetische WW Stärke}} \; \underbrace{n_0}_{\text{Dichte der Spins}} \; \tanh(\beta \mu_B B)$$

interessante Physik: Wechselspiel v. T und B

ist zu diskutieren

2 Fälle: nicht wechselwirkende Spins ↗↗↙ (4.3.1

wechselwirkende Spins ↗↙↗ 4.3.2.)

interne Kopplg. durch wechsel-seitige Magnetfelder aufgrund Spins

4.3.1. Spins im externen angelegten Magnetfeld

interessanter Übergangsbereich zwischen Magnetfeld dominiert und Temperatur dominiert?

typische Energie sind gleich groß:

$$kT = \mu_B B \longrightarrow$$ kritische Temperatur $$T_K = \frac{\mu_B B}{k}$$

kT: thermische Energie auf Spin

$\mu_B B$: externes Feld auf Spin

oberhalb dominiert der Unordnungseffekt durch Temperatur

unterhalb dominiert Magnetfeld (äußeres)

$$M = \mu_B n_0 \tanh(\beta \mu_B B)$$

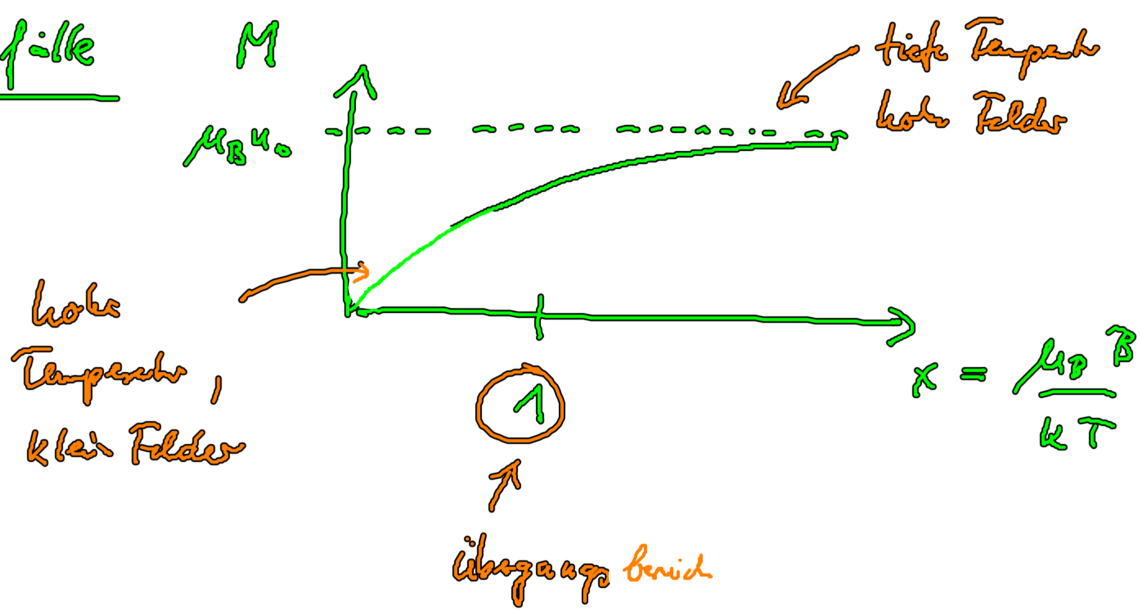
$$\beta \mu_B B = \frac{\mu_B B}{kT} = 1$$

für kritische Temperatur

$\rightarrow \tanh(x)$ für kleine x sind Hochtemperatureffekte dominant

für große x sind Niedrigtemperatureffekte — u —

2 Grenzfälle



Hochtemperaturfall:

$$\tanh x \approx x \,, \qquad M = \frac{\mu_B^2 n_0}{kT} B$$

dies entspricht paramagnetischem Verhalten:

$$M = \chi_m B$$

magnetische Suszeptibilität $\chi_m > 0$

→ dagegen nennt man diamagnetisches Verhalten $\chi_m < 0$, tritt auf bei Bahnmagnetismus (Lenz-Regel)

Tieftemperaturfall:

bekannter Grenzfall $\tanh x = 1$

Feld B ist so stark, daß alle Spins ausgerichtet werden

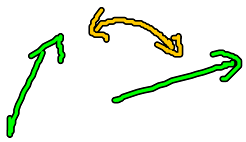
→ maximale Magnetisierung $n_0 \mu_B$

4.3.2. Innere Felder: Spin-Spin WW und Ferromagnetismus

unter Ferromagnetismus versteht man, daß bei Unterschreiten eine kritische Temperatur T_c spontan eine Magnetisierung auftritt, spontan $\hat{=}$ es gibt kein äußeres angelegtes Feld ($B=0$)

Idee: Spin-Spin-Wechselwirkung

→ werden wir in Hartree-Fock, mean field (mittleres Feld) Näherung beschreiben



Spins spüren die jeweiligen Felder der anderen Spins

Maxwell: jeder Spin (/ jedes M) ist auch Quelle eines Magnetfelds

$$B_{eff} = B + \alpha M$$

Gesamtmagnetfeld im Volumen

äußeres Feld

Proportionalitätskonstante (QM: Austauscheffekte)

$$M = \mu_B n_0 \tanh(\beta \mu_B B_{eff})$$

jetzt wirkt dieses effektive Feld auf die Spins n #

→ alles bleibt beim alten, $B \to B_{eff}$

$$\beta \mu_0 B_{eff} = \text{arcth}\left(\frac{M}{\mu_B n_0}\right) \approx \frac{M}{\mu_B n_0} + \frac{1}{3}\left(\frac{M}{\mu_B n_0}\right)^3$$

$B + \alpha M$

klein Magnetisierg.
(spontanes Entstehen!)

Taylorreihe

umstellen nach B

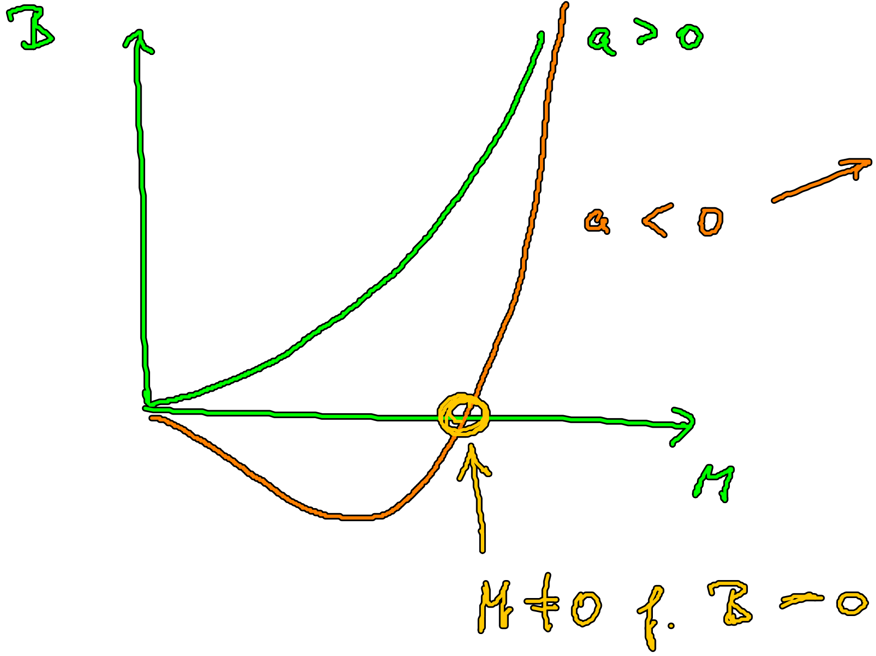
$$B = M\alpha\left(\frac{T}{T_c} - 1\right) + \frac{kT}{3\mu_B}\left(\frac{M}{\mu_B n_0}\right)^3$$

mit $T_c = \dfrac{\mu_B^2 n_0 \alpha}{k}$

T_c wird kritische Temperatur genannt

$$B = aM + bM^3$$

a kann in Abhängigkeit ein Kontrollparameter, hier T positiv od. negativ sein



wenn $T < T_c$ wird, kann ein $M \neq 0$ für $B = 0$ entstehen

Für verschwindendes äußeres Feld B kann eine Magnetisierung entstehen, wenn $T < T_c$, also $a < 0$ ist, ansonst gibt es nur die Lösung $M = 0$:

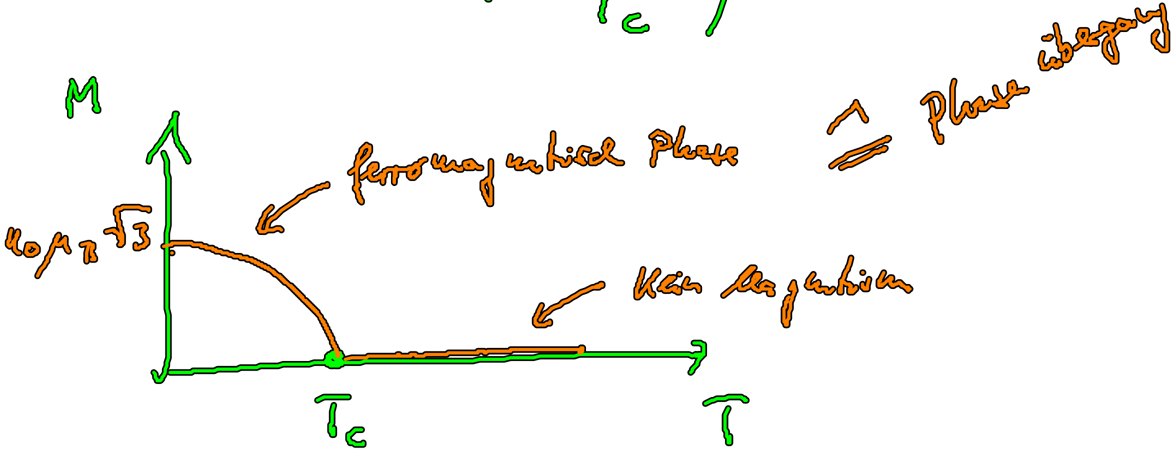
$$a M + b M^3 = B = 0$$

M wird auch Ordnungsparameter genannt, weil es die Ordnung (Ausrichtung Spins) im System mißt und zwar als Funktion des Kontrollparameters (hier T).

$M = M(T)$?

Umstellen * nach M f. $M \neq 0$ $(T < T_c)$

$$M = n_0 \mu_B \left(3 \frac{T_c - T}{T_c}\right)^{1/2}$$



Wurzelgesetz von Ordnungsparameter
als Fkt des Kontrollparameters ist sehr universell.

Qualitativ kann Ferromagnetismus erklärt werden.