# II.4. Spinsysteme

## II.4. a) Theorie nicht-wechselwirkender Spinsysteme

Betrachte Festkörper aus Atomen mit permanenten magnetischen Momenten $\underline{\mu}_i$ $(i = 1, \ldots, N)$

z.B. aus unaufgefüllten Elektronenschalen (3d-Schalen von Übergangsmetalle ...)

Ohne Wechselwirkungen gilt (quantenmechanisch)

externe Magnetfeld

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{N} \hat{\underline{\mu}}_i \cdot \underline{B}_0$$

Hamiltonoperator

Operator des magnetischen Moments

analog in der klassische Elektrodynamik.

- klass. elektrische Dipole im externen elektr. Feld

  Energie: $W^{el} = -\underline{p}_i \cdot \underline{E}_0$

- klass. magnet. Dipole im externen Magnetfeld

  Energie: $W^{mag} = -\underline{m}_i \cdot \underline{B}_0$

quantenmechanisch:

$$\hat{\mu}_i = - g/\hbar \, \mu_B \, \underline{\hat{J}}_i$$

Bohr'sches Magneton

Gesamt-Drehimpulsoperator

Landé-Faktor

Minuszeichen, da negative Ladung angenommen wurde! (Elektronen)

## Kanonische Zustandssumme

(siehe z.B. Nolting, Schwabl)

$$Z_N = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta \hat{H}}$$

Spur

N = const!

V = const!

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{N} \hat{\mu}_i \cdot \underline{B}_0 = \sum_{i=1}^{N} \hat{h}_i$$

mit

$$\hat{h}_i = -\hat{\mu}_i \cdot \underline{B}_0 = g/\hbar \, \mu_B \underline{\hat{J}}_i \cdot \underline{B}_0$$

$$= \mathrm{Tr}\, e^{-\beta \sum_{i=1}^{N} \hat{h}_i}$$

Einteilchen-hamiltonian

Auswertung in den Eigenzuständen von $\hat{H}$

d.h. " " der $\hat{h}_i$

– das sind gerade die Drehimpulseigenzustände!

z.B. $\underline{B}_0 = B_0 \hat{e}_z$

$$\Rightarrow \hat{h}_i = g/\hbar \, \mu_B \, \hat{J}_{i,z} B_0$$

benutze: $\hat{J}_{i,z} |J_i, m_i\rangle = \hbar m_i |J_i, m_i\rangle$

$m_i = -J_i, \dots, J_i$

Eigenwertproblem von $\hat{J}_{i,z}$

Richtungsquantelung!

$\rightarrow \hat{h}_i \, |J_i, m_i\rangle = \varepsilon_i \, |J_i, m_i\rangle \; ; \quad \varepsilon_i = g/\hbar \, \mu_B \, \hbar m_i B_0$

zurück zur Zustandssumme:

$$Z_N = \sum_{m_1=-J_1}^{J_1} \sum_{m_2=-J_2}^{J_2} \dots \sum_{m_N=-J_N}^{J_N} \underbrace{e^{-\beta \tilde{B}_0 \sum_{i=1}^{N} m_i}}$$

Faktorisierung!

mit $\tilde{B}_0 = g \mu_B B_0$

$$= \prod_{i=1}^{N} \left( \sum_{m_i=-J_i}^{J_i} e^{-\beta \tilde{B}_0 m_i} \right)$$

Annahme: Alle Teilchen gleich!

$$Z_N = \left( \sum_{m=-J}^{J} e^{-\beta \tilde{B}_0 m} \right)^N$$

Faktorisierung!

$$= \dots = \left( \frac{\sinh\left(\beta \tilde{B}_0 (J + \frac{1}{2})\right)}{\sinh\left(\beta \tilde{B}_0 / 2\right)} \right)^N$$

## Resultierende ~~Mag~~ Magnetisierung des Paramagneten

$$\underline{M}(\tilde{B}_0, T) = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \hat{\mu}_i \right\rangle$$

← kanonische Mittelwert

magnet. Moment

mit $\langle \dots \rangle = \frac{1}{Z_N} \mathrm{Tr} \dots e^{-\beta \hat{H}}$

Annahme: $\underline{B}_0 = B_0 \hat{\underline{e}}_z \quad \Longrightarrow \quad \underline{M} = M \hat{\underline{e}}_z$

$$M = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \hat{\mu}_{i,z} \right\rangle = -\frac{g}{\hbar} \mu_B \left\langle \sum_{i=1}^{N} \hat{J}_{i,z} \right\rangle$$

Benutze:

$$\left\langle \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{J}_{i,z}}{\hbar} \right\rangle = \frac{1}{Z_K} \mathrm{Tr}\left( \left( \sum_{i=1}^{N} \frac{J_{i,z}}{\hbar} \right) e^{-\beta \hat{H}} \right)$$

$$= \frac{1}{Z_K} \sum_{\{m\}} \left( \sum_{i=1}^{N} m_i \right) e^{-\beta \tilde{B}_0 \sum_{i=1}^{N} m_i}$$

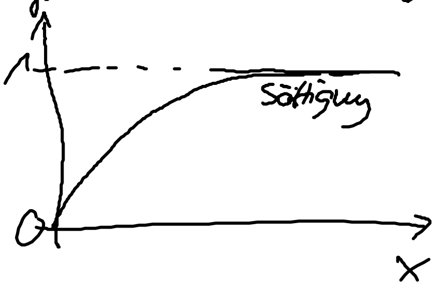
$$= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \tilde{B}_0} \ln Z_K$$

$$\Longrightarrow \quad M(\tilde{B}_0, T) = \frac{g \mu_B}{\beta} \frac{\partial}{\partial \tilde{B}_0} \ln Z_K$$

Einsetzen von $Z_K$

$$\Longrightarrow \quad \boxed{M(B_0, T) = N g \mu_B J \, B_J(x)}$$

generelles Verhalten von $B_J(x)$




mit $x = \beta g \mu_B J B_0$

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

„Brillouin-Funktion"

Bemerkungen

a) speziell $J = \frac{1}{2}$ ($\Rightarrow m = \pm\frac{1}{2}$, d.h. 2 Einstellmöglichkeiten)

$$B_{\frac{1}{2}}(x) = 2\coth(2x) - \coth x$$
$$= \tanh x \qquad \Rightarrow \text{Ising-Modell!}$$

b) $J \to \infty$ „klassischer Grenzfall"

$$B_{J\to\infty}(x) = L(x) \qquad \text{Langevin-Funktion}$$
$$= \coth x - \frac{1}{x}$$

wichtig für elektr. Dipole im Feld bzw. klassische magnet. Dipole im Feld.

s.a. Übung

c) Betrachte Grenzfall $B_0 \to 0$ (d.h. $x \to 0$)

man findet: $\lim_{x\to 0} B_J(x) = 0$ ! unabhängig von $J$ !

Interpretation: Es gibt keine „spontane" Magnetisierung!

Beachte: $x \to 0$ kann auch bedeuten, daß bei festem $B_0$ die Temperatur gegen unendlich geht: $\beta = \frac{1}{k_B T} \to 0$

Verschwinden der Magnetisierung bei $T \to \infty$ ist sinnvoll, da dann die Entropie dominiert!

## II.4.b) Wechselwirkende Ferromagneten: Molekularfeldtheorie

Ausgangspunkt:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i} J_{ij}\, \underline{\hat{J}}_i \cdot \underline{\hat{J}}_j + \underbrace{\frac{g}{\hbar}\mu_B \sum_{i=1}^{N} \underline{\hat{J}}_i \cdot \underline{B}_0}_{\text{paramagnet. Anteil} \to \text{bereits diskutiert!}}$$

mit $J_{ij}$: Kopplungsmatrix

typische Eigenschaften: $J_{ij} = J_{ji}$ Symmetrie

$J_{ii} = 0$

$$J_{ij} \begin{cases} > 0 & \text{: ferromagnet. Wechselwirkung} \to \text{favorisiert Parallelstellung} \\ < 0 & \text{: antiferromagnet. Wechselwirkung} \end{cases}$$

Zur Dimension der Drehimpulse

$n = 3$: $\underline{\hat{J}}_i \cdot \underline{\hat{J}}_j = \hat{J}_{i,x} \cdot \hat{J}_{j,x} + \hat{J}_{i,y} \cdot \hat{J}_{j,y} + \hat{J}_{i,z} \cdot \hat{J}_{j,z}$

„Heisenbergmodell"

$n=2: \quad \hat{\underline{J}}_i \cdot \hat{\underline{J}}_j = \hat{J}_{i,x} \cdot \hat{J}_{j,x} + \hat{J}_{i,y} \cdot \hat{J}_{j,y}$ „XY-Modell"

$n=1: \quad \hat{\underline{J}}_i \cdot \hat{\underline{J}}_j = \hat{J}_{i,z} \cdot \hat{J}_{j,z}$ „Ising-Modell"

Gerade für das Ising-Modell benutzt man häufig eine klassische Schreibweise für den Hamiltonian:

$$J = \frac{1}{2} \Rightarrow m = \pm\frac{1}{2} \quad \text{(2 Einstellmöglichkeiten)}$$

führe Spinvariable ein: $S = \pm 1$

$$\Rightarrow H = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i} J_{ij} S_i S_j - h_0 \sum_{i=1}^{N} S_i$$

klass. Hamiltonfunktion.

Quantenmechanische ~~Bezug~~ (d.h. Richtungsquantelung) steckt in der Tatsache, daß $S_i$ nur die Werte +1 oder −1 annehmen kann!

Beachte:
Im Bereich des Magnetismus ist das Ising-Modell nur dann physikalisch sinnvoll, wenn die magnetische Momente auf eine bestimmte Raumrichtung fixiert sind (etwa durch Kristallanisotropie)

aber: Darüber hinaus hat das Ising-Modell weiten Anwendungen

- Gittergas, binäre Mischungen
- Wachstumsmodelle
- Neuronale Netze
- Spingläser
- Wichtigstes „Demonstrationsmodell" der Statistische Physik, insbesondere auch im Hinblick auf Phasenübergänge!

Molekularfeldnäherung („Meanfield-Näherung)
des Modell-Ferromagneten

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\sum_i \sum_{j \neq i} J_{ij}\, \hat{\underline{J}}_i \cdot \hat{\underline{J}}_j + \frac{g}{\hbar}\mu_B \sum_i \hat{\underline{J}}_i \cdot \underline{B}_0$$

Umschreiben des Terms mit dem Skalarprodukt:

$$\hat{\underline{J}}_i = \langle \hat{\underline{J}}_i \rangle + \delta \hat{\underline{J}}_i$$

$$\hat{\underline{J}}_j = \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle + \delta \hat{\underline{J}}_j$$

$$\Rightarrow \hat{\underline{J}}_i \cdot \hat{\underline{J}}_j = \langle \hat{\underline{J}}_i \rangle \cdot \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle + \langle \hat{\underline{J}}_i \rangle \delta \hat{\underline{J}}_j + \delta \hat{\underline{J}}_i \cdot \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle + \delta \hat{\underline{J}}_i \cdot \delta \hat{\underline{J}}_j$$

Annahme: Abweichungen der $\hat{\underline{J}}_i$'s von den jeweiligen Mittelwerten sind klein!

$\Longrightarrow$ nehme nur Terme 1. Ordnung in $\delta J$ mit! (Linearisierung)

$\Longrightarrow$ Vernachlässige den Term

$$\delta\hat{\underline{J}}_i \cdot \delta\hat{\underline{J}}_j = \left(\hat{\underline{J}}_i - \langle\hat{\underline{J}}_i\rangle\right)\cdot\left(\hat{\underline{J}}_j - \langle\hat{\underline{J}}_j\rangle\right)$$

d.h. Vernachlässigung von Fluktuationen bzw. Korrelationen!

$\Longrightarrow$ „Meanfield"-Hamilton:

$$\hat{H}^{MF} = -\frac{1}{2}\sum_i\sum_{j\neq i} J_{ij}\,\langle\hat{\underline{J}}_i\rangle\cdot\delta\hat{\underline{J}}_j - \frac{1}{2}\sum_i\sum_{j\neq i} J_{ij}\,\delta\hat{\underline{J}}_i\cdot\langle\hat{\underline{J}}_j\rangle$$

$$-\frac{1}{2}\sum_i\sum_{j\neq i}\langle\hat{\underline{J}}_i\rangle\cdot\langle\hat{\underline{J}}_j\rangle + \underbrace{\frac{g}{\hbar}\mu_B\sum_i\hat{\underline{J}}_i\cdot\underline{B}_0}_{\text{paramagnet. Anteil}}$$

benutze noch:
die ersten beiden Terme in $\hat{H}^{MF}$
ergeben dasselbe, da $J_{ij} = J_{ji}$

$$\Longrightarrow \hat{H}^{MF} = -\sum_i\sum_{j\neq i} J_{ij}\,\underbrace{\delta\hat{\underline{J}}_i}_{\hat{\underline{J}}_i-\langle\hat{\underline{J}}_i\rangle}\cdot\langle\hat{\underline{J}}_j\rangle - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i} J_{ij}\,\langle\hat{\underline{J}}_i\rangle\langle\hat{\underline{J}}_j\rangle$$

$$+\frac{g\mu_B}{\hbar}\sum_i\hat{\underline{J}}_i\cdot\underline{B}_0$$

$$= -\sum_i \sum_{j\neq i} J_{ij}\, \hat{\underline{J}}_i \cdot \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j\neq i} J_{ij} \langle \hat{\underline{J}}_i \rangle \cdot \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle}_{\text{Konstante, ergibt nur Energieverschiebung} \to \text{wird weggelassen!}}$$

$$+ \frac{g\mu_B}{\hbar} \sum_i \hat{\underline{J}}_i \cdot \underline{B}_0$$

$$\hat{H}^{MF} = -\sum_{i=1}^{N} \sum_{j\neq i} J_{ij}\, \hat{\underline{J}}_i \cdot \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle$$

$$+ \frac{g\mu_B}{\hbar} \sum_{i=1}^{N} \hat{\underline{J}}_i \cdot \underline{B}_0$$

Definiere nun das sogenannte effektive Feld, das auf Teilchen $i$ wirkt.

$$\underline{B}_i^{eff} = \underbrace{-\frac{\hbar}{g\mu_B} \sum_{j=1}^{N} J_{ij} \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle}_{\text{„Mean field"}} + \underbrace{\underline{B}_0}_{\text{externes Feld}}$$

$\boxed{J_{ii} = 0}$

$$\Rightarrow \hat{H}^{MF} = \frac{g\mu_B}{\hbar} \sum_{i=1}^{N} \hat{\underline{J}}_i \cdot \underline{B}_i^{eff}$$

$$= -\sum_{i=1}^{N} \hat{\mu}_i \cdot \underline{B}_i^{eff}$$