

II.4. Spinsysteme

II.4. a) Theorie nicht-wechselwirkende Spinsysteme

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

z.B. aus unaufgeschalteten
Elektronenschalen
(3d-Shell von Übergangsmetalle
...)

Ohne Wechselwirkungen gilt (quantenmechanisch)

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

Hamiltonoperator

← externes Magnetfeld

↑ Operatoren des magnetischen Moments

Analog in der klassischen Elektrodynamik.

- klass. elektrische Dipole im externen elektr. Feld

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

- klass. magnet. Dipole im externen Magnetfeld

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

Quantenmechanisch:

$$\hat{\mu}_i = -\frac{g}{4\pi} \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{J}_i$$

Bohr'sche Magneton
Landé-Faktor
Gesamt-Drehimpulsoperator

Minuszeichen, da negative Ladung asymmetrisch wurde!
(Elektronen)

Kanonische Zustands-Summe

(siehe z.B. Nolting, S. 111)

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

↑
Spur

$N = \text{const}!$
 $V = \text{const}!$

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

↑
Einteilchenhamiltonian

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

Auswertung in den Eigenzuständen von \hat{H}
d.h. " " " " " " den \hat{h}_i

mit

$$\hat{h}_i = -\hat{\mu}_i \cdot \underline{B}$$
$$= \frac{g}{4\pi} \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{J}_i \cdot \underline{B}$$

- das sind gerade die Drehimpuls-Eigenzustände!

z.B. $\underline{B}_0 = B_0 \hat{e}_z$
 $\Rightarrow \hat{h}_i = \frac{g}{4\pi} \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{J}_{i,z} B_0$

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

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

$$m_i = -J_i, \dots, J_i$$

Richtungsquantelung!

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

zurück zur Zustandssumme:

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

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

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

Faktorisierung!

Annahme: Alle Teilchen gleich!

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

Faktorisierung!

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

Resultierende ~~H~~ Magnetisierung des Paramagneten

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

↑
magn. Moment

← kanonische Mittelwert

mit $\langle \dots \rangle = \frac{1}{Z_H} \dots e^{-\beta H}$

Annahme: $\vec{B}_0 = B_0 \hat{e}_z \Rightarrow \underline{M} = M \hat{e}_z$
 $M = \langle \sum_{i=1}^N \hat{\mu}_{i0e} \rangle = -\frac{g}{4} \mu_B \langle \sum_{i=1}^N \hat{J}_{iz} \rangle$

Benutze:

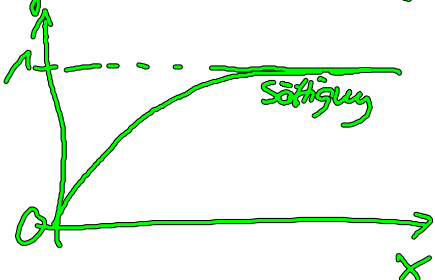
$$\begin{aligned} \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{\hat{J}_{iz}}{\hbar} \right\rangle &= \frac{1}{Z_H} \text{Tr} \left(\left(\sum_{i=1}^N \frac{J_{iz}}{\hbar} \right) e^{-\beta H} \right) \\ &= \frac{1}{Z_H} \sum_{\{m_j\}} \left(\sum_{i=1}^N m_i \right) e^{-\beta B_0 \sum_{i=1}^N m_i} \\ &= -\frac{1}{\mu} \frac{\partial}{\partial \tilde{B}_0} \ln Z_H \end{aligned}$$

$$\Rightarrow M(\tilde{B}_0, T) = \frac{g \mu_B}{\mu} \frac{\partial}{\partial \tilde{B}_0} \ln Z_H$$

Einstsetzen von Z_H

$$\Rightarrow M(\tilde{B}_0, T) = N g \mu_B J B_J(x)$$

generelles Verhalten von $B_J(x)$



mit $x = (\mu g \mu_B J B_0)$

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) bzw

$$B_{\frac{1}{2}}(x) = 2 \operatorname{Coth}(2x) - \operatorname{Coth} x \\ = \operatorname{tanh} x \quad \Rightarrow \text{Kerr-Modell!}$$

b) $J \rightarrow \infty$ „klassischer Grenzfall“

$$B_{J \rightarrow \infty}(\lambda) = L(\lambda) \quad \text{Langevin-Funktion}$$

$$= \operatorname{Coth} x - \frac{1}{x}$$

s.a. Übung

wichtig für elektr. Dipole
im Feld bzw. klassischer
magnet. Dipole im Feld:

c) Betrachtet Grenzfall $B_0 \rightarrow 0$ (d.h. $x \rightarrow 0$)

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

Interpretation: Es gibt keine „spontane“ Magnetisierung!

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

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

II. 4. b) Wechselwirkende Ferromagneten: Molekularfeldtheorie

Ausgangspunkt:

$$\hat{H} = - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} J_{ij} \hat{J}_i \cdot \hat{J}_j + \frac{g \mu_B}{\hbar} \sum_{i=1}^N \hat{J}_i \cdot B_0$$

paramagnet. Anteil
 \rightarrow bereits diskutiert:

mit J_{ij} : Kopplungsmatrix

typische Eigenschaften:

$$J_{ij} = J_{ji} \quad \text{Symmetrie}$$

$$J_{ii} = 0$$

$$J_{ij} \begin{cases} > 0 & \text{: ferromagn. Wechselwirkung} \\ & \rightarrow \text{favorisiert Parallelstellung} \\ < 0 & \text{: antiferromagn. Wechselwirkung} \end{cases}$$

Zur Dimension der Drehimpulse

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

„Heisenbergmodell“

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

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

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

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

für die Spinvariable s_i : $s_i = \pm 1$

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

Klass. Hamiltonfunktion.

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

Beacht:

Im Bereich des Magnetismus ist das

Ising-Modell nur dann physikalisch sinnvoll,

wenn die magnetischen Momente auf eine bestimmte

Raumrichtung fixiert sind (etwa durch Kristallanisotropie)

aber: Darüber hinaus hat das Ising-Modell weitere Anwendungen

- Gittergas, binäre Mischungen
- Wachstumsmodelle
- Neuronale Netze
- Spindler
- Wichtigstes „Demonstrationsmodell“ der Festkörperl-Physik, insbesondere auch im Hinblick auf Phasenübergänge!

Molekularfeldnäherung (, Meanfield-Näherung)
des Modell-Isingmagneten

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

Umschreiben des Terms mit dem Skalarprodukt:

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

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

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

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

\Rightarrow nehme nur Terme 1. Ordnung
in $\delta \underline{J}$ mit! (Linearisierung)

⇒ vernachlässige den Term

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

d.h. Vernachlässigung von Fluktuationen,
bzw. Kondensaten!

"Meanfield" -
⇒ Hamiltonian:

$$\begin{aligned} \hat{H}^{MF} = & -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} J_{ij} \langle \underline{\hat{J}}_j \rangle \cdot \delta \underline{\hat{J}}_i - \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} J_{ij} \delta \underline{\hat{J}}_i \cdot \langle \underline{\hat{J}}_j \rangle \\ & - \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \langle \underline{\hat{J}}_i \rangle \cdot \langle \underline{\hat{J}}_j \rangle + \underbrace{\frac{g}{\mu_B} \sum_i \underline{\hat{J}}_i \cdot \underline{B}_0}_{\text{paramagnet. Anteil}} \end{aligned}$$

benutze noch:

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

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{H}^{MF} = & - \sum_i \sum_{j \neq i} J_{ij} \underbrace{\delta \underline{\hat{J}}_i \cdot \langle \underline{\hat{J}}_j \rangle}_{\underline{\hat{J}}_i - \langle \underline{\hat{J}}_i \rangle} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} J_{ij} \langle \underline{\hat{J}}_i \times \underline{\hat{J}}_j \rangle \\ & + \frac{g}{\mu_B} \sum_i \underline{\hat{J}}_i \cdot \underline{B}_0 \end{aligned}$$

$$= - \sum_i \sum_{j \neq i} J_{ij} \hat{J}_i \langle \hat{J}_j \rangle + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} J_{ij} \langle \hat{J}_i \rangle \cdot \langle \hat{J}_j \rangle$$

Konstant, ergibt nur
 Energieverschiebung
 \rightarrow wird weglassen!
 $\frac{1}{2}$

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

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

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

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

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

\uparrow
 externes Feld

$J_{ii} = 0$

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

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