II. Wechselwirkende Spinsysteme

II. 1. Theorie nicht wechselwirkender Spinsysteme

Betrachte Festkörper aus Atome mit permanenten magnetischen Momenten $\underline{\mu}_i$ (zugehöriger Operator $\hat{\underline{\mu}}_i$)

aus nicht aufgefüllten Elektronenschale
z.B. 3d Schale von Übergangsmetalle
4f " von seltenen Erde

Ohne Wechselwirkung gilt:

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

äußeres Magnetfeld

d.h. magnetischen Momente versuchen, sich parallel zum Feld $\underline{B}_0$ auszurichten

beachte: $\hat{\underline{\mu}}_i = -\frac{g}{\hbar}\mu_B \hat{\underline{J}}_i$ (Gesamt-) Drehimpulsoperator

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

Einteilchen-Hamiltonian

Ziel nun: Auswertung der Zustandssumme (kanonisch)

d.h. T, N konstant

$$Z_K = \overset{\text{Trace (Spur)}}{\mathrm{Tr}}\, e^{-\beta \hat{H}} \qquad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

K – kanonisch

Idee: Auswertung in den Eigenzuständen von $\hat{h}_i$ (und damit $\hat{H}$)

z.B. $\underline{B}_0 = B_0 \underbrace{\hat{e}_z}_{\text{Einheitsvektor}} \Longrightarrow \hat{h}_i = \frac{g}{\hbar} \mu_B \hat{J}_{i,z} B_0$

es gilt: $\hat{h}_i |j_i, m_i\rangle = \varepsilon_i |j_i, m_i\rangle$

mit $\varepsilon_i = \frac{g}{\hbar} \mu_B \hbar m_i B_0$

Eigenzustände und Eigenwerte sind bekannt!

(benutzt: $\hat{J}_{i,z} |j_i, m_i\rangle = \hbar m_i |j_i, m_i\rangle$)

$m_i = -J, \ldots, J$

Zustandssumme:

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

$$= \sum_{m_1=-J}^{J} \sum_{m_2=-J}^{J} \cdots \sum_{m_N=-J}^{J} e^{-\beta \tilde{B}_0 \sum_{i=1}^{N} m_i}$$

$$= \prod_{i=1}^{N} \underbrace{\left(\sum_{m=-J}^{J} e^{-\beta \tilde{B}_0 m} \right)}_{\text{unabhängig von } i\text{, da Magnetfeld homogen}}$$

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

Faktorisierung!!

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

$$= \left(e^{\beta \tilde{B}_0 J} + e^{\beta \tilde{B}_0 (J-1)} + \ldots + e^{-\beta \tilde{B}_0 J} \right)^N$$

$$= \left(e^{-\beta \tilde{B}_0 J} \left(e^{\beta \tilde{B}_0 2J} + e^{\beta \tilde{B}_0 (2J-1)} + \ldots + 1 \right) \right)^N$$

$$= \left(e^{-\beta \tilde{B}_0 J} \sum_{k=0}^{2J} \underbrace{e^{\beta \tilde{B}_0 k}}_{\left(e^{\beta \tilde{B}_0}\right)^k} \right)^N$$

benutze Ausdruck für geometr. Reihe

$$\sum_{k=0}^{n} a_0 q^k = a_0 \frac{1-q^{n+1}}{1-q} \quad \text{für } q \neq 1$$

hier: $a_0 = 1$, $q = e^{\beta \tilde{B}_0}$

$$\Rightarrow Z_K = \left(e^{-\beta \tilde{B}_0 J} \left(\frac{1 - \left(e^{\beta \tilde{B}_0}\right)^{2J+1}}{1 - e^{\beta \tilde{B}_0}} \right) \right)^N$$

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

$$\sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

Resultierende Magnetisierung

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

kanonischer Mittelwert

magnetische Momente

Feld in z-Richtung

$\Rightarrow$ $\underline{M}$ in z-Richtung, da über therm. Fluktuation gemittelt wird!
(und $\langle \underline{\mu}_i \rangle$ in z-Richtung)

$\Rightarrow$ betrachte

$$M(T, \tilde{B}_0) \equiv M_z(T, \tilde{B}_0)$$

$$= \langle \sum_{i=1}^{N} (\hat{\underline{\mu}}_i)_z \rangle$$

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

und

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

alle Teilchen!

$$= \ldots = \frac{1}{Z_K} \sum_{m_1=-J}^{J} \ldots \sum_{m_N=-J}^{J} \left(\sum_{i=1}^{N} m_i \right) e^{-\beta \tilde{B}_0 \sum_{i=1}^{N} m_i}$$

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

!

Setze Ausdruck für Z_K ein

$$\Rightarrow M = N \cdot g \cdot \mu_B \left(\coth\left(\beta \tilde{B}_0 \left(J+\frac{1}{2}\right)\right) \cdot \left(J+\frac{1}{2}\right) - \coth\left(\frac{\beta \tilde{B}_0}{2}\right) \cdot \frac{1}{2} \right)$$

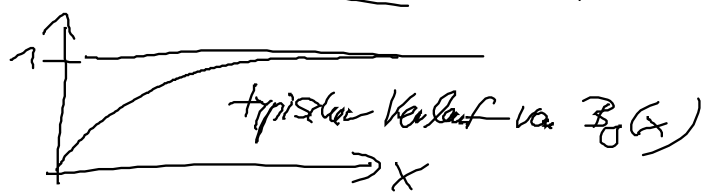
mit $\tilde{B}_0 = g \mu_B B_0$

definieren jetzt die sogenannte Brillouin-Funktion:

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

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

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



Bemerkungen:

- M ist extensiv (wächst linear in N) aufgrund unserer Def. von M als Summe über Einteilchenmittelwerte

- Spezialfall $J = \frac{1}{2}$

  (d.h. $m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$)

  μ_i hat zwei Einstellmöglichkeiten relativ zum Feld!

$$B_J(x) = 2\coth(2x) - \coth x$$
$$= \tanh x$$

$\Rightarrow$ führt auf Ising-Modell

• "klassischer Grenzfall"

$\Leftrightarrow J \to \infty$ ~~man~~ Spin hat quasi unendlich viele Einstellmöglichkeiten!
$\Leftrightarrow$ keine Richtungsquantelung

beachte: $\frac{2J+1}{2J} \xrightarrow[J\to\infty]{} 1$

$$\frac{1}{2J}\coth\left(\frac{x}{2J}\right) \to \frac{1}{\cancel{2J}}\frac{\cancel{2J}}{x} = \frac{1}{x}$$

Taylorentwicklung des coth

$$\coth x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45} + O(x^5)$$
$x \to 0$

$$\Rightarrow B_J(x) \xrightarrow[J\to\infty]{} L(x) = \coth x - \frac{1}{x}$$

"Langevin-Funktion"

wichtig z.B. bei der Behandlung klass. elektrischer Dipole im elektr. Feld

$$H_i = -\underline{p}_i \cdot \underline{E}_0$$

„Orientierungspolarisation"

- Erinnerung: $M \sim B_J(x)$ und $x = \beta g \mu_B J B_0$

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

Betrachte Grenzfall $B_0 \to 0$

benutze wieder Taylorentw. des coth

$$B_J(x) = \frac{J+1}{3J}x - \frac{J+1}{3J}\left(\frac{2J^2+2J+1}{30J^2}\right)x^3 + O(x^5)$$

$$\lim_{x\to 0} B_J(x) = 0$$

Es gibt keine Magnetisierung für $B_0 \to 0$
$\Leftrightarrow$ keine spontane Magnetisierung!!

- Dasselbe erhält man für $T \to \infty$

$$M(T, \tilde{B}_0) = N\, g\mu_B J\, \frac{J+1}{3J}\left(\beta g \mu_B J B_0\right)$$

(in führender Ordnung)

$$= \frac{C}{T} B_0$$

mit $C = N (g\mu_B)^2 \frac{J(J+1)}{3k_B}$

Resultat vernünftig, da für hohe Temperatur (dass $M \to 0$ für $T \to \infty$) Fluktuationen dominieren

Suszeptibilität: $\chi = \frac{\partial M}{\partial B_0}\Big|_T = \frac{C}{T}$ Curie-Gesetz

II.2 Wechselwirkungen und Molekularfeldnäherung

Ausgangspunkt:

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

J_{ij} : Kopplungsmatrix

Austauschkopplung, Austauschintegral, ...

Begründung aus der Quantenmechanik
(Austauschantisymmetrie der Fermionen!!)

Eigenschaften:

$J_{ij} = J_{ji}$ Symmetrie

$J_{ii} = 0$

$J_{ij} \begin{cases} > 0 & \text{ferromagnet. Wechselwirkung} \\ & \text{d.h. Parallelstellung ist bevorzugt!} \\ < 0 & \text{antiferromagnet. Wechselwirkung} \end{cases}$

Zur Dimension der Drehimpulse bzw. μ_i

$$d=3 \Rightarrow \hat{\underline{J}}_i \cdot \hat{\underline{J}}_j = \hat{J}_{ix}\hat{J}_{jx} + \hat{J}_{iy}\hat{J}_{jy} + \hat{J}_{iz}\hat{J}_{jz}$$

„Heisenbergmodelle"

$d=2 \Rightarrow \hat{\underline{J}}_i \cdot \hat{\underline{J}}_j = \hat{J}_{ix}\hat{J}_{jx} + \hat{J}_{iy}\hat{J}_{jy}$ "XY-Modell"

$d=1 \Rightarrow \hat{\underline{J}}_i \cdot \hat{\underline{J}}_j = \hat{J}_{iz}\hat{J}_{jz}$ "Ising Modell"

(Verallgemeinerung: Pottsmodelle)

Die $d>1$ Modelle gibt es in quantenmechanischer oder klassischer Variante!

qm: Einstellmöglichkeiten diskretisiert
klass: kontinuierl. Rotation möglich beim XY ~~...~~ und Heisenbergmodell

Für den Fall $d=1$ benutzt man häufig auch klass. Schreibweise

z.B. $J=\frac{1}{2} \Rightarrow J_{iz}$ kann zwei Werte annehmen
$\Rightarrow m_i = \pm\frac{1}{2}$

führt Spinvariable $s = \pm 1$

$$\Rightarrow H = -\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i} J_{ij} s_i s_j - \mu B_0 \sum_i s_i$$

semi-klass.

Dieses Modell ist wichtig zum einen im Bereich des Magnetismus (aber nur, wenn die magnet. Momente auf best. Raumrichtungen fixiert sind) aber auch Demonstrationsmodell in der Statist. Physik!

(exakte Lösung in 1D möglich,
relevant für ganz andere System z.B. Neuronale Netze,
binäre Mischungen, ...)

Im allgemeinen können die Zustandssumme nicht exakt ausgewertet werden! ⇒ Näherungen

Molekularfeldnäherung für magnet. Modellsysteme

(einfachste Begründung)

betrachte das Produkt $\hat{\underline{J}}_i \cdot \hat{\underline{J}}_j$ im Hamiltonian (für allgemeine System)

Umschreiben:

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

$$\hat{\underline{J}}_j = \underbrace{\langle \hat{\underline{J}}_j \rangle}_{\text{Mittelwerte}} + \underbrace{\delta \hat{\underline{J}}_j}_{\text{Fluktuation}}$$

Einsetzen:

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

quadratisch in den Fluktuationen!

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

⇒ nehme Terme der niedrigsten Ordnung in δJ mit

⇒ linearisiere das Operatorprodukt!

⟹ „Meanfield"-Hamiltonian

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

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

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

die ersten beiden Terme liefern dasselbe Ergebnis, da $J_{ij}=J_{ji}$

$$\Rightarrow \hat{H}^{MF} = -\overbrace{\sum_{i\neq j}}^{\text{Doppelsumme}} J_{ij}\,\hat{\underline{J}}_i\,\langle\hat{\underline{J}}_j\rangle + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\langle\hat{J}_i\rangle\langle\hat{\underline{J}}_j\rangle + \frac{g\mu_B}{\hbar}\sum_i\hat{\underline{J}}_i\cdot\underline{B}_0$$

für gegebenes T, $\underline{B}_0$ sind das (d.h. $\langle\hat{\underline{J}}_i\rangle$) einfach Konstanten

⟹ Verschiebung der Energie

⟹ wird weggelassen

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

$$\text{mit}\quad \boxed{\underbrace{\underline{B}_i^{\mathrm{eff}}}_{\text{effektives Feld}} = \underbrace{-\frac{\hbar}{g\mu_B}\sum_{j=1}^{N} J_{ij}\,\langle\hat{\underline{J}}_j\rangle}_{\text{Beitrag der Nachbarn}} + \underbrace{\underline{B}_0}_{\text{äußeres Feld}}}$$