

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

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

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

mit  $\underline{B}_0 = B_0 \hat{e}_z \rightarrow \hat{H} = \sum_{i=1}^N \underbrace{\frac{g \mu_B}{\hbar} \hat{J}_{i,z}}_{\hat{h}_i} B_0$

$$\hat{h}_i |j_i, m_i\rangle = \epsilon_i |j_i, m_i\rangle$$

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

$$Z = \left( \frac{\sinh(\beta \hat{B}_0 (J + \frac{1}{2}))}{\sinh(\beta \hat{B}_0 / 2)} \right)^N \quad \text{mit } \hat{B}_0 = \frac{g \mu_B}{\hbar} B_0$$

$J = j_i$

Resultierende Magnetisierung:  $M(T, B_0) = N g \mu_B J B_T / (\beta g \mu_B J B_0)$

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

Bemerkungen zu  $B_T(x)$

a) speziell  $J = \frac{1}{2}$ ,  $m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

$$\Rightarrow B_T(x) = 2 \coth(2x) - \coth x$$

$$= \tanh x$$

$\Rightarrow$  sehr wichtig  $\Rightarrow$  Ising-Modell  
 $\hookrightarrow$  Spins mit 2 Einstellmöglichkeiten

b) Grenzfall  $J \rightarrow \infty$

betrachte:  $\frac{2J+1}{2J} \xrightarrow{J \rightarrow \infty} 1$ ,  $\frac{1}{2J} \coth\left(\frac{x}{2J}\right) \xrightarrow{J \rightarrow \infty} \frac{1}{2J} \frac{2J}{x} = \frac{1}{x}$

benutze  $\coth x \approx \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45} + \dots$

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

"Langevin-Funktion"

wichtig z.B. für permanent Dipolmomente von Molekülen in einem äußeren elektr. Feld

$$H_{\text{Dipol}} = - \sum_{i=1}^N p_i \cdot E_0$$

Polarisation:  $P = \left\langle \sum_{i=1}^N p_i \right\rangle$

$$\sim L(\beta E_0)$$

c) Grenzfall  $B_0 \rightarrow 0$  oder  $T \rightarrow \infty$

betrachte wieder quantenmechan. System

$$M = N g \mu_B J B_J(x)$$

$$x \sim \beta B_0$$

benutze Taylorentw. von  $\coth x$

(s. Fall b)

$$\Rightarrow B_J(x) \approx \frac{J+1}{3J} x - \frac{J+1}{3J} \frac{2J^2 + 2J + 1}{30J^2} x^3 + \dots$$

1. Term ist linear in  $x$ !

$$\Rightarrow B_y(0) = 0$$

$\Rightarrow$  Es gibt kein "spontane" Magnetisierg für  $B_0 \rightarrow 0$

für festes  $T$

aufserden:  $M$  verschwindet für  $T \rightarrow 0$  unabhängig von  $B_0$ . Sinnvoll, da hier Entropie dominiert

falls  $T$  endlich,  $B_0$  klein

$$M \approx N g \mu_B J \frac{J+1}{3J} (\mu_B J B_0 / k_B T)$$

$$= \frac{C}{T} B_0 \quad \text{mit} \quad C = N (g \mu_B)^2 \frac{J(J+1)}{3k_B}$$

Suszeptibilität

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B_0} \Big|_T \xrightarrow{B_0 \text{ klein}} \frac{C}{T} \quad \boxed{\text{Curie-Gesetz}}$$

also:

hohe Temperatur  $\Leftrightarrow \chi$  klein : macht Sinn, da hier Entropie dominiert!

kleine " "  $\Leftrightarrow \chi$  groß : Energie dominiert

III.2. Wechselwirkende Teilchenagregate

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^U \sum_{j \neq i} J_{ij} \underbrace{\hat{J}_i \cdot \hat{J}_j}_{\hat{A}_i \cdot \hat{A}_j} + \frac{g}{\hbar} \mu_B \sum_{i=1}^U \hat{J}_i \cdot \vec{B}_0$$

quantenstatistisch!

$J_{ij}$ : "Austauschintegrale" : Begründung aus der QM

$$J_{ij} = J_{ji} \text{ Symmetrie, } J_{ii} = 0$$

$$J_{ij} = \begin{cases} > 0 & \text{ferromagnetischen Wechselwirkung} \\ < 0 & \text{antiferromagnetische} \end{cases}$$

eigentlich

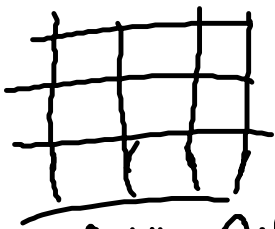
$$J_{ij} = J(N_{ij})$$

Spezialfall Spinglas:  $J_{ij}$  sind Zufallsgrößen  
mit  $\overline{J_{ij}} = 0$

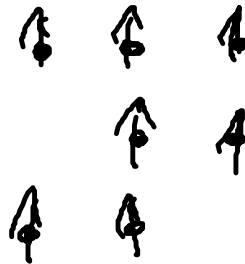
Spingläser sind "frustrierte Systeme",  
da nie simultanen allen Wechselwirkungen  
entsprechen kann!

⇒ komplexe Grundzustands-  
'Energielandschaft'

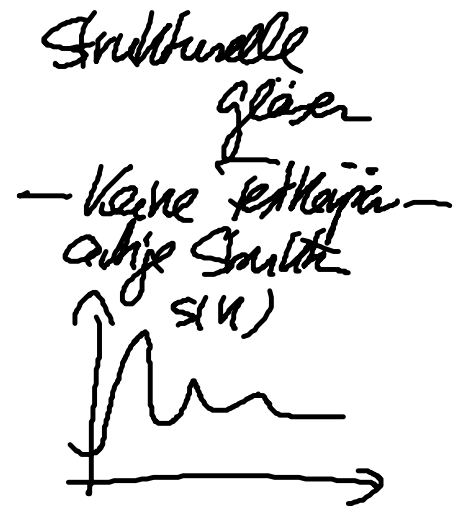
Nebenbemerkung:



perfektes Gitter,  
zufällige Kuppelung  
"Spingläser"



"site-diluted  
Ising Modell"  
(zufällige Entfernung  
von H<sub>2</sub>O-Molekülen)



Zur Dimension des Spins bzw. Drehimpuls:

$$n=3 \quad \hat{J}_i \cdot \hat{J}_j = J_{ix} J_{jx} + \dots + J_{iz} J_{jz}$$

"Heisenberg-Modell"

$n=2$  : "X-Y-Modell"



$$n=1 \quad \hat{J}_i \cdot \hat{J}_j = \hat{J}_{ix} \hat{J}_{jx}$$

speziell:  $J_z = \frac{1}{2} \Rightarrow m = \pm \frac{1}{2}$

"Ising-Modell"

$$J_z = 1 \Rightarrow m = \begin{matrix} +1 \\ 0 \\ -1 \end{matrix}$$

"3-Zustands-  
Potts-Modell"

speziell Ising-Modell

Klass. Schreibweise:

$$H = - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} J_{ij} s_i s_j - \mu B_0 \sum_{i=1}^N s_i$$

mit  $s_i = \pm \frac{1}{2}$

$$Tr e^{-\beta H} = \sum_{s_1 = \pm \frac{1}{2}} \dots \sum_{s_N = \pm \frac{1}{2}} e^{-\beta H}$$

### Relevanz des Ising-Modells

• Im Bereich des Magnetismus nur dann sinnvoll, wenn die magnet. Momente auf eine Raumrichtung fixiert sind (eher selten)

• Zusammenhang mit Flüssigkeit

↑ Ordnungparameter hat dieselbe Dimension! ( $n=1$ )

Ising:  $m$   
Fluid:  $S$

~~Ising~~

→ Hamiltonoperatoren des Ising Modells kann  
umgeschrieben werden ~~hier~~ auf Hamiltonoperatoren  
eines Gittergases

Gitter mit  
Fluid-feld

$$S_i = \begin{cases} +\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{cases}$$

$$n_i = \begin{cases} 1 & \text{"besetzt"} \\ 0 & \text{"unbesetzt"} \end{cases}$$

außerdem:

Ising-Modell  $\longleftrightarrow$  Neuronales  
Netz

- Mit dem
- Wichtigste Demonstrationsmodell der Statist. Physik  
im Hinblick auf Phasenübergänge!

exakt lösbar in 1D und in 2D

### III.3. Molekularfeld-Näherung des Ferromagneten

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

umschreiben:

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

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

nehme nun Terme 1. Ordnung in  $\delta \underline{J}$  mit! d.h. Linearisierung

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

2. und 3. Term fallen zusammen!  
(wg.  $J_{ij} = J_{ji}$ )



$$\hat{H}_{MF} = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \langle \hat{J}_j \rangle \cdot \hat{J}_i$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \langle \hat{J}_i \rangle \cdot \langle \hat{J}_j \rangle + \sum_{i=1}^N g \mu_B \hat{J}_i \cdot \underline{B}_0$$

benutze wieder:  $\hat{J}_i = \hat{J}_i - \langle \hat{J}_i \rangle$

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

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

Konstante (für feste T), die nur Energieverschiebung bewirkt, wird hier weggelassen!

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

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

Definiere nun das "effektive" (Molekular-) Feld auf Teilchen i)

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

$$B_i^{\text{eff}} = \sum_{j=1}^N \cancel{J_{ij}} \langle \hat{A}_j \rangle + B_0$$

$$\hat{H}^{\text{MF}} = \frac{g\mu_B}{\hbar} \sum_{i=1}^N \hat{J}_i \cdot B_i^{\text{eff}} \Leftrightarrow \hat{H}^{\text{MF}} = - \sum_{i=1}^N \hat{A}_i \cdot B_i^{\text{eff}}$$

$\hat{H}^{\text{MF}}$  hat genau dieselbe Struktur  
wie beim Weisswilleypfaff-  
Paramagnet!