VI. Spinmodelle

VI.1. Nicht-wechselwirkende Spinsysteme

Betrachte Festkörper aus Atomen mit permanenten magnetischen Momenten $\hat{\underline{\mu}}_i$ ← (Vektor-) Operator des magnetischen Moments

Frage: Magnetisierung in einem äußeren Feld $\underline{B}_0$??

Betrachte kanonische Zustandssumme

$$Z_K(T, V, N)$$

Hamiltonoperator:

Keine Wechselwirkung!

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

jedes magnetische Moment will sich parallel zum Feld $\underline{B}_0$ ausrichten!

Umschreiben mit Drehimpulsgesetzen

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

Bohr'sches Magneton

Landé-Faktor (≈ 2)

minus (gilt für Elektronen)!!

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

Setze $\underline{B}_0 = B_0 \underline{e}_z$

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{g}{\hbar} \mu_B \sum_{i=1}^{N} \hat{J}_{i,z} B_0$$

z-Komponente von $\hat{\underline{J}}_i$

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{h}_i$$

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

Einteilchen-Hamiltonian

Kanonische Zustandssumme:

$$Z_K = \underset{\text{Spur}}{\mathrm{Tr}}\, e^{-\beta \hat{H}}$$

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

hier: Tr $\Leftrightarrow$ Summe über alle möglichen Einstellungen der $\hat{\mu}_i$

Auswertung in Eigenzustände von $\hat{H}$

beachte: Die Eigenzustände sind hier durch die Drehimpulseigenzustände gegeben!

benutze:

$$\hat{J}_{i,z} \overbrace{|j_i, m_i\rangle}^{\text{Eigenzustände}} = \underbrace{\hbar m_i}_{\text{Eigenwert}} |j_i, m_i\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{h}_i |j_i, m_i\rangle = B_0\, g\, \mu_B\, m_i |j_i, m_i\rangle$$

Richtungsquantelung

mit $m_i = -J, -J+1, \ldots, J$

nehme an, daß $j_i = J \quad \forall\, i = 1, \ldots, N$

In der

$\Rightarrow$ Zustandssumme: $\mathrm{Tr} \ldots\ldots = \sum_{m_1=-J}^{J} \sum_{m_2=-J}^{J} \ldots \sum_{m_N=-J}^{J} \ldots\ldots$

$$\Rightarrow Z_N = \sum_{m_1=-J}^{J} \ldots \sum_{m_N=-J}^{J} e^{\underbrace{-\beta g \mu_B \sum_{i=1}^{N} m_i B_0}_{\text{Energieeigenwert von } \hat{H} \text{ !!}}}$$

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

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

benutze Faktorisierung des Boltzmannfaktors

(das geht nur, weil $\hat{H}$ keine Kopplung enthält!)

$$\Rightarrow Z_N = \prod_{i=1}^{N} \left(\sum_{m=-J}^{J} e^{-\beta \tilde{B}_0 m} \right)$$

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

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

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

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

benutze Formel für geometrische Reihe

$$\sum_{k=0}^{n} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Konstante}}}{a_0}\, q^k = a_0 \frac{1-q^{n+1}}{1-q}$$

für $q \neq 1$

hier: $q_0 = 1$, $n = 2J$

$$q = e^{\beta \hat{B}_0}$$

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

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

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

Daraus die Magnetisierung

$$\underline{M} = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \hat{\underline{\mu}}_i \right\rangle$$ Ensemble-Mittelwert (kanonisch)

Frage: Was ist $\underline{M}(\underline{B}_0, T)$??

hier: $\underline{B}_0 = B_0 \underline{e}_z$

$$\Rightarrow \underline{M} = M \underline{e}_z$$

alle anderen Komponenten (x, y) mitteln sich heraus!

$$\rightarrow M(T, B_0) = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \hat{\mu}_{i,z} \right\rangle$$
$$= \left\langle -\frac{g}{\hbar} \mu_B \sum_{i=1}^{N} \hat{J}_{iz} \right\rangle$$

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

$$\text{mit } \hat{H} = \frac{g}{\hbar} \mu_B \sum_{i=1}^{N} \hat{J}_{iz} B_0$$
$$= \frac{\tilde{B}_0}{\hbar} \sum_{i=1}^{N} \hat{J}_{iz}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial \tilde{B}} e^{-\beta \hat{H}} = e^{-\beta \hat{H}} \sum_{i=1}^{N} \hat{J}_{iz} \frac{\beta}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \left\langle \sum_{i=1}^{N} \hat{J}_{i,z} \right\rangle$$

$$= -\frac{1}{(\beta/\hbar)} \frac{\partial}{\partial \tilde{B}_0} \ln Z_K$$

bekannt!

Damit:

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

$$= \frac{g\mu_B}{\beta} \frac{\partial}{\partial \tilde{B}} \ln Z_K$$

Setze ein:

$$\ln Z_K = N \ln \frac{\sinh(\beta \tilde{B}_0 (J + \frac{1}{2}))}{\sinh(\beta \tilde{B}_0 / 2)}$$

Man findet:

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

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

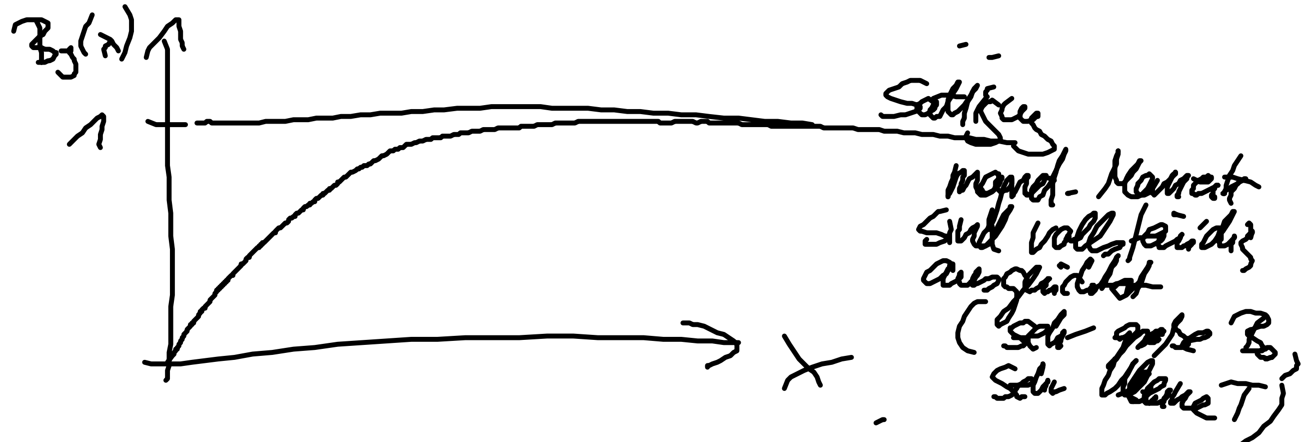
mit $B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J} x\right) - \frac{1}{2J} \coth\left(\frac{x}{2J}\right)$

Brillouin-Funktion

Bemerkungen:

- M ist extensiv! ✓

- Generelle Form der Funktion $B_J(x)$



Sättigung ist plausibel
$x \sim \frac{B_0}{k_B T}$

• Spezialfall $J = \frac{1}{2}$

d.h. $m = \pm \frac{1}{2}$ Zwei Einstell-Möglichkeiten

führt auf Ising-Modell

$$B_{\frac{1}{2}}(x) = 2\coth(2x) - \coth x$$
$$= \tanh x$$

$$\Longrightarrow \underline{\underline{M \sim \tanh x}}$$

• Klassischer Grenzfall

$J \longrightarrow \infty$

d.h. kleine Richtungsquantelung merken

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

betrachte Grenzfall:

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

$$\coth\underbrace{\left(\frac{x}{2J}\right)}_{\text{wird klein}} \approx \frac{2J}{x}$$

$$\coth y \approx \frac{1}{y}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2J}\coth\frac{x}{2J} \longrightarrow \frac{1}{2J}\frac{2J}{x} = \frac{1}{x}$$

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

Langevin-Funktion

wichtig z.B. für elektrische Dipole im Feld $\underline{E_0}$

- Zurück zum quantenmechan. Fall

Grenzfall $B_0 \rightarrow 0$

d.h. $x = \beta g \mu_B J B_0 \rightarrow 0$

$$\coth x \simeq \frac{1}{x} + \frac{x}{3} + \mathcal{O}(x^3)$$

einsetzen $\Rightarrow$ $$B_J(x) \simeq \frac{J+1}{3J} x + \mathcal{O}(x^3)$$

d.h. $$\lim_{x \to 0} B_J(x) = 0 \;!!$$

D.h., es gibt keine Magnetisierung in Abwesenheit eines Magnetfeldes!

Also kein "Ferromagnetismus"
($\Leftrightarrow$ Magnetisierung in Abwesenheit eines Feldes)

da keine Wechselwirkung!

VI.2. Wechselwirkende Spinsysteme, Molekularfeldnäherung

Konstruktion des Hamiltonian

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

Kopplungsmatrix J_{ij}

Eigenschaften: $J_{ij} = J_{ji}$, $J_{ii} = 0$

$J_{ij} > 0$ ferromagnetische Kopplung (favorisiert Parallelstellung)

$J_{ij} < 0$: antiferromagnet. Kopplung

Klassifizierung:

- $\hat{\underline{J}}_i$ dreidimensionale Vektoren

  $\Rightarrow$ "Heisenbergmodell"

- $\hat{\underline{J}}_i$ zweidimensionale Vektoren:

  "X-Y-Modell"

• $\underline{\hat{J}}_i \Rightarrow J_{i,z}$ und $J_i = J = \frac{1}{2}$ $\left(\Rightarrow m = \pm\frac{1}{2}\right)$

Skalar

"Ising-Modell"

In fast allen Fällen ist die exakte Auswertung der Zustandssumme wegen der Kopplung <u>unmöglich</u>!

Ausnahme: Ising-Modell in 1D — Raumdimension

" " in 2D

<u>Molekularfeldnäherung (unabhängig von der Art des Spins)</u>

Schreibe im Kopplungsterm $-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i} J_{ij}\,\underline{\hat{J}}_i\cdot\underline{\hat{J}}_j$

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

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

Summe aus Mittelwert und Fluktuation!

Für das Produkt $\underline{\hat{J}}_i\cdot\underline{\hat{J}}_j$ folgt

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

Annahme: Fluktuationen klein

$\Longrightarrow$ vernachlässige die quadratischen Terme !

$\Longrightarrow$ linearisierter Hamiltonian:

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

Beachte: Die beiden Terme linear in $\delta \hat{J}$ ergeben das Gleiche, weil $J_{ij} = J_{ji}$

• Der Term mit $\langle \underline{J}_i \rangle \langle \underline{J}_j \rangle$ ist eine Konstante (bei festem T, $\underline{B}_0$), er enthält keine Freiheitsgrade mehr

$\longrightarrow$ für die Statistik irrelevant

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