18.1. Heute 16^{15} Kollogium PN 202 (1)

T. Brandes: Quantenmechanischer Transport –
Rauschen, Dissipation und
Wechselwirkungen

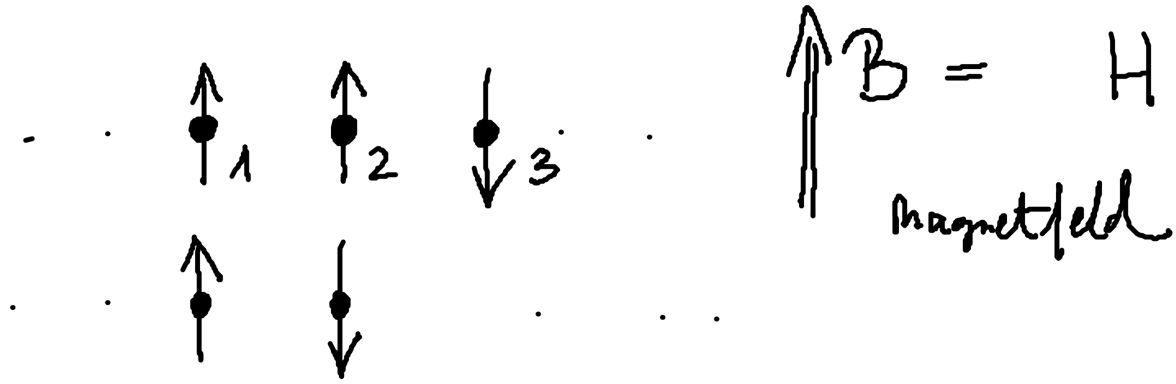
18.1.07

Magnetismus : Ising – Modell

„Spins" mit zwei Einstellmöglichkeiten

↑ in z-Richtung, ↓ in z-Richtungen

Gitter, auf jeden Gitterplatz sitzt ein Spin



Spinvariablen $\sigma_i = \pm 1$

i: Index für Gitterplatz, $i = 1, \dots, N$

Eigenwerte der Spinmatrix $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Hamiltonian: zwei Anteile

- WW der Spins untereinander
- " " mit dem Magnetfeld am Gitterplatz i.

$$\hat{H} = -\sum_{i,j} \underbrace{J_{ij}}_{\text{Austauschintegrale}} \sigma_i \sigma_j - \underbrace{g}_{\text{Landé-Faktor}} \underbrace{\mu_B}_{\text{Bohr-Magneton}} \sum_i \sigma_i \underbrace{h_i}_{\text{Magnetfeld am Platz } i}$$

Beachte: Das Magnetfeld h_i ist von außen vorgegeben.

Im folgenden $g\mu_B = 1$

$$\Rightarrow \quad \hat{H} = -\sum_{i,j=1}^{N} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=1}^{N} \sigma_i h_i$$

- i.A. schwierig bis auf den Fall $J_{ij} \equiv 0$
  (dann hat man WW-freie Spins)

Kanonische Zustandssumme

$$e^{-\beta F} \equiv Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{-\beta \hat{H}}$$

$$= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{-\beta\left[-\sum_{i,j} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_i h_i\sigma_i\right]}$$

Spezialfall $J_{ij} = 0$

$$\Rightarrow e^{-\beta F_{\text{free}}} = Z_{\text{free}} = \sum_{\sigma_1} \dots \sum_{\sigma_N} e^{+\beta \sum_{i=1}^{N} h_i\sigma_i}$$

$$= \sum_{\sigma_1} \dots \sum_{\sigma_N} \underbrace{e^{\beta(h_1\sigma_1 + h_2\sigma_2 + \dots + h_N\sigma_N)}}_{e^{\beta h_1\sigma_1} \times \dots \times e^{\beta h_N\sigma_N}}$$

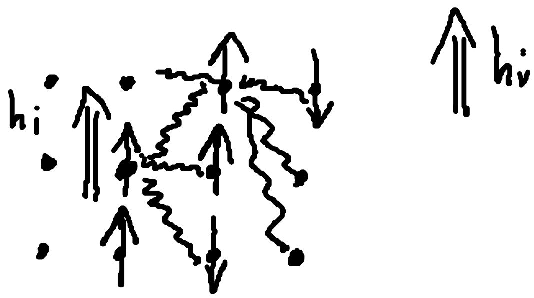
$$= \underbrace{\sum_{\sigma_1=\pm 1} e^{\beta h_1\sigma_1}}_{2\cosh\beta h_1} \times \sum_{\sigma_2} e^{\beta h_2\sigma_2} \dots \underbrace{\sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{\beta h_N\sigma_N}}_{2\cosh\beta h_N}$$

$$= 2\cosh\beta h_1 \times \dots \times 2\cosh\beta h_N$$

$$= \prod_{i=1}^{N} Z_1(h_i); \quad Z_1(h_i) \equiv 2\cosh\beta h_i$$

Näherungsmethoden: Mean-Field-Methoden

Weiss'sche Molekularfeldnäherung



Effekt der Spin-Spin-Wechselwirkungen
als effektives Magnetfeld beschreiben:

$$-\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} J_{ij}\,\sigma_i\,\sigma_j \qquad -\sum_i h_i \sigma_i$$

$$-\sum_{i=1}^{N} J_{ij}\,\sigma_i \overset{?}{=} h_j^{\text{eff}} \quad j \text{ festhalten}$$

$$\hat{H} = -\sum_{ij} J_{ij}\,\sigma_i\sigma_j - \sum_i h_i\,\sigma_i$$

$$= -\sum_i \underbrace{h_i[\sigma]}\sigma_i$$

zusätzliches Magnetfeld

$$h_i[\sigma] \equiv h_i + \overbrace{\sum_{j=1}^{N} J_{ij}\langle\sigma_j\rangle}$$

äußeres Feld

$$+ \underbrace{\sum_{j=1}^{N} J_{ij}\left(\sigma_j - \langle\sigma_j\rangle\right)}$$

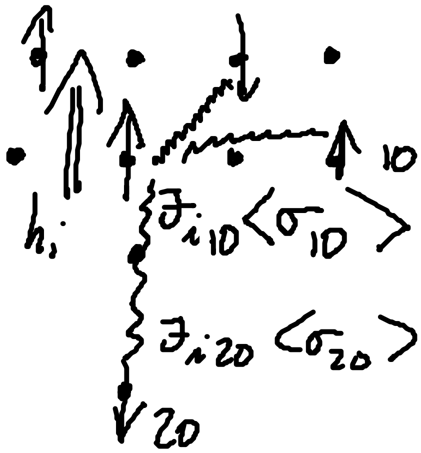
Abweichung vom Mittelwert

vernachlässigen!

Damit Mean-Field Hamiltonian

$$\mathcal{H}^{MF} \equiv -\sum_{i=1}^{N} h_i^{eff}\sigma_i\,,\quad h_i^{eff} \equiv h_i + \underbrace{\sum_j J_{ij}\langle\sigma_j\rangle}$$

das mittlere, durch alle anderen Spins an der Stelle i erzeugte Magnetfeld



$$h_i^{eff} = h_i^{eff}\left[\{\langle\sigma_j\rangle\}\right]$$

$$H^{MF} = -\sum h_i^{eff}\sigma_i \qquad \text{linear in } \sigma_i$$

$$\langle\sigma_j\rangle \equiv \frac{1}{Z}\sum_{\sigma_1=\pm1}\dots\sum_{\sigma_N=\pm1}\sigma_j\, e^{-\beta H^{MF}\left[\langle\sigma_j\rangle\right]}$$

Jetzt Spezialfall $h_i = h$ äußeres Magnetfeld

$$\langle\sigma_j\rangle = m_i = m \qquad \text{Magnetisierung}$$

$$\Rightarrow\ m = \langle\sigma_j\rangle = \frac{1}{Z}\sum_{\sigma_1}\dots\sum_{\sigma_N}\sigma_1\, e^{+\beta\sum_i h_i^{eff}\sigma_i}$$

$$= \frac{\sum_{\sigma_1} e^{(\beta h_1^{eff}\sigma_1)}\sigma_1 \cdot \cancel{\sum_{\sigma_2} e^{\beta h_2\sigma_2}}\dots\cancel{\sum_{\sigma_N} e^{\beta h_N\sigma_N}}}{\sum_{\sigma_1} e^{\beta h_1^{eff}\sigma_1}\ \cancel{\sum_{\sigma_2} e^{\beta h_2^{eff}\sigma_2}}\dots\cancel{\sum_{\sigma_N} e^{\beta h_N^{eff}\sigma_N}}}$$

$$= \frac{2\sinh\beta h^{eff}}{2\cosh\beta h^{eff}} = \tanh\left[\beta\left(h+\sum_j J_{1j}\, m\right)\right],$$

Selbstkonsistenzgleichung:

$$m = \tanh\left[\beta\left(h + \underbrace{\sum_j J_{1j}}\cdot m\right)\right]$$

$$= \tanh\left[\beta\left(h + \mathcal{J} m\right)\right] = \mathcal{F}$$

$\mathcal{J} = \sum_j J_{1j}$

Diskussion der Selbstkonsistenzgleichung für $h=0$
(kein äußeres Magnetfeld)

Fall 1: $\mathcal{J} = 0$ (keine WW)

Aus $m = \tanh \beta \mathcal{J} m$ folgt $m = 0$

$\Rightarrow$ keine Magnetisierung, wie erwartet.

Auch aus $e^{-\beta F_{free}} = \prod_{i=1}^{N} 2\cosh \beta h_i$

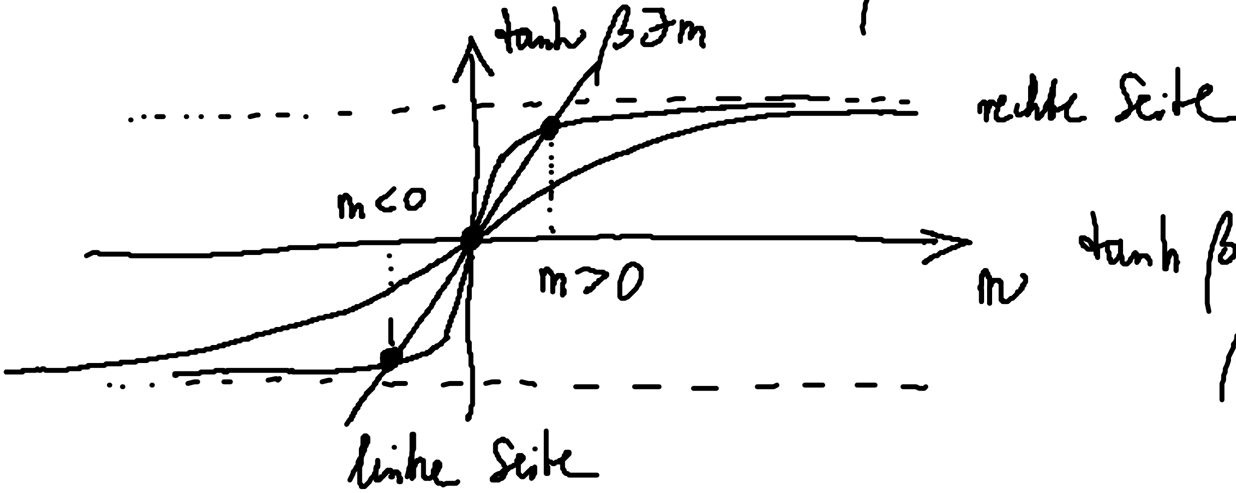
$$\Rightarrow \quad m_i = -\frac{\partial F_{frei}}{\partial h_i}\bigg|_{h_i=0} = \tanh \beta h_i \big|_{h_i=0}$$

(Paramagnet)

für $h_i = 0$ wieder $m_i = 0$, d.h. nichts passiert.

Fall $J > 0$ (mit Wechselwirkungen).

Betrachten $\quad m = \tanh \beta J m$



$\tanh \beta J m = \beta J m + O(m^3) + \dots$

- : nur $m=0$ ist eine Lösung
- : 3 Lösungen $m=0$, $m_\pm$ mit $|m_\pm| \neq 0$

Lösung $m_\pm \neq 0$ beschreiben eine endliche Magnetisierung selbst für äußeres Magnetfeld $h=0$ „spontane Magnetisierung".

Wann passiert das? Für $\beta J > 1 = \beta_c J$ passiert der Übergang, d.h. für

$$\frac{k_B T}{J} < \frac{k_B T_c}{J} = 1$$

- kritische Temperatur $k_B T_c = J$

Für $T < T_c$: spontane Magnetisierung

Für $T > T_c$: keine spontane "