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

Kanonisch

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

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

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

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

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

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

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

$J = j_i$

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

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

Bemerkungen zu $B_J(x)$

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

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

$\Rightarrow$ sehr wichtig $\Rightarrow$ Ising-Modell

$\hookrightarrow$ Spins mit 2 Einstell-möglichkeiten

b) Grenzfall $J \to \infty$

beachte: $\frac{2J+1}{2J} \xrightarrow[J\to\infty]{} 1$, $\frac{1}{2J}\coth\left(\frac{x}{2J}\right) \xrightarrow{J\to\infty} \frac{1}{2J}\frac{2J}{x} = \frac{1}{x}$

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

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

"Langevin-Funktion"

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

$$H_{klass} = -\sum_{i=1}^{N} \underline{p}_i \cdot \underline{E}_0$$

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

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

---

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

betrachte wieder quantenmechan. System

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

$$x \sim \beta B_0$$

benutze Taylorentw. von $\coth x$

(s. Teil b)

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

1. Term ist linear in x!

$\Rightarrow B_J(0) = 0$

$\Rightarrow$ Es gibt kein "spontane" Magnetisierung für $B_0 \to 0$

für festes T

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

falls T endlich, B_0 klein

$$M \approx N g \mu_B J \frac{J+1}{3J} \beta \mu_B J B_0 g$$

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

Suszeptibilität

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

also:

hohe Temperatur $\Leftrightarrow$ χ klein : macht Sinn, da hier Entropie dominant!

kleine " $\Leftrightarrow$ χ groß : Energie dominant

III.2. Wechselwirkende Ferromagnete

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

quantenstatistisch!

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

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

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

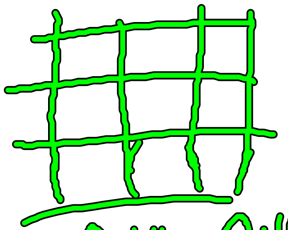
eigentlich $J_{ij} = J(\underline{R}_{ij})$

Spezialfall Spingläser: J_{ij} sind Zufallsgröße und $\overline{J_{ij}} = 0$

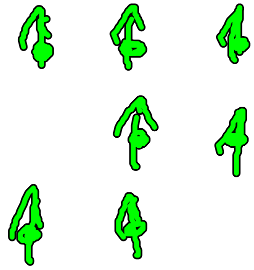
Spingläser sind "frustrierte Systeme",
da nie simultan allen Wechselwirkungen
entsprochen werden kann!

$\Rightarrow$ komplexe Grundzustands-
"Energielandschaft"

<u>Nebenbemerkung:</u>



perfektes Gitter, zufällige Kopplungen
"Spinglas"



"site-diluted Ising Modell"
(zufällige Entfernung von Spinplätzen)

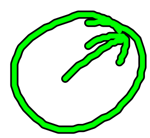
Strukturelle Gläser
— keine kristallin-artige Struktur

Zur Dimension der Spins bzw. Dichtequellen:

$n=3$ $\quad \underline{\hat{J}}_i \cdot \underline{\hat{J}}_j = J_{i,x} J_{j,x} + \dots J_{i,z} J_{j,z}$

"Heisenberg-Modell"

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



$n=1$: $\underline{\hat{J}}_i \cdot \underline{\hat{J}}_j = \hat{J}_{i,z} \hat{J}_{j,z}$

speziell: $J_z = \frac{1}{2} \Rightarrow m = \frac{\pm 1}{2}$ "Ising-Modell"

$J_z = 1 \Rightarrow m = \begin{cases} +1 \\ 0 \\ -1 \end{cases}$ "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 $s_i = \pm\frac{1}{2}$

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

Relevanz des Ising-Modells

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

- Zusammenhang mit Flüssigkeiten

Ordnungsparameter hat dieselbe Dimension! $(n=1)$

Ising: m

Fluid: ρ

$\rightarrow$ Hamiltonoperator des Ising-Modells kann umgeschrieben werden auf Hamiltonoperator eines Gittergases

Gitter mit Fluid-Teilchen

$$s_i = \begin{cases} +\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{cases} \qquad n_i = \begin{cases} 1 & \text{"besetzt"} \\ 0 & \text{"unbesetzt"} \end{cases}$$

außerdem:

Ising-Modell $\longleftrightarrow$ Neuronalen Netze

Mit dem

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

exakt Lösbar in 1D und in 2D

II.3. Molekularfeld-Näherung des Ferromagneten

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

umschreiben:

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

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

nehme nur Terme 1. Ordnung in δJ mit! d.h. Linearisierung

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

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

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

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

$$= -\sum_{i \neq j} J_{ij} \hat{\underline{J}}_i \cdot \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \langle \hat{\underline{J}}_i \rangle \cdot \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle}_{\substack{\text{Konstante (für feste T),} \\ \text{die nur Energieverschiebung} \\ \text{bewirkt, wird hier} \\ \text{weggelassen!}}} + \frac{g\mu_B}{\hbar} \sum_{i=1}^{N} \hat{\underline{J}}_i \cdot \underline{B}_0$$

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

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

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

$$\vec{B}_i^{eff} = \sum_{j=1}^{N} J_{ij} \langle \hat{\vec{\mu}}_j \rangle + \vec{B}_0$$

$$\hat{H}^{MF} = \frac{g\mu_B}{\hbar} \sum_{i=1}^{N} \hat{\vec{J}}_i \cdot \vec{B}_i^{eff} \Leftrightarrow \hat{H}^{MF} = -\sum_{i=1}^{N} \hat{\vec{\mu}}_i \cdot \vec{B}_i^{eff}$$

H^{MF} hat genau dieselbe Struktur wie beim wechselwirkungsfreien Paramagneten!