Wh:

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

(Erinnerung:

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

Molekularfeld-Näherung:

Fluktuation

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

Dann: Linearisiere Kopplungsterm bzgl. $\delta\hat{\underline{J}}$.
(Annahme: Fluktuation klein)

Einsetzen ~~und~~, linearisiere und
lasse konstanten Term $(\sim \langle \hat{\underline{J}}_i \rangle \cdot \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle)$

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

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

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

Umschreiben:

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

$$\text{mit } \underline{B}_i^{\text{eff}} = \underbrace{-\frac{\hbar}{g\mu_B} \sum_{j=1}^{N} J_{ij} \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle}_{\text{Beitrag aus den Wechselwirkungen – genähert!}} + \underline{B}_0$$

effektives Feld, das auf den Spin i wirkt

externes Magnetfeld

Man sieht: Durch die Einführung des effektiven Feldes hat $\hat{H}^{MF}$ "Einteilchen-Struktur" keine Kopplung!

Konsequenz:

Wir können die Ergebnisse aus der Theorie nichtwechselwirkender Spinsysteme (Zustandssumme, Magnetisierung) mit leichten Umschreibungen übernehmen!

Zunächst: Umschreiben des effektiven Feldes

Definiere: $$\underline{M} = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \hat{\underline{\mu}}_i \right\rangle = -\frac{g\mu_B}{\hbar} \left\langle \sum_{i=1}^{N} \hat{\underline{J}}_i \right\rangle$$

$$\Longleftrightarrow \left\langle \sum_{i=1}^{N} \hat{\underline{J}}_i \right\rangle = -\frac{\hbar}{g\mu_B} \underline{M}$$

Nehme außerdem homogenes System an, d.h.

$$J_{ij} = \frac{J}{N} \quad \text{unabhängig von } i,j!$$

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

$$= -\frac{\hbar}{g\mu_B} \frac{J}{N} \underbrace{\sum_{j=1}^{N} \langle \underline{\hat{J}}_j \rangle}_{-\frac{\hbar}{g\mu_B} \underline{M}} + \underline{B}_0$$

$$= \left(\frac{\hbar}{g\mu_B}\right)^2 \frac{J}{N} \underline{M} + \underline{B}_0$$

also unabhängig von Teilchenindex!

ersetze nun noch:

$$\underline{m} = \frac{\underline{M}}{N}$$

und führe ein: $\lambda = \left(\frac{\hbar}{g\mu_B}\right)^2 J$

$$\Rightarrow \underline{B}_i^{eff} = \lambda \underline{m} + \underline{B}_0$$

$$= \underline{B}^{eff}$$

~~und~~ und $\hat{H}^{eff} = -\frac{g\mu_B}{\hbar} \sum_{i=1}^{N} \underline{\hat{J}}_i \cdot \underline{B}^{eff} = -\sum_{i=1}^{N} \underline{\hat{\mu}}_i \cdot \underline{B}^{eff}$

Folgerung für Magnetisierung:

mit ($\underline{B}_0 = B_0 \, \underline{e}_z$)

$$\frac{M}{N} = m = g\mu_B J \; B_J\Big(\beta g \mu_B J \,(J m + B_0)\Big)$$

Brillouin-Funktion

externes Feld

Temperaturabhängigkeit

beachte: Die Magnetisierung pro Gitterplatz taucht auf <u>beiden</u> Seiten der Gleichung auf

$\longrightarrow$ Selbstkonsistenzgleichung!

Spezialisiere auf Ising-Modell

$J = \frac{1}{2} \Rightarrow m^j = \pm \frac{1}{2}$ 2 Spin-Einstellungen möglich

Neue Variable:

$$S_i = \pm 1$$

$$\Rightarrow H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} J_{ij} S_i S_j - \sum_{i=1}^{N} S_i \underbrace{h}_{\text{äußeres Magnetfeld}}$$

Mache Molekularfeld-Approximation ($\Rightarrow H^{MF}$ mit Einteilchenstruktur) und werte die Zustandssumme aus

$$\Rightarrow Z_N = e^{-\beta N \frac{J}{2} m^2} \left(2 \cosh(\beta h^{eff})\right)^N$$

mit $h^{eff} = \underbrace{Jm}_{\text{Wechselwirkungsbeitrag}} + h$

Daraus die Freie Energie:

$$F = -k_B T \ln Z_1$$

$$= k_B T N \left(\beta \frac{J}{2} m^2 - \ln 2 \cosh(\beta(Jm + h)) \right)$$

$$\Rightarrow f = \frac{F}{N} = \frac{1}{2} J m^2 - k_B T \ln\left(2 \cosh(\beta(Jm + h))\right)$$

Freie Energie pro Gitterplatz

Setze $h = 0$ also kein äußeres Magnetfeld:

$$\Rightarrow f = \frac{1}{2} J m^2 - k_B T \ln\left(2 \cosh(\beta J m)\right)$$

Taylorentwicklung bzgl. m im zweiten Term:

① $\cosh x \approx 1 + \frac{x^2}{2!} + \dots$

② $\ln(1+x) \approx x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \dots$

$$\Rightarrow \ln\left(\cosh(\beta J m)\right)$$

$$\overset{(1)}{\approx} \ln\left(1 + \frac{1}{2}(\beta J m)^2\right)$$

$$\overset{(2)}{\approx} \frac{1}{2}(\beta J m)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}(\beta J m)^2\right)^2 = \frac{1}{2}\beta J m - \frac{1}{2}\frac{1}{4}(\beta J m)^4$$

$$\Rightarrow f = \frac{1}{2} J m^2 - k_B T \ln 2 - k_B T\left(\frac{1}{2}(\beta J m)^2 - \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{4}(\beta J m)^4\right) \qquad | : k_B T$$

$$\Rightarrow \beta f = \frac{1}{2}\beta J m^2 - \ln 2 - \frac{1}{2}(\beta J m)^2 + \frac{1}{8}(\beta J m)^4$$

Man nennt derartige Entwicklungen der freien Energie (in Potenzen des entsprechenden Ordnungsparameters, hier der Magnetisierung pro Gitterplatz) Landau-Entwicklung nochmal umschreiben:

$$\beta f = \frac{1}{2} m^2 \beta J \underbrace{\left(1 - \beta J\right)}_{1 - \frac{J}{k_B T}} + \frac{1}{8} (\beta J)^4 m^4 - \ln 2$$

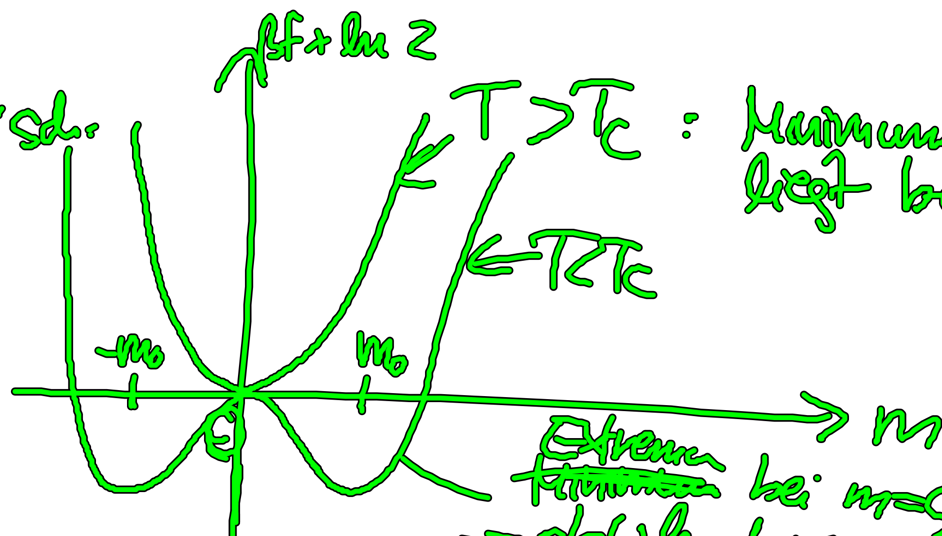
Dieser Faktor kann sein Vorzeichen wechseln $\Rightarrow$ Zeichen eines Phasenübergangs (2. Ordnung)

Führe ein:

kritische Temperatur $T_c = \frac{J}{k_B}$

$$\rightarrow \beta f = \frac{1}{2} m^2 \frac{T_c}{T} \left(1 - \frac{T_c}{T}\right) + \frac{1}{8} (\beta J)^4 m^4 - \ln 2$$

Graphisch:



$T > T_c$: Minimum der Magnetisierung liegt bei $m = 0$

~~Minimum~~ Extremum bei $m = 0$ ist instabil
$\Rightarrow$ stabile Minima liegen bei $m = \pm m_0$

Bei Temperaturen $T < T_c$ findet man also thermodynamisch stabile Lösung mit $m = \pm m_0 \neq 0$

Obwohl kein äußeres Magnetfeld vorhanden ist

$\Longrightarrow$ <u>Ferromagnetismus</u>

Für die Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung findet man (direkt bei T_c)

$$m_0 \sim \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)^{\beta}$$

krit. Exponent

mit $\beta = \frac{1}{Z}$

VII. Quantenstatistik