

V.4 Ferromagnetismus

(A) Heisenberg- und Ising Modell

Zur Erklärung des Ferromagnetismus bedarf es einer Austauschwechselwirkung zwischen Spins (z.B. verschiedener Atome im Festkörper) auf deren mikrophysikalische Ursache hier nicht eingegangen werden soll.

Für zwei Spins ist sie von der Form

(408)

$$\hat{H} = -J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

$$J < 0$$

anti-ferromagnetische
Wechselwirkung
AFM

$$J > 0$$

ferromagnetische
Wechselwirkung
FM

Klassischer Grundzustand

$$\vec{S} \rightarrow \vec{S}$$



rotationsinvariant

Heisenberg Modell von N Spins

$$(409) \quad \hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{jm} J_{jm} \vec{S}_j \cdot \vec{S}_m$$

mit $J_{jm} = J_{mj} = J_{jm}^*$ setzen $J_{jj} \equiv 0$

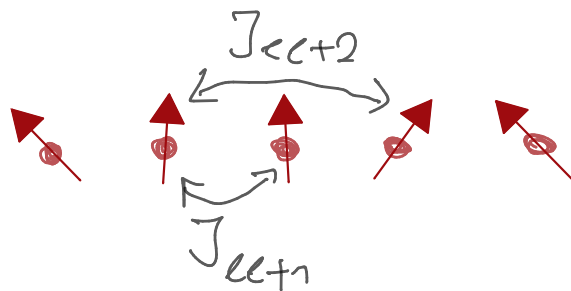
• ist invariant unter globaler Rotation aller Spins $\Rightarrow$ keine Raumrichtung ausgezeichnet

kompliziertes Vielteilchenmodell!

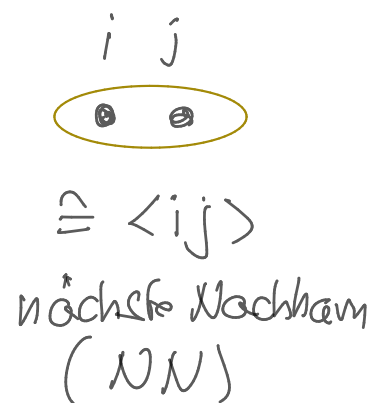
Vereinfachung: nur eine Spin Komponente (z Richtung)

Ising Modell

$$(410) \quad \hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{jm} J_{jm} \hat{S}_j^z \hat{S}_m^z$$



Oft fallen J_{cc+d} schnell mit d ab
 $\Rightarrow$ nur nächste Nachbarn



gleiche Kopplung $J_{\langle ij \rangle} \equiv J$

$$(4.11) \quad \hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J S_i^z S_j^z$$

$$S = \frac{1}{2}$$

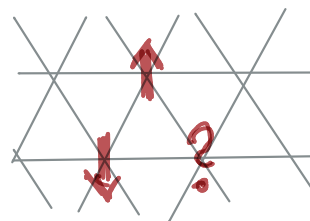
Grundzustand 2-fach entartet

$$|\uparrow\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle \quad \text{odpowiadaj} \quad |\downarrow\downarrow\downarrow\cdots\downarrow\rangle$$
$$S = \frac{1}{2}$$

GZ kompliziert! hängt von Gitter ab!

$$1D \quad |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\cdots\uparrow\downarrow\rangle \text{ oder } |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\cdots\downarrow\uparrow\rangle$$

aber



geometrische Frustration

$\Rightarrow$ zunächst nur ferromagnetisches Isingmodell

(B) Molekularfeldnäherung für das $S=\frac{1}{2}$ Isingmodell

Obwohl der Grundzustand von $\hat{H}$ aus (4.11) exakt bekannt ist, wollen wir hier ein Näherungsverfahren diskutieren, das auch für das Heisenbergmodell verwendet werden kann.

Betrachten zusätzlich zu (4.11) noch Kopplung an ein äußeres Magnetfeld

$$(4.12) \quad \hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{j,m} I_{jm} \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_m^z - b \sum_j \hat{\sigma}_j^z$$

$b \sim$ Magnetfeld in z -Richtung $b = \frac{1}{2} g \mu_B B_z$

Für $\hat{H}$ aus (4.12) gilt

$$(4.13) \quad [\hat{\sigma}_j^z, \hat{H}] = 0$$

was das Problem exakt lösbar macht.

Eigenzustand ist ein Produktzustand

$$(4.14) \quad \prod_j |S_j\rangle \quad S_j = \pm 1 \quad \text{EW von } \hat{\sigma}_j^z$$

$$E(\{S_j\}) = - \sum_j h_j S_j$$

wobei
(415)

$$h_j = b + \sum_{m \neq j} I_{jm} S_m$$

ein effektives Magnetfeld am Ort des j ten Spins ist

Lösung von $E(\{S_j\}) \stackrel{!}{=} \min$ erfordert
Auffinden der Konfigurationen

$$(S_1, S_2, \dots, S_N)$$

Dies ist für beliebige I_{jm} zwar ein klassisches Problem aber ggf NP-hard.

hier:

Molekularfeldnäherung

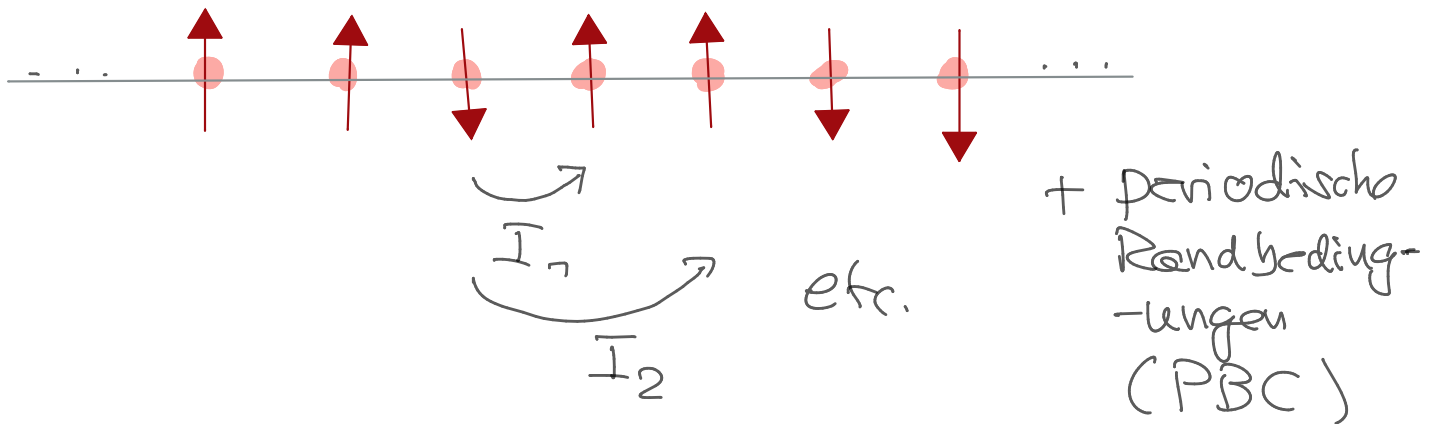
(auch auf Heisenberg-Modell anwendbar)

$$(416) \quad h_e \rightarrow \langle h_e \rangle = b + \sum_{e'} I_{ee'} \langle S_{e'} \rangle$$

im Falle des Heisenberg Modells

$$(417) \quad \vec{h}_e \rightarrow \langle \vec{h}_e \rangle = \vec{b} + \sum_{e'} I_{ee'} \langle \vec{S}_{e'} \rangle$$

betrachten das 1D Ising Modell
mit translationsinvarianter Kopplung



$$(418) \quad I_{jm} = I_{j-m} = I_n$$

Translationsinvarianz + PBC
 $\Rightarrow$ diskrete Fouriertransformation

$$(419) \quad \tilde{I}_k = \sum_{n=1}^L e^{-2\pi i \frac{k n}{L}} I_n$$

Annahme:

$$(420) \quad \boxed{\langle s_e \rangle \equiv m}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \sum_{j,e} I_{je} \langle s_e \rangle &= \sum_j \left(\sum_n I_n \right) m \\ &= \sum_{k=1}^L \underbrace{\sum_n e^{\frac{2\pi i k n}{L}}}_{=L \delta_{k0}} \tilde{I}_k m \equiv \tilde{I}_m m \end{aligned}$$

d.h.
(421)

$$h_e \rightarrow \langle h_e \rangle = b + \tilde{I} m$$

Bem: Annahme (420) funktioniert nur für ferromagnetische Systeme

Verbesserung der Molekularfeldnäherung

Jetzt wollen wir kleine Abweichungen δS_e vom Ansatz (420) zulassen

$$(422) \quad S_e = m + S_e - m = m + \delta S_e$$

d.h.

$$S_j S_e = (m + S_j - m) (m + S_e - m)$$

$$= m^2 + m \underbrace{(S_j - m)}_{\delta S_j} + m \underbrace{(S_e - m)}_{\delta S_e}$$

$$+ \underbrace{(S_j - m)}_{\delta S_j} \underbrace{(S_e - m)}_{\delta S_e} \approx 0$$

$\Rightarrow$

$$(423) \quad \hat{H} \approx \hat{H}_{MF} = \frac{1}{2} m^2 N \tilde{I} - \sum_e (b + \tilde{I} m) S_e$$

mean-field (Molekularfeld) Hamiltonian

kanonische Zustandssumme

$$(424) \quad \mathcal{Z} = \frac{1}{Z_{MF}} e^{\beta \sum_c (s_c (b + \tilde{I}m) - \frac{1}{2} m^2 \tilde{I}N)}$$

$$\begin{aligned} Z_{MF} &= \text{Tr} \left\{ e^{\beta \sum_c (s_c (b + \tilde{I}m) - \frac{1}{2} m^2 \tilde{I}N)} \right\} \\ &= \prod_c \left(\sum_{s_c = \pm 1} e^{\beta s_c (b + \tilde{I}m)} \right) e^{-\frac{1}{2} \beta m^2 \tilde{I}N} \\ &= 2 \cosh \left(\beta (b + \tilde{I}m) \right) \end{aligned}$$

$$(425) \quad Z_{MF} = \left(e^{-\frac{1}{2} \beta m^2 \tilde{I}} 2 \cosh [\beta (b + \tilde{I}m)] \right)^N$$

was wir noch nicht kennen ist $m = \langle s_c \rangle$?

Gesamtmagnetisierung $\vec{M} = M \vec{e}_z$

$$M = m N = k_B T \frac{\partial}{\partial b} \ln Z_{MF}$$

dies liefert eine implizite Gleichung

$$(426) \quad m = \tanh \left[\beta (\tilde{I}m + b) \right] \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

Abkürzung

(427)

$$T_C = \frac{\tilde{I}}{k_B}$$

Curie
Temperatur

Lösung von (426) $\rightarrow$ selbstkonsistente Lösung

•

$$b=0$$

kein externes Magnetfeld

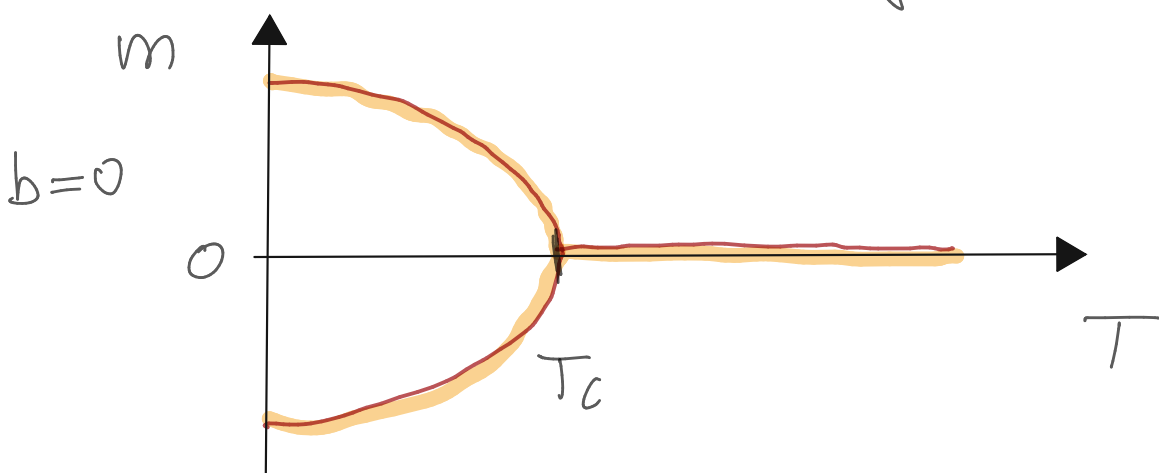
$$\begin{aligned} m &= \tanh(\beta \tilde{I} m) = \beta \tilde{I} m - \frac{1}{3} (\beta \tilde{I} m)^3 + \dots \\ &= \frac{T_C}{T} m - \frac{1}{3} \left(\frac{T_C}{T} m \right)^3 + \dots \end{aligned}$$

bis 3. Ordnung:

(428)

$$m = \begin{cases} 0 & T > T_C \\ \pm m_0 = \pm \sqrt{3} \left(1 - \frac{T}{T_C} \right)^{1/2} & T < T_C \end{cases}$$

$\Rightarrow$ spontane Magnetisierung für $T < T_C$



• $b \neq 0 \quad |T - T_c| \text{ klein}$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$m \left(1 - \frac{T_c}{T}\right) = \beta b - \frac{1}{3} \left(\beta b + \frac{T_c}{T} m\right)^3 + \dots$$

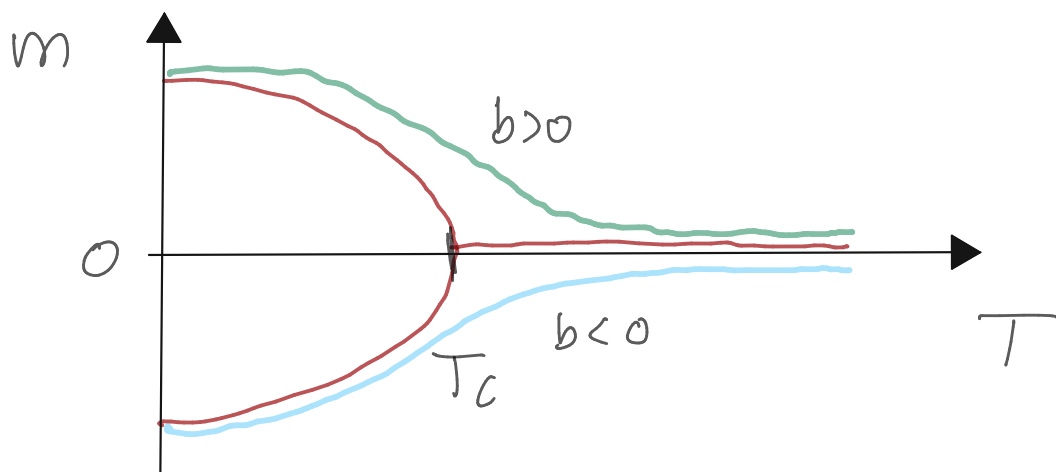
$$b \approx m k_B (T - T_c) + \frac{1}{3} \left(\beta b + m \frac{T_c}{T}\right)^3$$

$$b \approx m k_B (T - T_c) + \frac{k_B T}{3} \left(m \left(1 - \frac{T_c}{T}\right) + m \frac{T_c}{T}\right)^3$$

$$= m k_B (T - T_c) + \frac{k_B T}{3} m^3$$

(429)

$$b \approx m k_B (T - T_c) + \frac{1}{3} m^3 k_B T_c$$



$$T = T_c$$

Isothermie bei T_c

$$b = \pm |b|$$

(430)

$$m = \pm \left(\frac{3|b|}{k_B T_c} \right)^{1/3} \quad |b| \sim m^3$$

Suszeptibilitäten

isotherme magnet. Suszeptibilität

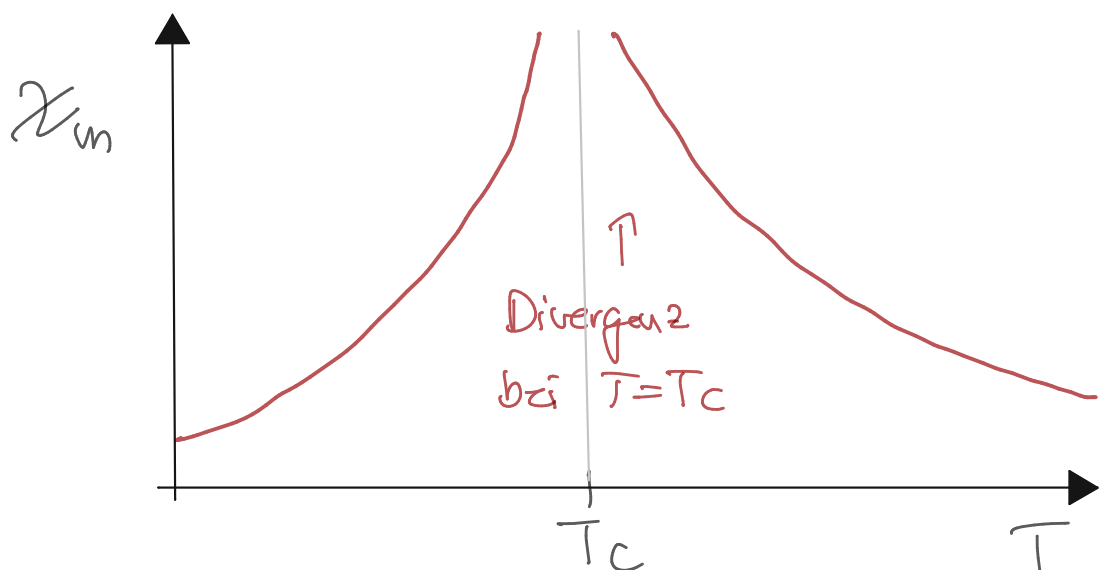
$$\chi_m = \left(\frac{\partial m}{\partial b} \right)_T \quad b \rightarrow 0$$

(429) $\frac{\partial}{\partial b}$

$$1 = \frac{\partial m}{\partial b} k_B (T - T_c) + m^2 \frac{\partial m}{\partial b} k_B T_c$$

(431)
$$\chi_m = \frac{1/k_B}{(T - T_c) + m^2 T_c} = \begin{cases} \frac{1/k_B}{T - T_c} & T > T_c \\ \frac{1/k_B}{2(T_c - T)} & T < T_c \end{cases}$$

Curie-Weiß Gesetz

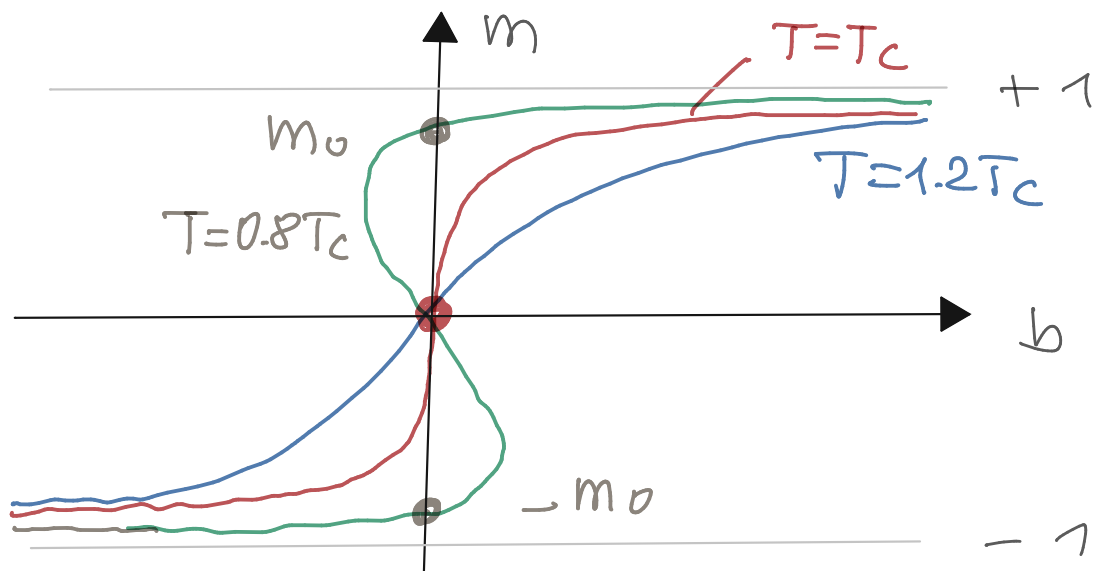


Betrachten noch einmal die Zustandsgleichung (426)

$$\beta (\tilde{I} m + b) = \operatorname{arctanh} m \quad \& \quad m = \frac{1}{2} \ln \frac{1+m}{1-m}$$

d.h. im Allgemeinen

$$(432) \quad b = -k_B T_C m + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{1+m}{1-m}$$



Spontane Magnetisierung für $T < T_C$

Helmholtz'sche freie Energie

freie Energie $F = -k_B T \ln Z_{KF}$

$$= -N k_B T \ln \left(2 \cosh [\beta (b + \tilde{I} m)] \right) + \frac{N k_B}{2} m^2 T_C$$

$$(433) \Rightarrow A = F + N B = F + m N b$$

$$T \ln \left(2 \cosh \left[\beta b + m \frac{T_c}{T} \right] \right) = T \ln 2$$

$$+ T \ln \left[\frac{1}{1 - \tanh^2 \left[\beta b + m \frac{T_c}{T} \right]} \right]^{1/2}$$

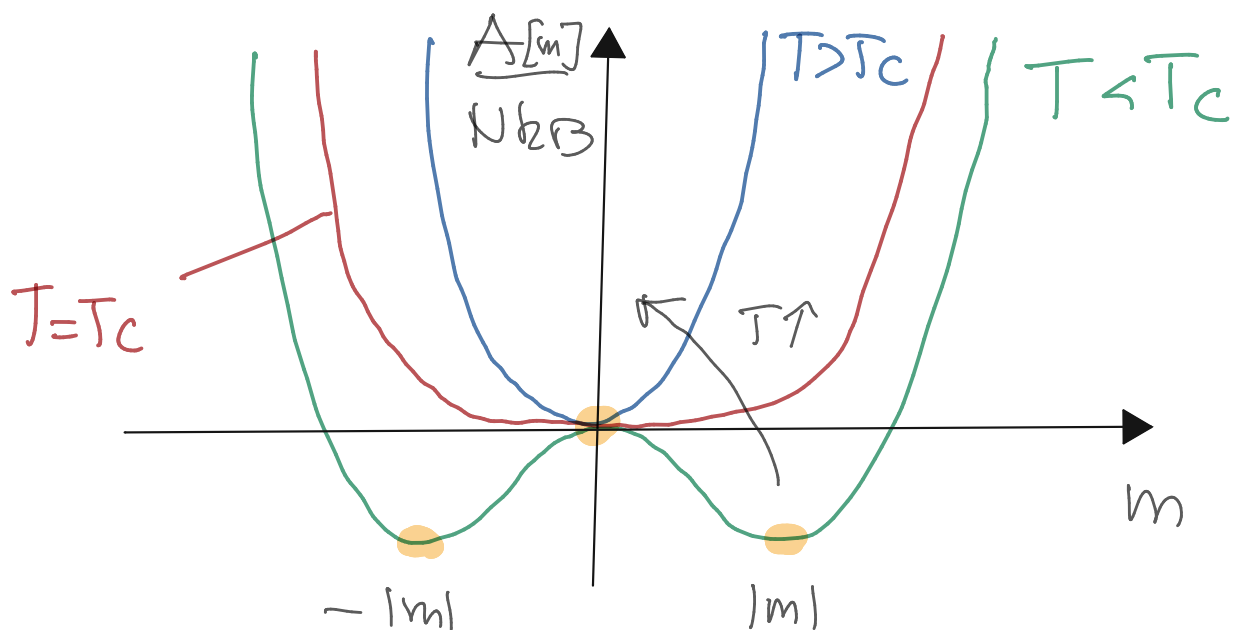
$$\left[\begin{array}{l} \text{Mit Gl. (42b)} \\ m = \tanh \left[\beta b + m \frac{T_c}{T} \right] \end{array} \right]$$

$$= T \ln 2 + T \ln \left[\frac{1}{1 - m^2} \right]^{1/2}$$

$$= T \ln 2 - \frac{1}{2} T \ln(1 - m^2)$$

$\Rightarrow$

$$\frac{A[m]}{N k_B} = T \ln 2 + \frac{1}{2} (T - T_c) m^2 + \frac{T_c}{12} m^4 + \mathcal{O}(m^6)$$



m stellt sich so ein, daß $A \stackrel{!}{=} \min$

$\Rightarrow$ bei $T = T_c$ ($T < T_c$) spontane
Symmetriebrechung, d.h.

$$m = |m| \quad \text{oder} \quad m = -|m|$$

Phasenübergang

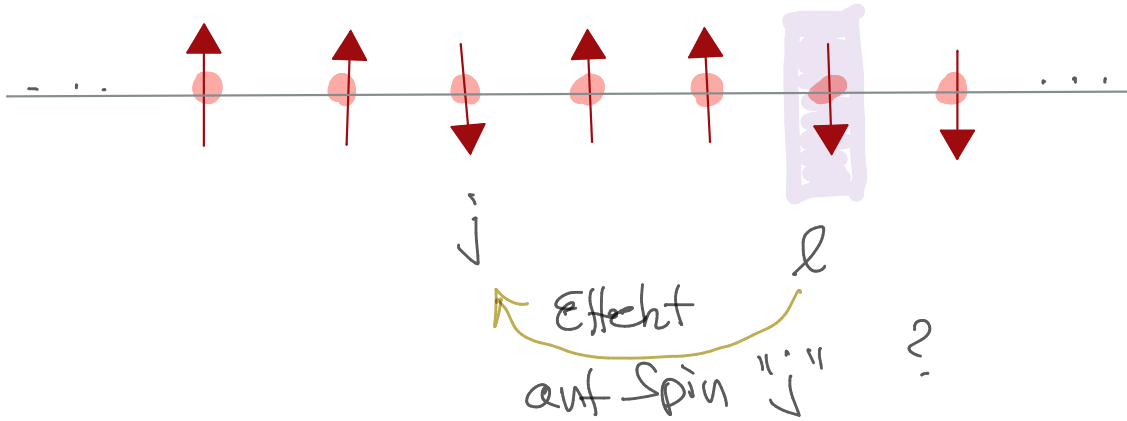
$$(434) \quad \frac{A}{Nk_B} = \begin{cases} -T \ln 2 & T > T_c \\ -T \ln 2 - \frac{1}{2} (T_c - T) m^2 + \frac{T_c}{12} m^4 & T < T_c \end{cases}$$

mit $|m| = \sqrt{3} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{1/2}$

$$(435) \quad \frac{A}{Nk_B} = \begin{cases} -T \ln 2 & T > T_c \\ -T \ln 2 - \frac{3}{4} T_c \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^2 & T < T_c \end{cases}$$

Bem.: Man kann auch ein Ising-Modell mit ortabhängigem Magnetfeld betrachten

$$b \rightarrow b_e$$



Korrelationsfunktion

$$(436) \quad G_{je} \equiv k_B T \frac{\partial m_j}{\partial b_e}$$

man findet

$$G_{je} \sim \frac{e^{-|j-e|/\xi}}{|j-e|}$$

ξ korrelationslänge in MFT

$$(437) \quad \xi = C \begin{cases} \frac{1}{(T - T_c)^{1/2}} & T > T_c \\ \frac{1}{2(T_c - T)^{1/2}} & T < T_c \end{cases}$$

divergiert algebraisch für $T \rightarrow T_c \pm 0$