

Übungsblatt Nr. 10 zur Theorie F (Statistische Physik)

- 1 Molekularfeldtheorie des Antiferromagneten:** Das *antiferromagnetische* Heisenberg-Modell für N Spins der Länge S auf einem Gitter ist gegeben durch den Hamilton-Operator

$$H = \frac{J}{2\hbar^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=(\text{n.N. } i)} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{B}{\hbar} \sum_{i=1}^N S_i^z, \quad (\text{n.N. } i) \equiv \text{nächster Nachbar von } i, \quad (1)$$

i, j bezeichnen Gitterplätze. Die Austauschenergie $J > 0$ wirkt nur auf benachbarte Spins, B ist ein äußeres, homogenes Magnetfeld (in Einheiten der Energie gemessen). Für die Spinoperatoren $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ gilt $\mathbf{S}_i^2 = \hbar^2 S(S+1)$, $[\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_j]_{i \neq j} = 0$. Es soll das thermodynamische Variationsverfahren (Vorlesung Kapitel 4.5) angewendet werden, mit einem effektiven Hamilton-Operator

$$H^{eff} = -\frac{1}{\hbar} \sum_{i=1}^N (B + \bar{B}_i) S_i^z$$

Die Molekularfelder $\bar{B}_i$ sind als Variationsparameter aufzufassen, B ist das äußere Magnetfeld aus (1).

- a) Berechnen Sie zunächst mit dem effektiven Hamilton-Operator die Ausdrücke

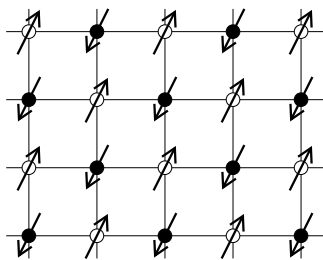
$$Z^{eff}, \quad \langle S_i^z \rangle, \quad \langle \mathbf{S}_i \rangle, \quad \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle_{i \neq j},$$

$$\text{wobei } i, j = \text{beliebig}, \quad Z^{eff} = \text{Tr}[e^{-\beta H^{eff}}], \quad \langle \dots \rangle = \frac{1}{Z^{eff}} \text{Tr}[e^{-\beta H^{eff}} \dots]$$

- b) Berechnen Sie damit die verallgemeinerte freie Energie

$$\tilde{F}(T, B, \{\bar{B}_i\}) = \langle H - H^{eff} \rangle - k_B T \ln(Z^{eff})$$

- c) Der Einfachheit halber betrachten wir im Folgenden ein Quadratgitter in der Ebene,



$$\begin{aligned} \circ &= \text{Gitterplatz} \in \mathcal{A} \\ \bullet &= \text{Gitterplatz} \in \mathcal{B} \\ \text{---} &= J \end{aligned}$$

das in zwei Untergitter $\mathcal{A}$ und $\mathcal{B}$ aufgeteilt wird. $\mathcal{A}$ und $\mathcal{B}$ enthalten jeweils $N/2$ Gitterplätze. Für $J > 0$ ist eine Spinkonfiguration wie abgebildet zu erwarten (der sog. Néel-Zustand). Wir nehmen daher an, daß

$$\bar{B}_i = \begin{cases} \bar{B}_A & \text{für } i \in \mathcal{A} \\ \bar{B}_B & \text{für } i \in \mathcal{B} \end{cases} \quad \text{mit } \bar{B}_A \neq \bar{B}_B.$$

Spezialisieren Sie die verallgemeinerte freie Energie auf diesen Fall; das Ergebnis ist von der Form

$$\tilde{F}(T, B, \bar{B}_A, \bar{B}_B) = \frac{N}{2} [4J \bar{m}_A \bar{m}_B + (\bar{B}_A \bar{m}_A + \bar{B}_B \bar{m}_B) - k_B T \ln(Z_A) - k_B T \ln(Z_B)]$$

mit den Magnetisierungen der Untergitter: $\bar{m}_A = \frac{1}{\hbar} \langle S_i^z \rangle_{i \in \mathcal{A}}$, $\bar{m}_B = \frac{1}{\hbar} \langle S_i^z \rangle_{i \in \mathcal{B}}$.

Bestimmen Sie dann aus der Bedingung, daß $\tilde{F}$ stationär sein soll, die Selbstkonsistenz-Gleichungen für $\overline{B}_A(T, B)$ und $\overline{B}_B(T, B)$. Wie hängen die Molekularfelder $\overline{B}_A$, $\overline{B}_B$ mit $\overline{m}_A$, $\overline{m}_B$ zusammen?

- d)** Das äußere Magnetfeld sei null, $B = 0$. Zeigen Sie (z.B. graphisch), daß unterhalb einer Temperatur T_N eine spontane Untergittermagnetisierung existiert: $T < T_N \rightarrow \overline{m} \neq 0$, mit $\overline{m}_A = \overline{m}$, $\overline{m}_B = -\overline{m}$. Zeigen Sie auch, daß T_N durch $k_B T_N = \frac{4}{3} S(S+1)J$ gegeben ist. (Für $T \approx T_N$ ist $\overline{B}_A \approx 0$, $\overline{B}_B \approx 0 \Rightarrow \overline{m}$ entwickeln.)

- e)** Jetzt sei $B \neq 0$. Die homogene Suszeptibilität pro Gitterplatz ist gegeben durch

$$\chi(T) = \frac{1}{2} [\chi_A(T) + \chi_B(T)] \quad , \quad \chi_A(T) = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{\partial \overline{m}_A}{\partial B} \quad , \quad \chi_B(T) = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{\partial \overline{m}_B}{\partial B}$$

Es soll $\chi(T)$ für $T > T_N$ berechnet werden: Zeigen Sie zunächst, daß mit den Selbstkonsistenz-Gleichungen für $\overline{B}_A$, $\overline{B}_B$ aus **c)** folgt:

$$\chi_A = \chi_0 [1 - 4J \chi_B] \quad , \quad \chi_B = \chi_0 [1 - 4J \chi_A] \quad , \quad \chi_0 = \frac{S(S+1)}{3 k_B T} \quad \text{für} \quad T > T_N .$$

Bestimmen Sie $\chi(T)$, und vergleichen Sie das Ergebnis mit dem *ferromagnetischen* Heisenberg-Modell (Vorlesung).

— Besprechung in den Übungsgruppen am Dienstag, 03.07.07 —