Übungen zur Theoretischen Physik F SS 08

Prof. Dr. P. Wölfle
Dr. M. Greiter

Blatt 10
Besprechung 24.06.08

---

1. Molekularfeldtheorie des Antiferromagneten (10 Punkte)

Das *anti*ferromagnetische Heisenberg-Modell für N Spins der Länge S auf einem Gitter ist gegeben durch den Hamilton-Operator

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

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

$$\mathbf{S}_i^2 = \hbar^2 S(S+1), \quad [\,\mathbf{S}_i\,,\,\mathbf{S}_j\,]\Big|_{i\neq j} = 0.$$

Es soll das thermodynamische Variationsverfahren (Vorlesung Kapitel 4.5) angewendet werden, mit einem effektiven Hamilton-Operator

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

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

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

$$Z^{\text{eff}}, \langle S_i^z\rangle, \langle \mathbf{S}_i\rangle, \langle \mathbf{S}_i\mathbf{S}_j\rangle\Big|_{i\neq j} \text{ für beliebige} i, j$$

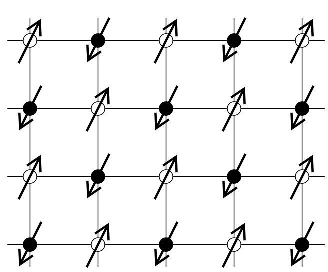
wobei

$$Z^{\text{eff}} = \mathrm{Tr}[\,e^{-\beta H^{\text{eff}}}\,], \quad \langle\ldots\rangle = \frac{1}{Z^{\text{eff}}}\mathrm{Tr}[\,e^{-\beta H^{\text{eff}}}\;\ldots\,]$$

(b) Berechnen Sie damit die verallgemeinerte freie Energie

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

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



$\circ$ = Gitterplatz $\in \mathcal{A}$
$\bullet$ = Gitterplatz $\in \mathcal{B}$
—— = J

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

$$\overline{B}_i = \begin{cases} \overline{B}_\mathcal{A} & \text{für} \quad i \in \mathcal{A} \\ \overline{B}_\mathcal{B} & \text{für} \quad i \in \mathcal{B} \end{cases}$$

mit $\overline{B}_\mathcal{A} \neq \overline{B}_\mathcal{B}$.

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

$$\widetilde{F}(T, B, \overline{B}_\mathcal{A}, \overline{B}_\mathcal{B}) = \frac{N}{2}\left[\, 4J\, \overline{m}_\mathcal{A}\overline{m}_\mathcal{B} + (\overline{B}_\mathcal{A}\overline{m}_\mathcal{A} + \overline{B}_\mathcal{B}\overline{m}_\mathcal{B}) - k_B T\, \ln(Z_\mathcal{A}) - k_B T\, \ln(Z_\mathcal{B})\,\right]$$

mit den Magnetisierungen der Untergitter: $\overline{m}_\mathcal{A} = \frac{1}{\hbar}\langle S_i^z\rangle\big|_{i\in\mathcal{A}}$, $\overline{m}_\mathcal{B} = \frac{1}{\hbar}\langle S_i^z\rangle\big|_{i\in\mathcal{B}}$.

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

(d) Das äußere Magnetfeld sei zunächst $B = 0$. Zeigen Sie (z.B. graphisch), daß unterhalb einer Temperatur T_N eine spontane Untergittermagnetisierung existiert: $T < T_N \rightarrow \overline{m} \neq 0$, mit $\overline{m}_\mathcal{A} = \overline{m}$, $\overline{m}_\mathcal{B} = -\overline{m}$. 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 $\overline{B}_\mathcal{A} \approx 0$, $\overline{B}_\mathcal{B} \approx 0 \Rightarrow \overline{m}$ entwickeln.)

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

$$\chi(T) = \frac{1}{2}[\chi_\mathcal{A}(T) + \chi_\mathcal{B}(T)], \quad \chi_\mathcal{A}(T) = \lim_{B\to 0}\frac{\partial \overline{m}_\mathcal{A}}{\partial B}, \quad \chi_\mathcal{B}(T) = \lim_{B\to 0}\frac{\partial \overline{m}_\mathcal{B}}{\partial B}.$$

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

(je 2 Punkte)