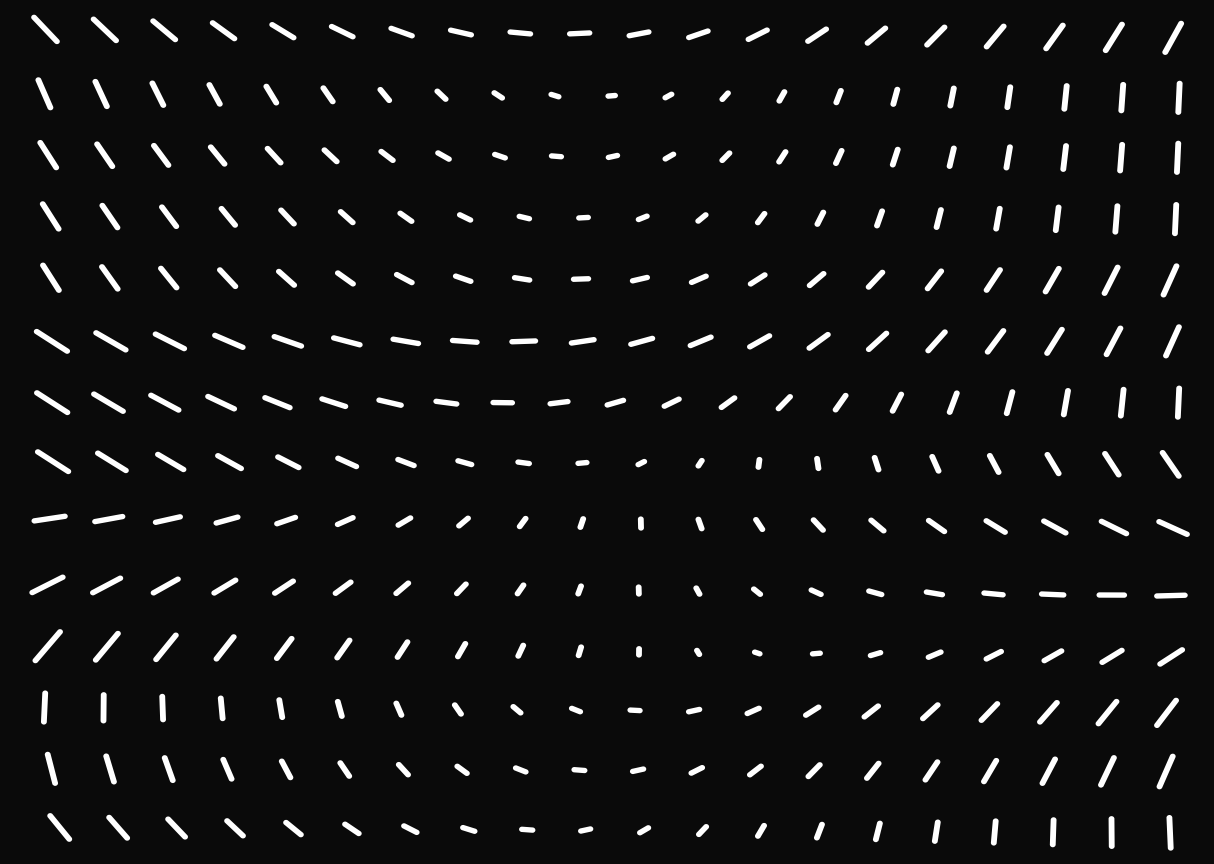
Statistische Physik Theo Fb

Th. Schwetz-Mangold (KIT SS2021)

VO 13: Spinsystem mit Wechselwirkung,
Ferromagnetismus



Ferromagnetismus

Wechselwirkung zwischen Spins
- magn. Dipolwechselw. vernachlässigbar
- Coulomb WW zw. Elektronen und Austauschsymmetrie (Pauli-Prinzip)

illustriere WW an zwei Elektronen:

Ortswellenfunktion $\phi_a(\vec{r}_1)$, $\phi_b(\vec{r}_2)$
Spinzustand: $|S, S_z\rangle$

mit $S=0$: antisym.
$S=1$: symmetrisch

⇒ siehe V04 Ortho-/Parawasserstoff

Elektronen sd. Fermionen ⇒
gesamt-Wellenfunktion muss antisymmetrisch sein:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \phi_a(\vec{r}_1)\phi_b(\vec{r}_2) \pm \phi_a(\vec{r}_2)\phi_b(\vec{r}_1) \right\} \; \begin{matrix} |0\,0\rangle \\ |1\,s_z\rangle \end{matrix}$$

mit $\langle \phi_a | \phi_b \rangle \ll 1$

Coulomb-Energie:

$$E_c = \langle \Psi | \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} | \Psi \rangle =$$

$$= \underbrace{\int d^3r_1 \int d^3r_2 \; |\phi_a(\vec{r}_1)|^2 |\phi_b(\vec{r}_2)|^2 \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}_{I_0}$$

$$\pm \underbrace{\int d^3r_1 \int d^3r_2 \; \phi_a(\vec{r}_1)\phi_b(\vec{r}_1)\phi_a^*(\vec{r}_2)\phi_b^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}_{I/2 \; \cdots \text{„Austauschintegral“}}$$

$$E_c = I_0 \pm \frac{I}{2} \quad \text{für} \quad \begin{matrix} S=0 \\ S=1 \end{matrix}$$

$I \geq 0$, abh. v. Überlapp d. Wellenfkt.

$\Rightarrow$ Konsequenz d. FO-Statistik

Spin-Operatoren:

$$\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}_a + \hat{\vec{S}}_b$$

$$\langle \hat{\vec{S}}^2 \rangle = \langle \hat{\vec{S}}_a^2 \rangle + \langle \hat{\vec{S}}_b^2 \rangle + 2 \langle \vec{S}_a \cdot \vec{S}_b \rangle$$

$\langle \hat{\vec{S}}^2 \rangle \to S(S+1) \to S = 0, 1$

$\langle \hat{\vec{S}}_a^2 \rangle + \langle \hat{\vec{S}}_b^2 \rangle \to S_a(S_a+1) + S_b(S_b+1) \to 2 \cdot \frac{3}{4}$ mit $S_a = S_b = \frac{1}{2}$

$$\Rightarrow \langle \hat{\vec{S}}_a \cdot \hat{\vec{S}}_b \rangle = \frac{1}{2} S(S+1) - \frac{3}{4} = \begin{cases} -\frac{3}{4} & S = 0 \\ \frac{1}{4} & S = 1 \end{cases}$$

$$E_C = I_0 - I \left(\langle \hat{\vec{S}}_a \cdot \hat{\vec{S}}_b \rangle + \frac{1}{4} \right)$$

- sehr vereinfacht: nur 2 Elektronen
→ WW zw. Elektr. und Ionen im Kristall

Heisenberg-Modell

$$H = 2\sum_i \mu_B \hat{\vec{S}}_i \cdot \vec{B} - I \sum_{\{i,j\}} \hat{\vec{S}}_i \cdot \hat{\vec{S}}_j$$

$\{i,j\}$: Nachbarpaare

für $\hat{\vec{S}}_i \cdot \hat{\vec{S}}_j \to \hat{S}_{zi} \cdot \hat{S}_{zj}$: Ising-Modell

$\Rightarrow$ UE

Weisssche Näherung

$$\sum_{\{ij\}} \hat{\vec{S}}_i \hat{\vec{S}}_j \approx \sum_i \hat{\vec{S}}_i \cdot \nu \overline{\vec{S}}$$

Anzahl d. Nachbarn z.B.: $\nu = 6$ für kubisches Gitter

statist. Mittel des QM Erwartungswert

$\to$ „Molekularfeldnäherung"

$$H \to H_{eff} = 2\sum_i \mu_B \hat{\vec{S}}_i \cdot \underbrace{\left(\vec{B} - \frac{\nu I \vec{S}}{2\mu_B}\right)}_{\equiv \vec{B}_{eff} = \vec{B} + W\vec{M}}$$

Magnetisierung:

$$\vec{M} = g\vec{\mu} = -2g\mu_B \vec{S} \propto \vec{B}$$

$$W = \frac{\nu I}{4 g \mu_B^2} = \frac{\text{Austausch WW}}{\text{magn. WW}}$$

Abschätzung: $I \sim 0.1\,eV$, $\nu = 6$, $g \approx \frac{1}{(3\text{Å})^3}$

$\Rightarrow \underline{W \sim 10^3}$ Austausch-WW viel stärker als magnet. WW

H_{eff} identisch zu H des idealen Spinsystems mit $\vec{B} \to \vec{B}_{eff}$ V012

$\to$ Ergebn. d. idealen Spinsyst. übernehmen

Magnetisierung

sei $\vec{B} \parallel$ z-Richt. $\Rightarrow \vec{M} = M \vec{e}_z$

V012

$$M = M_0 \tanh\left(\frac{\mu_B B_{eff}}{kT}\right)$$

$$= M_0 \tanh\left[\beta \mu_B (B + WM)\right] \quad (**)$$

implizite Gl. für $M(B,T)$

Grenzfälle

-) $B \gg WM$, $\frac{\mu_B B}{kT} \gg 1$ (starkes B-Feld)

$$M \approx M_0 \left(1 - 2e^{-2\beta\mu_B B}\right)$$

$\Rightarrow$ für $M \approx M_0 = g\mu_B$ alle Spins ausgerichtet

•) $\underline{M \ll M_0}$:

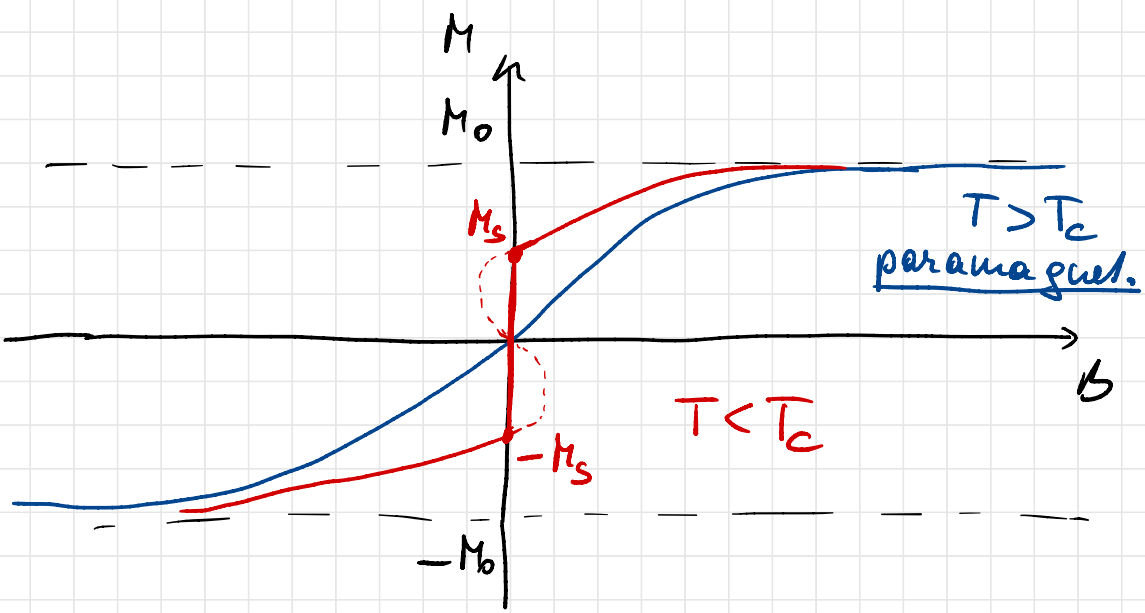
$$\beta \mu_B (B + WM) = \operatorname{arctanh} \frac{M}{M_0} \approx \frac{M}{M_0} + \frac{1}{3}\left(\frac{M}{M_0}\right)^3 + \dots$$

nach B auflösen

$$B = W\left(\frac{T}{T_c} - 1\right) M + \frac{kT}{3\mu_B}\left(\frac{M}{M_0}\right)^3 \qquad (*)$$

mit $kT_c = \mu_B^2 \varrho W = \frac{\nu I}{4} \sim 10^3\ kK$

Austausch-WW



für $T > T_c$: beide Terme in (*) gleiches Vorzeichen

$\Rightarrow M \to 0$ für $B \to 0$: paramagn. Verhalten

für $T < T_c$: 3 Lösungen für M bei geg. B

aber: $\vec{M} \propto \vec{B} \Rightarrow$ M gleiches Vorzeichen wie B

$\Rightarrow$ M_s: spontane Magnetisierung

endliches M bei $B = 0$

$\Rightarrow$ Ferromagnetismus

$\vec{B} = 0$: keine Richtung ausgezeichnet

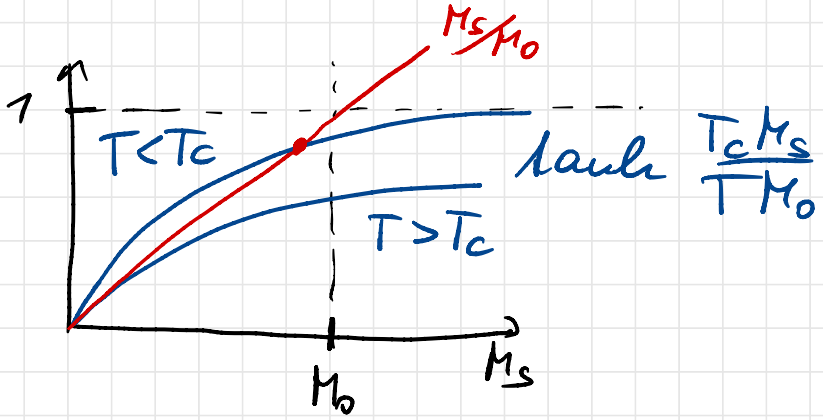
alle Richtungen von $\vec{M}_s$ möglich

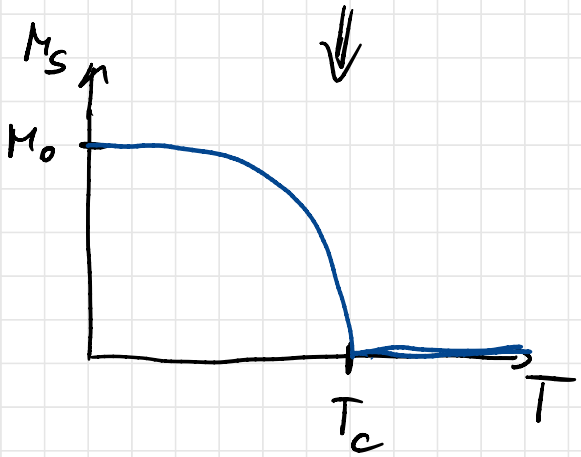
$\Rightarrow -M_s \leq \vec{e}_z \cdot \vec{M}_z \leq M_s$

$\Rightarrow$ für $B = 0$: alle Lsg. zw. $-M_s$ u. M_s mögl.!

M_S aus (**):

$$\frac{M_S}{M_0} = \tanh \frac{T_c M_S}{T M_0}$$





Phasenübergang:

M_S ... Ordnungs-parameter

↓

kontinuierlich bei T_c

⇒ Phasenüberg. 2. Ordnung

vgl. $N_0(T)$ bei id. Bosegas

magn. Suszeptibilität:

$$\chi_m = \left(\frac{\partial B}{\partial M}\right)_T$$

Fall: $B \to 0$, $T \geq T_c$ (*)

$$\chi_m = \frac{T_c/W}{T - T_c} = \frac{M_0 \mu_B}{k(T - T_c)}$$

Curie-Weiss-Gesetz

vgl. Curie-Gesetz $\chi_m \approx \frac{M_0 \mu_B}{kT}$ (paramagn.)

für $T \to T_c$: χ_m singulär

beliebig schwaches $\vec{B} \Rightarrow$ endliche Änderung von $\vec{M}$

$T < T_c$: 3-dim: jede Richt. von $\vec{M}_s$ für $B = 0$ gleichberechtigt

bel. schw. $\vec{B} \Rightarrow \vec{M}_s \parallel \vec{B}$: χ_m unendl.

Weisssche Bezirke:

Eisen: $T_c \approx 1041\,K$

bei $T \ll T_c$: Bezirke mit unterschiedl. Richtung von $\vec{M}_s$

$\Rightarrow \langle \vec{M} \rangle \approx 0$

äußeres Magnetfeld: Ausrichtung $\vec{M}_s$

für $B \to 0$: bleibt Ausricht. $\Rightarrow$ Permanentmagneten

Freie Energie – spontanen / expliziten Symmetriebrechung

thermodyn. Pot. als Fkt: V, T, B

$\rightarrow$ freie Energie (V = const.)

$$dE = dE_0 - VM\,dB$$

(dE_0: alle Beiträge ohne B)

$$\rightarrow dF = dF_0 - VM\,dB$$

$$= dF_0 - V\,d(BM) + VB\,dM$$

$$\Rightarrow F = F_0 - VBM + V\int B\,dM$$

Fall $M \ll M_0$, $T \sim T_c \Rightarrow B(M)$ aus (*)

$$\mathcal{F}(T,B,M) = F_0(T) - VBM + \frac{VW}{2}\frac{T-T_c}{2}M^2 + \frac{Vk_BT}{12\mu_B}\frac{M^4}{M_0^3}$$

$$= F_0(T) + V\left[a(T-T_c)M^2 + uM^4 - MB\right]$$

- $a, u \approx$ const. in der Nähe von T_c
- allg. Form d. freien Energie um Phasenüberg. zu beschreiben (Landau-Ginzburg)

•) im Gleichgewicht: $F(T, B)$
mit $M(B, T)$

hier: B, T und M als unabh. Param.

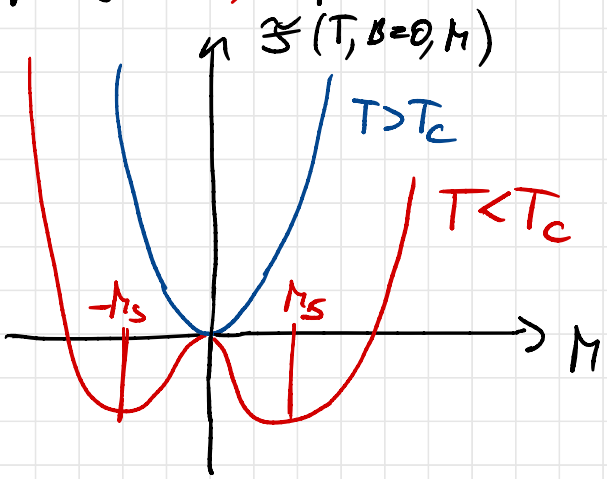
$\mathfrak{F}$ ... freie Energie nicht im Gleichgew.

im Gleichgew. $\mathfrak{F} \rightarrow$ minimal

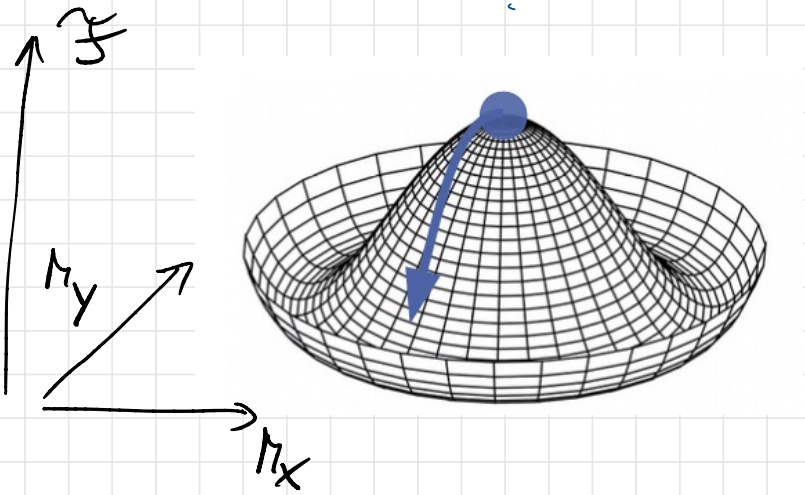
$$\left(\frac{\partial \mathfrak{F}}{\partial M}\right)_{T,B} = 0 \Rightarrow M(B,T)$$

↓ daraus folgt (*) für ↑

$B = 0$



2-dim Fall



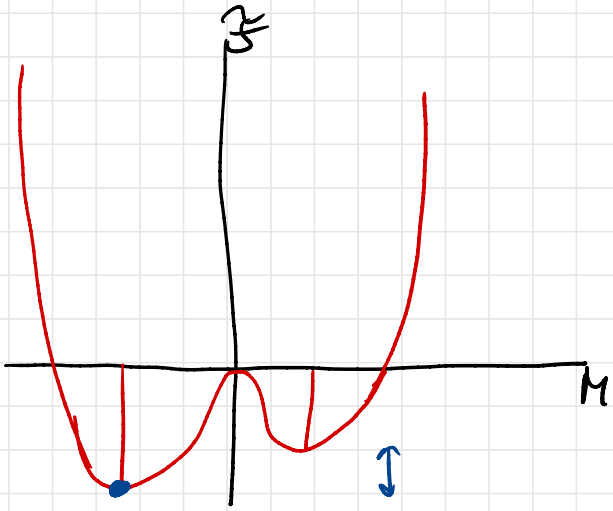
alle Richtungen von $\vec{m}$ im Minimum gleichberechtigt

[im Kristall: 3-dimensional]

Grundzust. bricht Rotationssym.

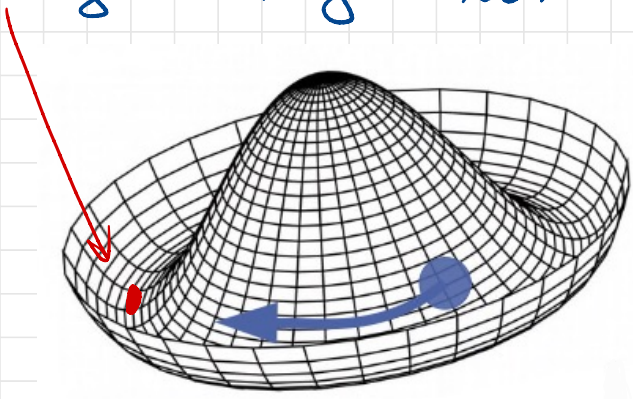
Spontane Symmetriebrechung

$B \neq 0$



Entartung d. Minima durch linearen Term in M aufgehoben

externes Feld gibt bevorzugte Richtung d. Magnetisierung vor



⇒ explizite Symmetriebrechung

- Higgsteilchen in Elementarteilchenphysik

- hypothetisches Teilchen Axion
  (möglicher Kandidat f. dunkle Materie)

$\Rightarrow$ UE