Universität Karlsruhe (TH)
Research University • founded 1825

Karlsruhe Institute of Technology

Sommer-Semester 2009

Theoretische Physik F
Statistische Physik

Dozent: Alexander Shnirman
Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Mi 11:30-13:00, Lehmann Raum 022, Geb 30.22
Fr 09:45-11:15, Lehmann Raum 022, Geb 30.22

http://www-tkm.physik.uni-karlsruhe.de/lehre/theoF.SS09/

Spin-Modelle mit Wechselwirkung

Lokalisierte magnetische Momente werden durch Spin-Operatoren beschrieben: $\hat{\boldsymbol{S}} = (\hat{S}^x, \hat{S}^y, \hat{S}^z)^{\mathrm{t}}$

Spin-Algebra: $\left[\, \hat{S}^\alpha \,,\, \hat{S}^\beta \,\right] = i\,\hbar\,\epsilon^{\alpha\beta\gamma}\,\hat{S}^\gamma$

nützlich: Leiter-Operatoren $\hat{S}^\pm = \hat{S}^x \pm i\hat{S}^y$

lokaler Hilbert-Raum besteht aus $(2s+1)$ Zuständen $|s, s_z\rangle$

$-s \leq s_z \leq s$

$$\hat{S}^z\,|s, s_z\rangle = \hbar s_z\,|s, s_z\rangle$$

$$\hat{\boldsymbol{S}}^2\,|s, s_z\rangle = \hbar^2 s(s+1)\,|s, s_z\rangle$$

Spin-Modelle mit Wechselwirkung

Spinoperatoren lassen sich durch Matrizen darstellen:

Spin 1/2: “Pauli-Matrizen” $\hat{\boldsymbol{S}} = \frac{\hbar}{2}(\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y, \hat{\sigma}^z)^{\mathrm{t}}$

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \qquad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \qquad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Spin 1 - Matrizen

$$S^+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} , \qquad S^- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} , \qquad S^z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Spin-Modelle mit Wechselwirkung

magnetisches Moment der Spins: $\boldsymbol{\mu} = \gamma \boldsymbol{S}$

gyromagnetisches Verhältnis $\gamma = \frac{ge}{2mc}$

angelegtes Magnetfeld führt zum Energiebeitrag

$$H = -\gamma\, \boldsymbol{B} \cdot \hat{\boldsymbol{S}} \qquad \text{(Zeeman-Energie)}$$

Wechselwirkungen zwischen den Spins

(a) Dipol-Dipol-Wechselwirkung $\sim 10^{-6}\mathrm{eV}$

(b) Austausch-Wechselwirkung einige eV

Spin-Modelle mit Wechselwirkung

magnetisches Moment der Spins: $\boldsymbol{\mu} = \gamma \boldsymbol{S}$

gyromagnetisches Verhältnis $\gamma = \frac{ge}{2mc}$

angelegtes Magnetfeld führt zum Energiebeitrag

$$H = -\gamma \, \boldsymbol{B} \cdot \hat{\boldsymbol{S}}$$ (Zeeman-Energie)

Wechselwirkungen zwischen den Spins

(a) Dipol-Dipol-Wechselwirkung $\sim 10^{-6}\mathrm{eV}$

(b) Austausch-Wechselwirkung einige eV

Die Austauschwechselwirkung

2 Fermionen mit Spin 1/2:

$$H = A\,\boldsymbol{S}_a \cdot \boldsymbol{S}_b$$

	S	m_S	Spin-Eigenzustand $\chi_{S,T}$	$\mathbf{S}^a\cdot\mathbf{S}^b$	
Triplett (T)	1	1	$\lvert\uparrow\uparrow\rangle$	$\frac{1}{4}$	symmetrisch
	1	0	$\frac{\lvert\uparrow\downarrow\rangle+\lvert\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{4}$	
	1	–1	$\lvert\downarrow\downarrow\rangle$	$\frac{1}{4}$	
Singulett (S)	0	0	$\frac{\lvert\uparrow\downarrow\rangle-\lvert\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$	$-\frac{3}{4}$	anti-symmetrisch

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2)+\psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)\right]\chi_S$$

$$\psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2)-\psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)\right]\chi_T$$

Die Austauschwechselwirkung

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) + \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)\right]\chi_S \qquad E_S = \int \psi_S^* \hat{H} \psi_S \, d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

$$\psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) - \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)\right]\chi_T \qquad E_T = \int \psi_T^* \hat{H} \psi_T \, d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

$$E_S - E_T = 2 \underbrace{\int \psi_a^*(\mathbf{r}_1)\psi_b^*(\mathbf{r}_2)\, \hat{H}\, \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)\, d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}_{\equiv J}$$

Dieses Integral ist wegen der Coulomb-Abstoßung $\neq 0$

und heißt **Austauschintegral** $J = \frac{1}{2}(E_S - E_T)$

$\rightsquigarrow$ eff.Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \frac{1}{4}(E_S + 3E_T) - (E_S - E_T)\ \boldsymbol{S}_a \cdot \boldsymbol{S}_b$$

$$\Rightarrow H_{ab} = -2\,J\ \boldsymbol{S}_a \cdot \boldsymbol{S}_b$$

N Spins auf einem beliebigen Gitter:

Heisenberg Modell

$$\mathcal{H}_{\text{Heisenberg}} = -\sum_{i,j} J_{ij}\, \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j - \gamma \boldsymbol{B} \sum_i \boldsymbol{S}_i$$

- $J > 0$: Parallele Ausrichtung favorisiert = Ferromagnetismus
- $J < 0$: Antiparallele Ausrichtung favorisiert = Antiferromagnetismus
  => Frustration möglich !!!
- J_{ij} fällt schnell ab mit dem Abstand $|i - j|$

Verallgemeinerung:

$$H_{\text{XYZ}} = \sum_{i,j} \left(J_x S_i^x S_j^y + J_y S_i^y S_j^y + J_z S_i^z S_j^z \right)$$

(a) XY Modell: $J_x = J_y = J \;, \quad J_z = 0$

(b) Ising Modell: $J_x = J_y = 0 \;, \quad J_z = J$

N Spins auf einem beliebigen Gitter:

Heisenberg Modell

$$\mathcal{H}_{\text{Heisenberg}} = -\sum_{i,j} J_{ij}\, \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j - \gamma \boldsymbol{B} \sum_i \boldsymbol{S}_i$$

- $J > 0$: Parallele Ausrichtung favorisiert = Ferromagnetismus
- $J < 0$: Antiparallele Ausrichtung favorisiert = Antiferromagnetismus
  => Frustration möglich !!!
- J_{ij} fällt schnell ab mit dem Abstand $|i - j|$

Verallgemeinerung:

$$H_{\text{XYZ}} = \sum_{i,j} \left(J_x S_i^x S_j^y + J_y S_i^y S_j^y + J_z S_i^z S_j^z \right)$$

(a) XY Modell: $J_x = J_y = J \;, \quad J_z = 0$

(b) Ising Modell: $J_x = J_y = 0 \;, \quad J_z = J$

Ising Modell in einer Dimension

$$H = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - \gamma B \sum_i \sigma_i$$

$$h = \frac{\gamma B}{kT}$$

$$g = \frac{J}{kT}$$

kanonische Zustandssumme:

$$Z_N(T,B) = \sum_{\sigma_1}^{-1} \dots \sum_{\sigma_N}^{-1} e^{-\beta H_N} = \sum_{\sigma_i=1}^{-1} \prod_{i=1}^{N} \underbrace{e^{g\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{1}{2}h(\sigma_i+\sigma_{i+1})}}_{=T(\sigma_i,\sigma_{i+1})}$$

mit der Transfermatrix $T(\sigma,\sigma') = \begin{pmatrix} e^{g+h} & e^{-g} \\ e^{-g} & e^{g-h} \end{pmatrix}, \quad (\sigma = \pm 1)$

exakte Lösung:

$$Z_N(T,B) = \lambda_1^N + \lambda_2^N = \lambda_1^N \left(1 + \mathcal{O}(e^{-N})\right) \xrightarrow{N\to\infty} \lambda_1^N$$

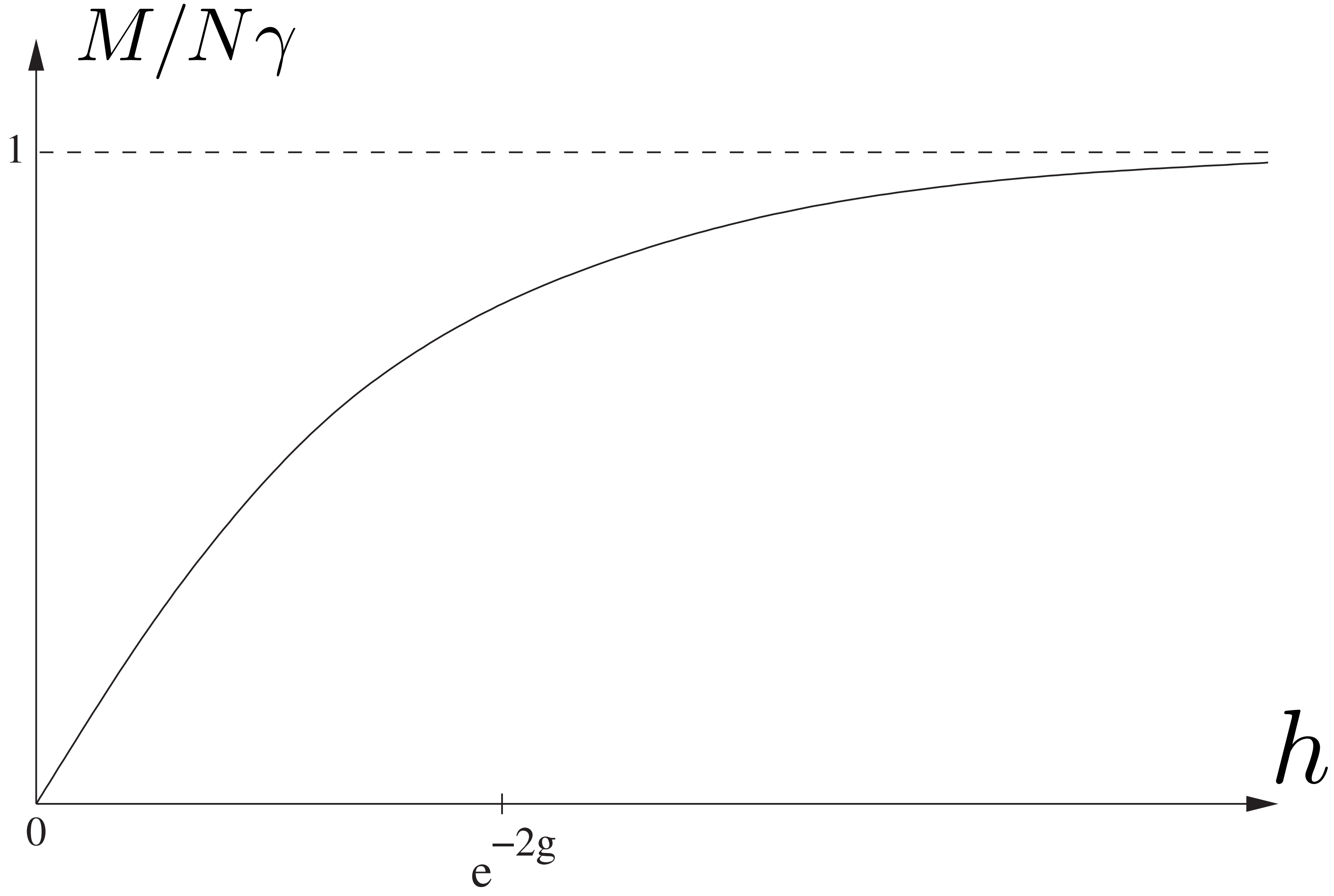
mit den Eigenwerten λ_i der Transfermatrix

$h = \frac{\gamma B}{kT}$ # Ising Modell in einer Dimension $g = \frac{J}{kT}$

Wir betrachten den thermodyn. Limes:

Freie Energie: $$F(T, B, N) = -kTN \ln \lambda_1$$

Magnetisierung: $$M(T, B, N) = N\gamma \frac{\sinh(h)}{\sinh(h)^2 + e^{-4g}}$$



Für endliches *T* gibt es keine spontan geordnete Phase im 1D-Ising Modell !!!

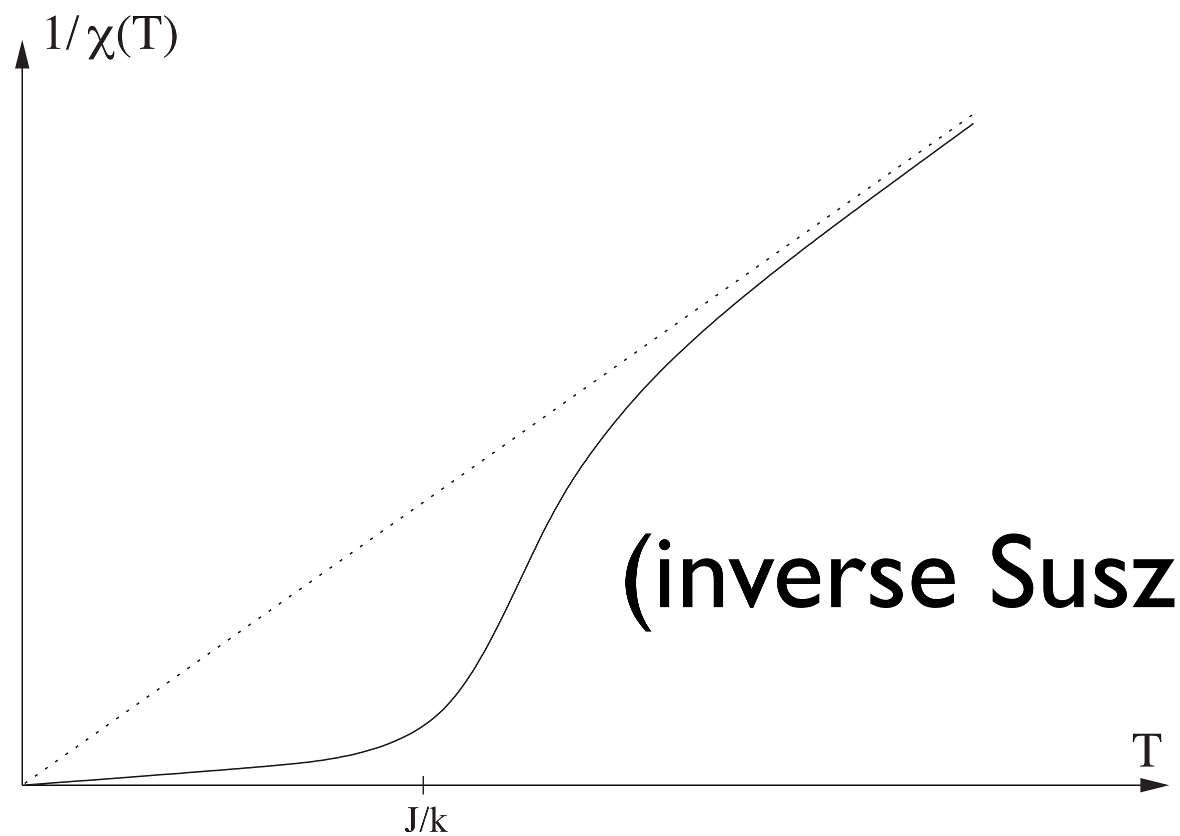
Für *T=0* existiert spontane Ordnung!!!

$h = \frac{\gamma B}{kT}$

Ising Modell in einer Dimension

$g = \frac{J}{kT}$

Susceptibilität: $$\chi(T, B=0, N) = \frac{\partial M}{\partial B}\bigg|_{B=0} = \frac{N\gamma^2}{kT} e^{2g}$$



(inverse Suszeptibilität)

hohe *T*: $$\chi \approx \frac{\alpha}{T}\left(1 + \frac{2J}{kT} + \dots\right) = \frac{\alpha}{T} + \dots$$ “Curie-Weiss”

Ausblick: Heisenberg Modell

Annahme: klassischer Neel-Zustand ist Grundzustand

$$\mathcal{H}_{\text{Heisenberg}} = -J \sum_{i,j} \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j$$

$$\boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j = S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^j + S_i^z S_j^z = \frac{1}{2}\Big(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+\Big) + S_i^z S_j^z$$

$J > 0: \quad \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j \; |\uparrow_i \uparrow_j\rangle = \frac{1}{4} |\uparrow_i \uparrow_j\rangle$ “Ferromagnet” ist GZ

$J < 0: \quad \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j \; |\uparrow_i \downarrow_j\rangle = \frac{1}{2} |\downarrow_i \uparrow_j\rangle - \frac{1}{4} |\uparrow_i \downarrow_j\rangle$

klassischer Neel-Zustand ist nicht einmal Eigenzustand

$|\text{Néel}\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$

Grundzustand ist nicht-trivialer Quantenzustand !!!