Übungen zur Theoretischen Physik Fb SS 18

Prof. Dr. A. Shnirman
PD Dr. B. Narozhny

Blatt 4
Lösungsvorschlag

---

1. Magnonen im ferromagnetischen Heisenberg-Modell:

(a) Die Bewegungsgleichungen sind gegeben durch

$$\frac{dS_i^\alpha}{dt} = i\left[\mathcal{H}, S_i^\alpha\right].$$

Den Kommutator berechnen wir für jeden Term der Summe als

$$\left[S_j^\beta S_k^\beta, S_i^\alpha\right] =$$

$$= S_j^\beta S_k^\beta S_i^\alpha - S_i^\alpha S_j^\beta S_k^\beta = S_j^\beta S_k^\beta S_i^\alpha - S_j^\beta S_i^\alpha S_k^\beta + S_j^\beta S_i^\alpha S_k^\beta - S_i^\alpha S_j^\beta S_k^\beta =$$

$$= iS_j^\beta \delta_{ik}\epsilon_{\beta\alpha\gamma} S_i^\gamma - i\delta_{ij}\epsilon_{\beta\alpha\gamma} S_i^\gamma S_k^\beta.$$

Für die ganze Summe finden wir

$$\left[\sum_{j\neq k} J_{jk} S_j^\beta S_k^\beta, S_i^\alpha\right] = i\sum_{j,j\neq i} J_{ji}\epsilon_{\beta\alpha\gamma} S_j^\beta S_i^\gamma + i\sum_{k,k\neq i} J_{ik}\epsilon_{\beta\alpha\gamma} S_i^\gamma S_k^\beta =$$

$$= -i\sum_{j,j\neq i} J_{ij}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\left(S_j^\beta S_i^\gamma + S_i^\gamma S_j^\beta\right) = -2i\sum_{j,j\neq i} J_{ij}\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_j^\beta S_i^\gamma.$$

Dann sind die Bewegungsgleichungen

$$\frac{dS_i^\alpha}{dt} = -\sum_{j,j\neq i} J_{ij}\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_j^\beta S_i^\gamma - \epsilon_{\alpha\beta\gamma} H^\beta S_i^\gamma.$$

(b) Wir nehmen an, dass

$$\langle S_i^z\rangle \approx S.$$

Dann ist die Molekularfeldnäherung

$$S_j^\beta S_i^\gamma \approx \langle S_j^\beta\rangle S_i^\gamma + S_j^\beta\langle S_i^\gamma\rangle, \qquad S_i^z \approx \langle S_i^z\rangle \approx S.$$

Betrachten wir jetzt die Bewegungsgleichungen (für $\boldsymbol{H} = 0$) der einzelnen Komponenten:

$$\frac{dS_i^x}{dt} = \sum_{j,j\neq i} J_{ij}\left(S_j^z S_i^y - S_j^y S_i^z\right) \approx S\sum_{j,j\neq i} J_{ij}\left(S_i^y - S_j^y\right),$$

$$\frac{dS_i^y}{dt} = \sum_{j,j\neq i} J_{ij}\left(S_j^x S_i^z - S_j^z S_i^x\right) \approx S \sum_{j,j\neq i} J_{ij}\left(S_j^x - S_i^x\right),$$

$$\frac{dS_i^z}{dt} = \sum_{j,j\neq i} J_{ij}\left(S_j^y S_i^x - S_j^x S_i^y\right) \approx 0.$$

Die linearisierte Bewegungsgleichungen sind

$$\frac{dS_i^x}{dt} = S \sum_{j,j\neq i} J_{ij}\left(S_i^y - S_j^y\right),$$

$$\frac{dS_i^y}{dt} = S \sum_{j,j\neq i} J_{ij}\left(S_j^x - S_i^x\right),$$

$$\frac{dS_i^z}{dt} = 0.$$

(c) Um die linearisierten Gleichungen zu lösen, führen wir erst die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ein:

$$S_i^+ = S_i^x + iS_i^y, \qquad S_i^- = S_i^x - iS_i^y.$$

Die Bewegungsgleichungen für diesen Operatoren können wir durch die Addition und die Subtraktion der obigen Bewegungsgleichungen herleiten. Für S_i^+ finden wir, z.B.:

$$\frac{dS_i^x}{dt} + i\frac{dS_i^y}{dt} = S \sum_{j,j\neq i} J_{ij}\left(S_i^y - S_j^y + iS_j^x - iS_i^x\right) = -iS \sum_{j,j\neq i} J_{ij}\left(S_i^+ - S_j^+\right).$$

Für das Modell mit Wechselwirkung der nächsten Nachbarnfinden wir die Gleichungen

$$\frac{dS_i^+}{dt} = -iSJ \sum_{\langle j\rangle_i}\left(S_i^+ - S_j^+\right),$$

$$\frac{dS_i^-}{dt} = iSJ \sum_{\langle j\rangle_i}\left(S_i^- - S_j^-\right),$$

wobei $\langle j\rangle_i$ die nächsten Nachbarn des Punktes i bezeichnet.
Jetzt führen wir die Fourier-Transformation ein

$$S_i^+ = \sum_{\mathbf{q}} S_{\boldsymbol{q}}^+ e^{i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_i - i\omega t},$$

wobei $\boldsymbol{r}_i$ der Radiusvektor des Gitterpunktes i ist.
Von der Bewegungsgleichung finden wir

$$-i\omega S_{\boldsymbol{q}}^+ = -iSJS_{\boldsymbol{q}}^+ \sum_{\langle j\rangle_i}\left[1 - e^{i\boldsymbol{q}(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)}\right].$$

Letztendlich finden wir das Spektrum

$$\omega_{\boldsymbol{q}} = SJA_{\boldsymbol{q}}, \qquad A_{\boldsymbol{q}} = \sum_{\langle j\rangle_i}\left[1 - e^{i\boldsymbol{q}(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)}\right].$$

(d) Im einfachsten Fall des dreidimensionalen kubischen Gitters hat jedes Punkt sechs nächsten Nachbarn (wir setzen die Gitterkonstante $a = 1$)

$$\boldsymbol{r}_j \quad : \quad \boldsymbol{r}_i \pm \boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{r}_i \pm \boldsymbol{e}_y, \boldsymbol{r}_i \pm \boldsymbol{e}_z.$$

Die Dispersion ist dann

$$\omega_{\boldsymbol{q}} = 2SJ\left(3 - \cos q_x - \cos q_y - \cos q_z\right).$$

Im Limes $q \to 0$ finden wir

$$\omega_{\boldsymbol{q}} \approx SJq^2.$$

Die effektive Masse finden wir vom Vergleich der Dispersion der Magnonen und der Energie eines freien Teilchen:

$$\omega_{\boldsymbol{q}} = \frac{q^2}{2m^*} \quad \Rightarrow \quad m^* = \frac{1}{2SJ}.$$

2. Molekulärfeldnäherung für Antiferromagneten:

(a) Intuitiv stellen wir uns vor, dass der antiferromagnetische Zustand besteht aus alternierenden Spins. Deswegen führen wir zwei Untergitter ein. Jeder Untergitter sei ähnlich als einen Ferromagnet. Die Spins in der zwei Untergitter sind antiparallel. Im Modell mit Wechselwirkung der náchsten Nachbarn wechselwirken nur die Spins von unterschiedlichen Untergitter.

Wir führen zwei Molekularfelder ein:

$$S_+ = \langle \sigma_+ \rangle, \qquad S_- = \langle \sigma_- \rangle.$$

Der Hamilton-Operator schreiben wir erst als ($J < 0$)

$$\mathcal{H} = \frac{|J|}{2} \sum_{\langle i_+ j_- \rangle} \sigma_{i_+} \sigma_{j_-} - H \sum_{i_+ j_-} (\sigma_{i_+} + \sigma_{j_-}),$$

wobei i_+ and j_- bezeichnen die Gitterpunkte der zwei Untergitter und $\langle i_+ j_- \rangle$ bezeichnet nächste Nachbarn.

Jedes Produkt $\sigma_{i_+} \sigma_{j_-}$ schreiben wir als

$$\sigma_{i_+} \sigma_{j_-} = \left[S_+ + \left(\sigma_{i_+} - S_+\right)\right] \left[S_- + \left(\sigma_{j_-} - S_-\right)\right] \approx S_+ \sigma_{j_-} + S_- \sigma_{i_+} - S_+ S_-.$$

In der Summe über nächsten Nachbarn finden wir

$$\sum_{\langle i_+ j_- \rangle} S_+ \sigma_{j_-} = S_+ \sum_{j_-} \sigma_{j_-} \sum_{\langle i_+ \rangle_{j_-}} = z S_+ \sum_{j_-} \sigma_{j_-},$$

wobei $\langle i_+ \rangle_{j_-}$ bezeichnet die nächsten Nachbarn vom Punkt j_- und z ist die Zahl der nächsten Nachbarn.

Letztendlich schreiben wir den Hamilton-Operator in der Molekularfeldnäherung als

$$\mathcal{H} = -\sum_{\alpha=\pm}\sum_{j_\alpha}\sigma_{j_\alpha}\left(H - H_\alpha\right) - \frac{N}{4}z|J|S_+S_-,$$

wobei N ist die Gesamtzahl des Spins ($\sum_{j_-} = N/2$) und

$$H_\alpha = \frac{1}{2}z|J|S_\alpha.$$

(b) Die Freie Enthalpie ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
G(T,H) = -T\ln Z = -T\ln\sum_{\{\sigma_i\}} e^{-E(\{\sigma_i\})/T} \\
= -\frac{N}{4}z|J|S_+S_- - T\ln\prod_{\alpha=\pm}\prod_{j_\alpha} 2\cosh\frac{H-H_\alpha}{T} \\
= -\frac{N}{2}\left[\frac{1}{2}z|J|S_+S_- + T\sum_{\alpha=\pm}\ln\left(2\cosh\frac{H-H_\alpha}{T}\right)\right].
\end{aligned}$$

(c) Jetzt finden wir das Minimum der freien Enthalpie

$$\frac{\partial G(T,H)}{\partial S_+} = 0 \quad\Rightarrow\quad S_+ = \tanh\frac{H-H_-}{T},$$

$$\frac{\partial G(T,H)}{\partial S_-} = 0 \quad\Rightarrow\quad S_- = \tanh\frac{H-H_+}{T},$$

Diese Gleichungen sind die Selbstkonsistenz-Gleichungen.

(d) Für $H = 0$ sind die Selbstkonsistenz-Gleichungen

$$S_+ = -\tanh\frac{H_-}{T}, \qquad S_- = -\tanh\frac{H_+}{T}.$$

Im kritischen Punkt sind die Molekularfelder klein. Wir entwickeln:

$$S_+ = -\frac{H_-}{T}, \qquad S_- = -\frac{H_+}{T}.$$

Die Determinante des Gleichungssystem soll Null sein:

$$\begin{vmatrix} 1 & z|J|/(2T_c) \\ z|J|/(2T_c) & 1 \end{vmatrix} = 0 \quad\Rightarrow\quad T_c = \frac{1}{2}z|J|.$$

(e) Die Suszebilität ist

$$\chi = \left.\frac{\partial M}{\partial H}\right|_{H\to 0},$$

wobei die Magnetisierung ist

$$M = -\frac{2}{N}\frac{\partial G}{\partial H}.$$

Benutzen wir jetzt die freie Enthalpie:

$$M = \sum_{\alpha=\pm} \tanh \frac{H - H_\alpha}{T} = S_+ + S_-.$$

Hier haben wir die Selbstkonsistenz-Gleichungen benutzt.
Die Suszebilität:

$$\begin{aligned}
\chi = \frac{\partial S_+}{\partial H} + \frac{\partial S_-}{\partial H} \\
&= \frac{\partial}{\partial H} \tanh \frac{H - H_+}{T} + \frac{\partial}{\partial H} \tanh \frac{H - H_-}{T} \\
&= \frac{1}{T} \left[\frac{1}{\cosh^2 \frac{H-H_+}{T}} \left(1 - T_c \frac{\partial S_+}{\partial H} \right) + \frac{1}{\cosh^2 \frac{H-H_-}{T}} \left(1 - T_c \frac{\partial S_-}{\partial H} \right) \right]
\end{aligned}$$

Jetzt benutzen wir die Identität

$$\frac{1}{\cosh^2 \frac{H-H_+}{T}} = 1 - \tanh^2 \frac{H - H_+}{T} = 1 - S_-^2,$$

und die Tatsache, dass $S_+^2 = S_-^2 = S^2$ um die Gleichung für χ zu lösen:

$$\chi = \frac{2(1 - S^2)}{T + T_c(1 - S^2)}.$$

Für $T > T_c$ haben wir $S^2 = 0$ und zwar

$$\chi(T > T_c) = \frac{2}{T + T_c}.$$

Alternativ, können wir direkt lösen. Für hohe Temperaturen können wir die Selbstkonsistenz-Gleichungen linearisieren. Dann addieren wir die zwei Gleichungen und lösen für M:

$$M = \frac{2H}{T + T_c}.$$

Deswegen,

$$\chi(T > T_c) = \frac{2}{T + T_c}.$$

Für $T < T_c$ sollen wir die Selbstkonsistenz-Gleichungen lösen um S^2 zu bestimmen.
Wir nehmen an, dass $S_+ = -S_-$. Dann haben wir die gleiche Gleichung als in der fall eines Ferromagnets:

$$S = \tanh \frac{ST_c}{T}.$$

Hier, für $T \to 0$:

$$S \approx 1 - 2e^{-ST_c/T} \quad \Rightarrow \quad S \approx 1 - 2e^{-T_c/T}.$$

Dann

$$\chi \approx \frac{4}{T} e^{-T_c/T}.$$

Für $T \to T_c - 0$:

$$S \approx \frac{ST_c}{T} - \frac{1}{3}\left(\frac{ST_c}{T}\right)^3 \quad \Rightarrow \quad S^2 \approx 3\frac{T_c - T}{T_c}.$$

Dann

$$\chi = \frac{1}{T_c} - 3\frac{T_c - T}{T_c^2}.$$