Spindynamik

quantenmechanische Formulierung

Heisenberg-Bild: $\hat{S} = \hat{S}(t)$

$$\frac{d\hat{S}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{S}\right]$$

Spin-Hamiltonian:

Spin in externem Magnetfeld:

$$\hat{H} = -\vec{m}\cdot\vec{B}$$

magnetisches Moment des Spins

$$\vec{m} = \mu_B \cdot g \cdot \vec{S}/\hbar$$

g: Landé-Faktor $\simeq 2$

μ_B: Bohr'sches Magneton $\frac{e\hbar}{2m}$

Das gyromagnetische Verhältnis, d.h. das Verhältnis zwischen magn. Moment & Drehimpuls beträgt beim Elektronenspin

$$\gamma = \mu_B\, g\, \frac{1}{\hbar} \simeq \frac{e}{m}$$

und ist damit um den Faktor $g \simeq 2$ größer als dasjenige einer klassischen rotierenden Ladung.

nun:

$$[\hat{H}, \hat{\vec{S}}] = [\gamma \hat{\vec{S}} \cdot \vec{B}, \hat{\vec{S}}]$$

$$= \gamma [\sum \hat{S}_\alpha B_\alpha, \sum_\beta \hat{S}_\beta \vec{e}_\beta]$$

$$= \gamma \sum_{\alpha\beta} B_\alpha \vec{e}_\beta \underbrace{[\hat{S}_\alpha, \hat{S}_\beta]}_{= i\hbar \sum_\delta \varepsilon_{\alpha\beta\delta} \hat{S}_\delta}$$

$$= i\hbar \sum_{\alpha\beta\delta} \varepsilon_{\alpha\beta\delta} B_\alpha \hat{S}_\delta \vec{e}_\beta$$

$$= i\hbar \quad \hat{\vec{S}} \times \vec{B}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d\hat{\vec{S}}}{dt} = -\gamma \hat{\vec{S}} \times \vec{B}}$$

vergleiche klassische Bewegungsglen

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = \vec{m} \times \vec{B}$$

das neg. Vorzeichen in der qm Gleichung trägt der neg. Ladung des Elektrons Rechnung.

Bisher: einzelner Spin

nun: viele Spins

- falls die Spins nicht miteinander wechselwirken ändert sich nichts. Dann bewegen sich alle Spins unabhängig voneinander.

- in magn. Materialien gibt es jedoch die Austausch-Wechselwirkung zwischen den Spins.

z.B. Heisenberg-Modell eines Ferromagneten

ab hier: $\hat{\vec{S}} \to \frac{1}{\hbar}\hat{\vec{S}}$

$$H = -\sum_{\langle i,j\rangle} J\, \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - g\mu_B\mu_0 \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{H}$$

$$(\vec{B} = \mu_0 \vec{H})$$

Im Grundzustand sind alle Spins parallel in Richtung des äußeren Feldes ausgerichtet.

Betrachte ein 1-dimensionales Modell

$$H = -2\sum_i J\, \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} - g\mu_B\mu_0 \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{H}$$

Grundzustand $|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow..\uparrow\rangle$

Anders als im Ising Modell ist der Zustand, bei dem <u>ein</u> Spin der Kette umgedreht wird, kein Eigenzustand des Hamilton-Operators.

betrachte dazu:

$$\vec{\hat{S}}_i \cdot \vec{\hat{S}}_{i+1} = \hat{S}_{zi} \cdot \hat{S}_{z\,i+1} + \hat{S}_{xi}\,\hat{S}_{x\,i+1} + \hat{S}_{yi}\,\hat{S}_{y\,i+1}$$

Führt man die Auf- & Absteigeoperatoren im Spinraum ein, $S^+ = \hat{S}_x + i\,\hat{S}_y$ und $S^- = \hat{S}_x - i\,\hat{S}_y$

so ergibt sich de Hamilton-Operator zu

$$H = -2J\sum_i s_z^i\, s_z^{i+1} - J\sum_i S_i^+ S_{i+1}^- - J\sum_i S_i^- S_{i+1}^+ - g\,\mu_B\,\mu_0 \sum_i S_i^z\, H\,.$$

Die Mischterme mit Produkten aus Auf- und Absteigeoperatoren haben keine Wirkung auf Paare mit parallelem Spin. Betrachte nun die Wirkung des Hamilton-Operators auf einen Zustand, in dem ein einzelner Spin umgekehrt ist:

z.B. $|\psi\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$ $\qquad N=5$

$$\Rightarrow \quad H|\psi\rangle = -2J\tfrac{1}{4}(2-2)\quad|\psi\rangle$$

2 Paare mit parallelem Spin (endl. Kette; bei p.R. 3 Paare)

2 Paare mit antiparallelem Spin

$$-J\,|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - J\,|\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$$

$$-\tfrac{1}{2}g\,\mu_B\mu_0\,(4-1)\,H\,|\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$$

$\Rightarrow$ $|\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$ ist kein Eigenzustand zu $\hat{H}$, aber die neu erzeugten Überlagerungszustände sind auch Zustände, bei denen nur 1 Spin mit umgekehrter Richtung auftritt.

$\Rightarrow$ suche Eigenzustände im Unterraum der Zustände mit $S_z = \sum s_z^i = \frac{1}{2}(N-2)$

Wir können diese Zustände durch den Gitterplatz klassifizieren, an dem der "geflippte" Spin sitzt:

$$|i\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\ldots\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\ldots\uparrow\rangle$$

i-ter Gitterplatz

betrachten wir eine 1D Kette der Länge N mit periodischen Randbedingungen, dh $|s_{N+i}\rangle = |s_i\rangle$, so besteht der Unterraum der Zustände mit Gesamtspin $S_z = \frac{1}{2}(N-2)$ aus den Zuständen $\{|i\rangle\}_{i=1,\dots N}$

In dieser Basis wirkt der Hamilton-Op. gemäß

$$\hat{H}|i\rangle = \left[-2J\tfrac{1}{4}(N-4) - \tfrac{1}{2}g\mu_B\mu_0(N-1-1)H\right]|i\rangle$$
$$- J|i-1\rangle - J|i+1\rangle$$

Alle Matrixelemente sind unabhängig vom Index i des geflippten Spins

$\Rightarrow$ der Hamiltonoperator ist periodisch mit Periode 1

$\Rightarrow$ wir können Eigenzustände in Form von Blochwellen suchen

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N} e^{ika\cdot n}|n\rangle \qquad k = \frac{2\pi}{Na}K,\ K\in\mathbb{Z}$$

es gilt:

$$H|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n e^{ikan} H|n\rangle$$
$$= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n \Big\{ e^{ikan}\left[-2\tfrac{1}{4}J(N-4) - \tfrac{1}{2}g\mu_B\mu_0(N-2)H\right]|n\rangle$$
$$- e^{ikan}J|n-1\rangle - Je^{ikan}|n+1\rangle$$
$$= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n \Big\{ e^{ikan}[\ ]|n\rangle - e^{ika}e^{ikan}J|n\rangle$$
$$- e^{-ika}e^{ikan}J|n\rangle\Big\}$$

$$= \left[\varepsilon_0 + 8 J \tfrac{1}{4} + 2 g \mu_B \mu_0 H - 2J \cos ka\right] \sum_n e^{ikan} |n\rangle$$

$\Rightarrow |k\rangle$ ist Eigenzustand zu $\hat{H}$

$$\varepsilon_0 = -2JN\tfrac{1}{4} - NJ g \mu_B \mu_0 H \tfrac{1}{2}$$

Grundzustandsenergie

$$\varepsilon_k = \varepsilon_0 + 2J + \tfrac{1}{2} 2 g \mu_B \mu_0 H - 2J \cos ka$$

$$= \varepsilon_0 + g \mu_B \mu_0 H + 2J (1 - \cos ka)$$

$$= \varepsilon_0 + g \mu_B \mu_0 H + \underbrace{2J \sin^2(\tfrac{1}{2} ka)}_{\text{lückenloses Spektrum falls } B=0}$$

- Gesamtspin der Spinwelle: $\frac{N}{2} - 1$
- die Wahrscheinlichkeit den geflippten Spin am Ort i zu finden ist $\frac{1}{N}$
- der Erwartungswert der transversalen Spin-Korrelationsfunktion

$$\langle \hat{S}_{x\,i} \hat{S}_{x\,i+1} + \hat{S}_{y\,i} \hat{S}_{y\,i+1} \rangle = \frac{1}{N} \cos(ka)$$

$\Rightarrow$ im Mittel besitzt jeder Spin eine kleine transversale Komponente von der Größe $\sqrt{\frac{1}{N}}$ und benachbarte Spins weichen in ihrer Transversalkomponente um den Winkel ka ab.

$\rightarrow$ Bild siehe z.B. google

~~http~~ iopscience.iop.org/0953-8984/10/4/001/fulltext Fig. 2

Neben der Austausch-Wechselwirkung ist für endliche oder auch inhomogene Magnete natürlich auch die klassische Dipolwechselwirkung wichtig

Wir erinnern uns:

das Feld eines magn. Dipols (im Ursprung) ist

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{3\vec{r}(\vec{m}\cdot\vec{r}) - \vec{m}r^2}{r^5}$$

Die Felder der magn. Dipole in einem Festkörper überlagern sich, so dass am Ort $\vec{r}$ das Magnetfeld

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{3(\vec{r}-\vec{r}')\,(\vec{m}(\vec{r}')\cdot(\vec{r}-\vec{r}')) - m(r')(\vec{r}-\vec{r}')^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|^5} dV$$

herrscht. Das magn. Moment am Ort $\vec{r}'$ besitzt dann die potentielle Energie

$$E_{pot} = -\vec{m}(\vec{r}) \cdot \vec{B}(\vec{r}),$$

wodurch sich die Gesamtenergie des Magneten zu

$$E^{magn} = -\frac{1}{2} \int \vec{m}(\vec{r}) \cdot \vec{B}(\vec{r})$$

ergibt, wobei der Faktor $\frac{1}{2}$ der Doppelzählung von Paaren Rechnung trägt.