

Quantentheorie des kollektiven Magnetismus

Skript zur gleichnamigen Blockvorlesung
Sommersemester 2007 an der Universität Regensburg

Priv.-Doz. Dr. Michael Potthoff

Inhaltsverzeichnis

1	Magnetische Momente	7
1.1	Orbitale Momente	7
1.2	Kopplung an äußeres Magnetfeld	9
1.3	Spinmomente	11
1.4	Bohr-van Leuven-Theorem	12
1.5	Atomarer Magnetismus	14
1.6	Hundsche Regeln	16
2	Paramagnetismus ungekoppelter Momente	21
2.1	Paramagnetismus lokalisierter Momente	22
2.2	Paramagnetismus itineranter Momente	26
2.3	Lokaler Spin	33
3	Kopplung magnetischer Momente	37
3.1	Dipol- vs. Coulomb-Wechselwirkung	37
3.2	Weiß'scher Ferromagnet	39
3.3	Magnetische Kopplung	41
3.4	Direkte Austauschwechselwirkung	43
3.5	Superaustausch	47
3.6	Doppelaustausch	55
3.7	Stoner-Mechanismus	59
4	Kollektive Ordnung	61
4.1	Eindimensionales Ising-Modell	62
4.2	Unendlichdimensionales Ising-Modell	70
4.3	Langreichweitige Wechselwirkung	74
4.4	Hubbard-Modell: exakte Aussagen	77
5	Spontane Symmetriebrechung	81
5.1	Heisenberg-Modell, $SU(2)$ -Invarianz	81
5.2	Brechung der $SU(2)$ -Symmetrie	82
5.3	Magnonen	84
5.4	Mermin-Wagner-Theorem	89

6	Magnetismus und elektronische Struktur	93
6.1	Itineranter Ferromagnetismus	93
6.2	Itineranter Antiferromagnetismus	99

Quantentheorie des kollektiven Magnetismus

- magnetische Momente
- atomarer Magnetismus
- Paramagnetismus ungekoppelter Momente
- Kopplung magnetischer Momente
- Modelle des Magnetismus
- kollektive Ordnung
- Ising-Modell
- spontane Symmetriebrechung
- Magnonen und Mermin-Wagner-Theorem
- itineranter Magnetismus und elektronische Struktur
- Stoner- und Slater-Theorie

Kapitel 1

Magnetische Momente

elektronische Struktur von Festkörpern → magnetische Momente

Wechselwirkungen → Kopplung magnetischer Momente

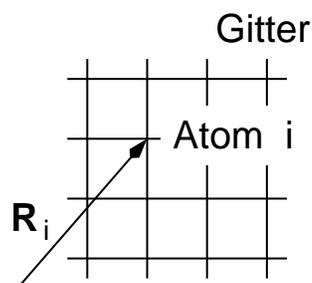
Kopplung vs. Fluktuationen → kollektive Ordnung

1.1 Orbitale Momente

kollektiver Magnetismus findet statt in Festkörpern:

Atome $i = 1, \dots, N$ auf einem Gitter

betrachte i -tes Atom bei \mathbf{R}_i :



Bewegung von Elektronen auf stationären Bahnen →

(klassische) stationäre Stromdichte (Magnetisierungsstromdichte)

$$\operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0 \quad (\text{s. Kontinuitätsgleichung})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \rightarrow \mathbf{B} = \nabla \times (\mathbf{A} + \nabla \psi)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} \rightarrow \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \Delta \mathbf{A} = \mu_0 \mathbf{j}$$

$$\text{Coulomb-Eichung: } \nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \rightarrow \Delta \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{j} \rightarrow$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int d^3r' \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

Entwicklung für $r \gg r'$:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{1}{r} \int d^3r' \mathbf{j}(\mathbf{r}') + \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{r_\alpha}{r^3} \int d^3r' \mathbf{j}(\mathbf{r}') r'_\alpha + \dots$$

erster Term = 0 wegen $\nabla \mathbf{j} = 0$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{m}_i \times \mathbf{r}}{r^3}$$

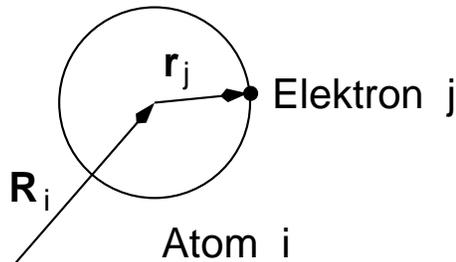
mit (klassische Definition des magnetischen Moments bzgl. Ursprung bei \mathbf{R}_i):

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{2} \int d^3r (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \times \mathbf{j}(\mathbf{r})$$

Elektrostatik: $\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{q_i}{r} + \frac{\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{r}}{r^3} + \dots \right)$ mit $\mathbf{d}_i = \int d^3r (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \rho(\mathbf{r})$

\mathbf{B} -Feld eines magnetischen Moments:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{m}_i \times \mathbf{r}}{r^3} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{3\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{m}_i) - \mathbf{m}_i}{r^3} \quad (\mathbf{n} = \mathbf{r}/r)$$



für Magnetisierungsstromdichte punktförmiger Elektronen

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -e \sum_j^{\text{Elektronen}} \mathbf{v}_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j - \mathbf{R}_i)$$

ist also:

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{2} \int d^3r (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \times \mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\frac{e}{2} \sum_j \mathbf{r}_j \times \mathbf{v}_j$$

orbitales magnetisches Moment eines Atoms bei \mathbf{R}_i :

$$\mathbf{m}_i = -\frac{e}{2m} \sum_j \mathbf{l}_j$$

(\mathbf{l}_j : Bahndrehimpuls des j -ten Elektrons bzgl. \mathbf{R}_i)

quantenmechanische Definition vom \mathbf{m}_i : analog

magnetisches Gesamtmoment:

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i$$

Magnetisierung M :

$$\mathbf{M} = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{m}_i \rangle \quad (\text{quantenstatistischer Erwartungswert})$$

bei Translationsinvarianz $\langle \mathbf{m}_i \rangle = \mathbf{m}$:

$$\mathbf{M} = \frac{N}{V} \langle \mathbf{m} \rangle$$

1.2 Kopplung an äußeres Magnetfeld

(elektronischer Anteil der) Hamilton-Funktion (klassisch) des Atoms bei \mathbf{R}_i :

$$H_i = \sum_j \left(\frac{\mathbf{p}_j^2}{2m} + V(\mathbf{R}_i + \mathbf{r}_j) \right) + V_{\text{int}}(\dots, \mathbf{r}_j, \dots)$$

Hamilton-Funktion eines Systems in äußerem (zeitlich konstanten) Magnetfeld

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \text{rot} \mathbf{A}(\mathbf{r})$$

ergibt sich durch "minimale Substitution":

$$\mathbf{p}_j \mapsto \mathbf{p}_j - q \mathbf{A}(\mathbf{r}_j) = \mathbf{p}_j + e \mathbf{A}(\mathbf{r}_j)$$

$q = -e$: Ladung

also:

$$H_i = \sum_j \left(\frac{(\mathbf{p}_j + e \mathbf{A}(\mathbf{r}_j))^2}{2m} + V(\mathbf{R}_i + \mathbf{r}_j) \right) + V_{\text{int}}(\dots, \mathbf{r}_j, \dots)$$

mechanischer Impuls: $m \dot{\mathbf{r}}_j$

\mathbf{p}_j : kanonischer Impuls $\mathbf{p}_j = m \dot{\mathbf{r}}_j + q \mathbf{A}(\mathbf{r}_j) = m \dot{\mathbf{r}}_j - e \mathbf{A}(\mathbf{r}_j)$

\mathbf{p}_j konjugiert zu $\mathbf{r}_j \rightarrow$

$$[r_{j\alpha}, p_{j\beta}] = i\hbar \delta_{\alpha\beta} \quad (\alpha = x, y, z)$$

klassisch: Poisson-Klammer, quantenmechanisch: Kommutator

weitere Rechnung quantenmechanisch

in Ortsdarstellung: $\mathbf{p}_j = -i\hbar \nabla_j$

$$\begin{aligned} \frac{(\mathbf{p}_j + e\mathbf{A}(\mathbf{r}_j))^2}{2m} &= \frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \Delta_j - i\hbar \nabla_j e\mathbf{A}(\mathbf{r}_j) - e\mathbf{A}(\mathbf{r}_j) i\hbar \nabla_j + e^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}_j)^2 \right) \\ &= \frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \Delta_j - ie\hbar \operatorname{div} \mathbf{A}(\mathbf{r}_j) - 2ie\hbar \mathbf{A}(\mathbf{r}_j) \nabla_j + e^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}_j)^2 \right) \end{aligned}$$

Vereinfachungen:

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0 \quad (\text{Coulomb-Eichung})$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \quad (\mathbf{B} \text{ räumlich konstant})$$

also:

$$\frac{(\mathbf{p}_j + e\mathbf{A}(\mathbf{r}_j))^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \Delta_j + 2e\mathbf{A}(\mathbf{r}_j) \mathbf{p}_j + e^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}_j)^2 \right)$$

wobei:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}_j) \mathbf{p}_j = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{p}_j = \frac{1}{2} \mathbf{B} \cdot \mathbf{r}_j \times \mathbf{p}_j = \frac{1}{2} \mathbf{B} \cdot \mathbf{l}_j$$

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}_j)^2 &= \frac{1}{4} (\mathbf{B} \times \mathbf{r}_j)^2 = \frac{1}{4} (\mathbf{B}^2 r_j^2 - (\mathbf{B} \mathbf{r}_j)^2) = \frac{1}{4} (B^2 r_j^2 - B^2 r_j^2 \cos^2 \theta_j) \\ &= \frac{1}{4} B^2 r_j^2 \sin^2 \theta_j \end{aligned}$$

zusammen:

$$H_i = \sum_j \left[\frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \Delta_j + 2e\mathbf{A}(\mathbf{r}_j) \mathbf{p}_j + e^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}_j)^2 \right) + V(\mathbf{R}_i + \mathbf{r}_j) \right] + V_{\text{int}}(\dots, \mathbf{r}_j, \dots)$$

$$H_i = H_{i0} + \sum_j \left(\frac{e}{2m} \mathbf{B} \cdot \mathbf{l}_j + \frac{e^2}{8m} B^2 r_j^2 \sin^2 \theta_j \right)$$

definiere magnetisches Moment:

$$\mathbf{m}_i = -\frac{\partial H_i}{\partial \mathbf{B}} \quad (\text{Operator, Observable})$$

es ist: $\mathbf{m}_i = \mathbf{m}_{i,\text{perm}} + \mathbf{m}_{i,\text{ind}}$

permanentes magnetisches Moment

$$\mathbf{m}_{i,\text{perm}} = -\frac{e}{2m} \sum_j \mathbf{l}_j \quad (\text{konsistent mit Herleitung oben})$$

$\mathbf{m}_{i,\text{perm}} \neq 0$ für $\mathbf{B} = 0$

→ **Paramagnetismus:** permanente magnetische Momente stellen sich parallel zu äußerem Feld ein

beachte: thermische Fluktuationen wirken der Ausrichtung entgegen

induziertes magnetisches Moment

$$\mathbf{m}_{i,\text{ind}} = -\frac{e^2}{4m} \sum_j r_j^2 \sin^2 \theta_j \mathbf{B}$$

$\mathbf{m}_{i,\text{ind}} \rightarrow 0$ für $\mathbf{B} \rightarrow 0$

→ **Diamagnetismus**: äußeres Feld beeinflusst die Elektronenbahnen, was ein zusätzliches magnetisches Momente hervorruft

Diamagnetismus schwach (wegen quadratischer Ankopplung)

kollektiver Magnetismus:

- magnetische Ordnung bei $\mathbf{B} = 0$
 - Ordnung permanenter magnetischer Momente
-

Momente werden in Vielfachen des Bohrschen Magnetons angegeben:

Bohrsches Magneton

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9.27 \cdot 10^{-24} \frac{\text{J}}{\text{T}} = 0.58 \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{T}}$$

z.B.

$$\mathbf{m}_{i,\text{perm}} = -\mu_B \sum_j \mathbf{l}_j / \hbar$$

1.3 Spinmomente

Bahndrehimpuls $\mathbf{L} = \sum_j \mathbf{l}_j$ → permanentes **orbitales Moment** \mathbf{m}_L

Spin $\mathbf{S} = \sum_j \mathbf{s}_j$ → permanentes **Spinmoment** \mathbf{m}_S

Gesamtmoment (bei Vernachlässigung der Spin-Bahn-Kopplung):

$$\mathbf{m} = \mathbf{m}_L + \mathbf{m}_S = -\frac{1}{\hbar} \mu_B (\mathbf{L} + g\mathbf{S})$$

Dirac-Theorie:

$$g = 2 \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \mathcal{O}(\alpha^2) \right) \approx 2$$

mit Feinstrukturkonstante $\alpha \approx 1/137$

1.4 Bohr-van Leuven-Theorem

Magnetismus makroskopischer Systeme (Dia-, Para-, kollektiver Magnetismus) ist ein rein quantenmechanisches Phänomen!

Makrosystem: statistische Beschreibung, thermodynamisches Gleichgewicht

klassischer (reiner) Systemzustand: Punkt im $6N$ -dimensionalen Phasenraum:

$$(q, p) = (q_1, \dots, q_{3N}, p_1, \dots, p_{3N})$$

gemischter Zustand gegeben durch Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\rho = \rho(q, p)$$

Normierung:

$$\int dq_1 \dots dq_{3N} dp_1 \dots dp_{3N} \rho(q, p) = 1$$

Observable:

$$A = A(q, p) = A(q_1, \dots, q_{3N}, p_1, \dots, p_{3N})$$

Erwartungswert:

$$\langle A \rangle = \int dq dp \rho(q, p) A(q, p)$$

kanonische Dichte bei Temperatur T ($\beta = 1/kT$):

$$\rho(q, p) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(q, p)}$$

Zustandsintegral:

$$Z = \int dq dp e^{-\beta H(q, p)}$$

Hamilton-Funktion eines Atoms bei \mathbf{R}_i :

$$H_i(q_i, p_i) \quad \text{mit } q_i = (q_{i1}, q_{i2}, \dots, q_{ij}, \dots)$$

magnetisches Moment des i -ten Atoms:

$$\mathbf{m}_i = - \frac{\partial H_i}{\partial \mathbf{B}}$$

Gesamtsystem: $H = \sum_i H_i + \text{W.W.} = H(q, p)$

Gesamtmoment:

$$\mathbf{m}(q, p) = -\frac{\partial H(q, p)}{\partial \mathbf{B}}$$

\mathbf{m} ist eine Observable

Erwartungswert:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{m} \rangle &= \int dq dp \rho(q, p) \mathbf{m}(q, p) \\ &= -\frac{1}{Z} \int dq dp e^{-\beta H(q, p)} \frac{\partial H(q, p)}{\partial \mathbf{B}} \\ &= \frac{1}{\beta Z} \int dq dp \frac{\partial}{\partial \mathbf{B}} e^{-\beta H(q, p)} \\ &= \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial \mathbf{B}}\end{aligned}$$

allgemeine Hamilton-Funktion eines Systems wechselwirkender Elektronen im äußeren Feld:

$$H(q, p) = \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^N (\mathbf{p}_j + e\mathbf{A}(\mathbf{r}_j))^2 + \sum_{j=1}^N V(\mathbf{r}_j) + V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$$

Zustandssumme:

$$Z = \int d^3 r_1 \dots d^3 r_N d^3 p_1 \dots d^3 p_N e^{-\beta \frac{1}{2m} \sum_j (\mathbf{p}_j + e\mathbf{A}(\mathbf{r}_j))^2} \cdot e^{-\beta (\sum_j V(\mathbf{r}_j) + V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N))}$$

Substitution:

$$\mathbf{p}_j \rightarrow \mathbf{p}_j - e\mathbf{A}(\mathbf{r}_j)$$

Jacobi-Determinante = 1, Integrationsgrenzen unverändert \rightarrow

$$Z = \int d^3 r_1 \dots d^3 r_N d^3 p_1 \dots d^3 p_N e^{-\beta \frac{1}{2m} \sum_j \mathbf{p}_j^2} \cdot e^{-\beta (\sum_j V(\mathbf{r}_j) + V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N))}$$

also:

$$Z(\mathbf{B}) = Z(0)$$

und somit:

$$\frac{\partial Z}{\partial \mathbf{B}} = 0$$

d.h.

$$\boxed{\langle \mathbf{m} \rangle = 0}$$

1.5 Atomarer Magnetismus

einzelnes Atom (bei \mathbf{R}_i):

Bestimmung des atomaren Moments?

atomarer Hamilton-Operator: (zunächst für ein Atomelektron)

$$H_i = H_0 + H_{\text{para}} + H_{\text{dia}} + H_{\text{spin}} + H_{SB} + H_{\text{rel}} + H_{\text{Kern}}$$

mit

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r)$$

→ Bewegung des Elektrons im (sphärisch symmetrischen) Kernpotenzial

$$H_{\text{para}} = \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{l} \mathbf{B}$$

→ paramagnetischer Anteil: Bahnbewegung des Elektrons resultiert in magnetischem Moment, dass sich parallel zum Feld einstellt

$$H_{\text{dia}} = \frac{e^2 B^2}{8m} r^2 \sin^2 \theta$$

→ diamagnetischer Anteil: äußeres Magnetfeld führt zu einer Beeinflussung der Elektronenbahn und damit zu einem veränderten magnetischen Moment ($\sim B^2$)

$$H_{\text{spin}} = g \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{s} \mathbf{B}$$

→ parallele Einstellung des Spinmoments im äußeren Feld,
Dirac-Theorie: $g \approx 2$

$$H_{SB} = -\frac{2}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{l} \mathbf{s} = \lambda \mathbf{l} \mathbf{s}$$

→ (relativistische) Spin-Bahn-Kopplung

beachte: $[\mathbf{l}, \mathbf{l} \mathbf{s}] \neq 0$, $[\mathbf{s}, \mathbf{l} \mathbf{s}] \neq 0$

aber: \mathbf{l}^2 , \mathbf{s}^2 , \mathbf{j}^2 , j_z Erhaltungsgrößen

$$H_{\text{rel}} = -\frac{p^4}{8m^3 c^2} + \frac{e\hbar^2}{4m^2 c^2} \nabla V \nabla$$

→ weitere relativistische Korrekturen
(Korrektur der kinetischen Energie und Darwin-Term)

$$H_{\text{Kern}} = V_Q + V_{\text{hyperfein}}$$

1) Korrekturen zu punktförmiger **Kernladungsdichte**

– Multipolentwicklung des elektostatischen Kern-Potenzials $V(\mathbf{r})$

– Monopolmoment $\rightarrow V(r)$

– Dipolmoment = 0 i.allg.

– Quadrupolmoment $V_Q \propto \sum_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} \frac{r_\alpha r_\beta}{r^5}$ mit Quadrupoltensor $Q_{\alpha\beta}$

2) Hyperfein-Wechselwirkung

– Bewegung der Kernladungen \rightarrow **Kernstromdichte**

also: Kernmoment $\mathbf{m}_K = g_K \frac{\mu_K}{\hbar} \mathbf{I}$

(mit Kernmagneton g_K , nuklearem g -Faktor und Kernspin \mathbf{I})

Vektorpotenzial $\mathbf{A}_{\text{Kern}}(\mathbf{r}) \propto \int d^3R \frac{\mathbf{j}(\mathbf{R})}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|}$ bewirkt Korrektur

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A}_{\text{Kern}}(\mathbf{r})$$

\rightarrow

$$V_{\text{hyperfein}} \propto \frac{1}{r^3} \mathbf{I} \mathbf{l} + \frac{3(\mathbf{s} \mathbf{r})(\mathbf{I} \mathbf{r})}{r^5} - \frac{\mathbf{s} \mathbf{I}}{r^3} + \frac{8\pi}{3} (\mathbf{s} \mathbf{I}) \delta(\mathbf{r})$$

Viel-Elektronen-System:

- Elektron-Elektron-(Coulomb-)Wechselwirkung: Approximationen nötig
 \rightarrow Hartree-Fock-Theorie
- konsistente Behandlung relativistischer Effekte nur im Rahmen der QED
 \rightarrow Vernachlässigung/störungstheoretische Beschreibung der Spin-Bahn-WW

Hartree-Fock-Theorie:

Ansatz für p -Elektronen-Wellenfunktion

$$\Psi_{\text{Sl.-Det.}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_p) = \begin{vmatrix} \phi_1(\mathbf{r}_1) & \cdots & \phi_1(\mathbf{r}_p) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_p(\mathbf{r}_1) & \cdots & \phi_p(\mathbf{r}_p) \end{vmatrix}$$

(Slater-Determinante) im Ritzschen Prinzip $\delta \langle \Psi | H_i | \Psi \rangle = 0$

\rightarrow effektives Ein-Teilchen-Potenzial:

Zentralfeldnäherung

$$V(r) \rightarrow V_{\text{eff}}(r) = -e \int d^3r' \frac{\sum_j |\phi_j(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + V_X(r)$$

beachte:

– Pauli-Prinzip (Fermi-Statistik): $\Psi(\dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots) = -\Psi(\dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots)$

– $H_i \Psi_{\text{Sl.}-\text{Det.}} = E \Psi_{\text{Sl.}-\text{Det.}}$ nur falls $H_i = \sum_{j=1}^p H_i(\mathbf{r}_j, \mathbf{p}_j)$, d.h. keine Korrelationen

Hamilton-Operator:

$$H_i = \sum_{j=1}^p \left(\frac{\mathbf{p}_j^2}{2m} + V_{\text{eff}}(r_j) \right) + H_{\text{para}} + H_{\text{corr}} + H_{\text{SB}}$$

mit:

$$H_{\text{para}} = \frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \mathbf{B} = -(\mathbf{m}_L + \mathbf{m}_S) \mathbf{B}$$

(Feld-Term ohne schwachen diamagnetischen Anteil)

$$H_{\text{corr}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{j,l} \frac{1}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l|} - \sum_j V_{\text{eff}}(r_j) \quad (\text{Korrelationseffekte})$$

$$H_{\text{SB}} = -\frac{e}{2m^2c^2} \sum_j \frac{1}{r_j} \frac{d\tilde{V}(r_j)}{dr} \mathbf{l}_j \mathbf{s}_j \quad (\text{Spin-Bahn-WW})$$

(Kopplungen von Bahndrehimpulsen und Spins verschiedener Elektronen sind vernachlässigt, teilweise korrigierbar durch $V \rightarrow \tilde{V}$)

1.6 Hund'sche Regeln

magnetisches Moment eines einzelnen Atoms (bei \mathbf{R}_i):

– Lösung des durch H_i gegebenen Viel-Elektronen-Problems

– empirisch: L und S für Grundzustand (und damit atomares Moment) bestimmt durch Hund'sche Regeln

- Russel-Saunders-(LS-)Kopplung:
schwache (vernachlässigbare) Spin-Bahn-Kopplung
- sphärisch symmetrisches Potenzial $V_{\text{eff}}(r)$
→ Bahndrehimpuls \mathbf{l}_j und Spins \mathbf{s}_j Erhaltungsgrößen

- Gesamtbahndrehimpuls: $\mathbf{L} = \sum_j \mathbf{l}_j$ (j : Elektronen einer Schale)

Gesamtspin: $\mathbf{S} = \sum_j \mathbf{s}_j$

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

- Eigenzustände des Hamiltonians in Zentralfeldnäherung: $H_i = H_0$

$$|\gamma, LM_L, SM_S\rangle$$

- Eigenenergien:

$$E = E_\gamma(LS) \quad (\text{Entartung bzgl. } M_L, M_S)$$

Zustände für festes L, S : (LS)-Multipllett, ^{2S+1}L

- **Coulomb-Wechselwirkung** H_{corr} hebt die Entartung bzgl. L, S auf und liefert das energetisch tiefste Multipllett gemäß den

Hundschen Regeln:

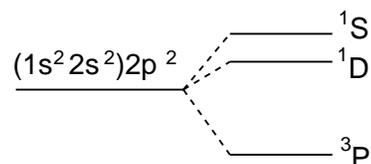
1. $S = \max.$

(für eine gegebene Elektronenkonfiguration hat das Multipllett mit maximalem S die niedrigste Energie)

2. $L = \max.$

(für gegebenes S hat das Multipllett mit maximalem L die niedrigste Energie)

Bsp: Kohlenstoff, C



Konfiguration	m_l							S	L	Term
	-3	-2	-1	0	1	2	3			
$4f^0$								0	0	1S
$4f^1$	↑							1/2	3	2F
$4f^2$	↑	↑						1	5	3H
$4f^3$	↑	↑	↑					3/2	6	4I
$4f^4$	↑	↑	↑	↑				2	6	5I
$4f^5$	↑	↑	↑	↑	↑			5/2	5	6H
$4f^6$	↑	↑	↑	↑	↑	↑		3	3	7F
$4f^7$	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑	7/2	0	8S
$4f^8$	↑↓	↑	↑	↑	↑	↑	↑	3	3	7F
$4f^9$	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	↑	↑	5/2	5	6H
$4f^{10}$	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	↑	2	6	5I
$4f^{11}$	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	3/2	6	4I
$4f^{12}$	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	1	5	3H
$4f^{13}$	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	1/2	3	2F
$4f^{14}$	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	0	0	1S

Bsp:

La: $4f^0 5d^1 6s^2$

Ce: $4f^2 5d^0 6s^2$

Eu: $4f^7 5d^0 6s^2$

Gd: $4f^7 5d^1 6s^2$

Yb: $4f^{14} 5d^0 6s^2$

Diskussion:

- andere Multipletts $^{2S+1}L_J$ liegen (~ 1 eV und mehr) höher und sind für normale Temperaturen belanglos

$$(kT_{\text{Raum}} \approx 1/40 \text{ eV})$$

- abgeschlossene Schalen: $L = S = 0$

→ kein magnetisches Moment, z.B.:

$$\langle \mathbf{m}_L \rangle = \langle L, M_L | \mathbf{m}_L | L, M_L \rangle \propto \langle L, M_L | L_z | L, M_L \rangle \mathbf{e}_z = 0 \text{ für } L, M_L = 0$$

- $H_i = H_0 + H_{\text{corr}}$ rotationsinvariant (im Bahn- und Spinraum)

Ausrichtung des Moments einer offenen Schale: äußeres Feld vs. T

- im Raum eines LS -Multipletts: $H_{\text{SB}} = \Lambda(\gamma, L, S) \mathbf{L} \mathbf{S}$

(mit Wigner-Eckart-Theorem)

Kopplung $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, d.h. Basiswechsel

$$\mathbf{L}^2, L_z, \mathbf{S}^2, S_z \rightarrow \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, \mathbf{J}^2, J_z$$

Eigenzustände von $H_i = H_0 + H_{\text{corr}}$:

$$|\gamma, L, S, J, M_J\rangle$$

Störungstheorie 1. Ordnung:

$$\begin{aligned} \Delta E_{\gamma LSJ} &= \langle \gamma, L, S, J, M_J | \Lambda(\gamma, L, S) \mathbf{L} \mathbf{S} | \gamma, L, S, J, M_J \rangle \\ &= \Lambda(\gamma, L, S) \langle \gamma, L, S, J, M_J | \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) | \gamma, L, S, J, M_J \rangle \\ &= \Lambda(\gamma, L, S) \frac{\hbar^2}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \end{aligned}$$

- $\Delta = \Delta E_{\gamma LSJ} - \Delta E_{\gamma LSJ-1} = \hbar^2 \Lambda(\gamma, L, S) \times J$

Landé Intervallregel

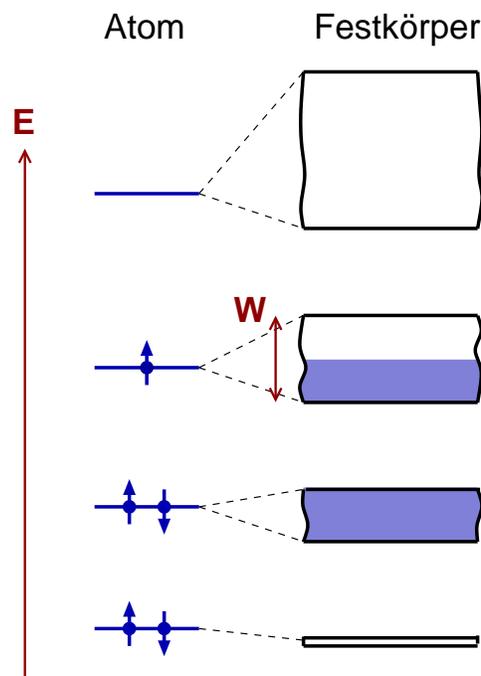
- **Richtungsentartung** bzgl. M_J
- mit äußerem Feld: Zeeman-Effekt
 anomal: schwaches Feld (gegen Spin-Bahn-WW)
 normal: starkes Feld

Kapitel 2

Paramagnetismus ungekoppelter Momente

bislang: einzelnes Atom, atomares Moment

Übergang zum Festkörper: atomare Energieniveaus → Bänder



- **Momente bleiben lokalisiert**

Bsp. EuO: halbgefüllte 4f-Zustände (praktisch dispersionslos)
(Eu: $4f^7 5d^0 6s^2$, O: $2s^2 2p^4$)

- **itinerante Momente**

Bsp. Ni: offene 3d-Schale, Hybridisierung mit 4s-Zuständen, dispergierende Valenzbänder
(Ni: $3d^8 4s^2$)

kollektiver Magnetismus: Kopplung lokalisierter oder itineranter Momente
zunächst: Paramagnetismus ungekoppelter Momente

2.1 Paramagnetismus lokalisierter Momente

ungekoppelte Momente:

$$H = \sum_i H_i$$

Paramagnetismus: Ausrichtung in äußerem Feld \iff thermische Fluktuationen

a) schwache Spin-Bahn-WW:

$\hbar^2 \Lambda(\gamma, L, S) \ll kT, \mu_B B$ (normaler Zeeman-Effekt)

$\rightarrow L, M_L, S, M_S$ sind gute Quantenzahlen

$\rightarrow |i, \gamma, L, M_L, S, M_S\rangle$ Eigenzustände von H_i

Eigenenergien:

$$E_{i, \gamma, L M_L S M_S} = E_{\gamma L S} + (M_L + 2M_S) \mu_B B$$

beachte:

- Translationsinvarianz
- für normale T : Beschränkung auf GZ-Multipllett $\rightarrow L, S$ fest (Hundsche Regeln)
- $(2L + 1)(2S + 1)$ Zustände im Multipllett:
 $M_L = -L, \dots, L$ und $M_S = -S, \dots, S$

Thermodynamische Eigenschaften bestimmt durch **freie Energie**

$$F = -kT \ln Z$$

Zustandssumme:

$$Z = \prod_i Z_i = Z_{\text{at}}^N \quad (N \text{ Atome})$$

atomare Zustandssumme:

$$Z_{\text{at}} = \sum_{\gamma, L, S, M_L, M_S} e^{-\beta E_{i, \gamma, L M_L S M_S}}$$

nur GZ-Multiplett:

$$Z_{\text{at}} = \sum_{M_L, M_S} e^{-\beta E_{i, \gamma, L M_L S M_S}} = e^{-\beta E_{\gamma LS}} \sum_{M_L, M_S} e^{-\beta (M_L + 2M_S) \mu_B B}$$

es ist:

$$\begin{aligned} \sum_{M_L=-L}^L e^{-\beta M_L \mu_B B} &= \sum_{M_L=-L}^L \left(e^{-\beta \mu_B B} \right)^{M_L} = \left(e^{\beta \mu_B B} \right)^L \sum_{n=0}^{2L} \left(e^{-\beta \mu_B B} \right)^n \\ &= e^{\beta \mu_B B L} \frac{1 - \left(e^{-\beta \mu_B B} \right)^{2L+1}}{1 - e^{-\beta \mu_B B}} = \frac{e^{\beta \mu_B B L} - e^{-\beta \mu_B B (L+1)}}{1 - e^{-\beta \mu_B B}} \\ &= \frac{e^{\beta \mu_B B (L+1/2)} - e^{-\beta \mu_B B (L+1/2)}}{e^{\beta \mu_B B / 2} - e^{-\beta \mu_B B / 2}} = \frac{\sinh(\beta \mu_B B (L + 1/2))}{\sinh(\beta \mu_B B / 2)} \end{aligned}$$

analog:

$$\sum_{M_S=-S}^S e^{-\beta (2M_S) \mu_B B} = \frac{\sinh(\beta \mu_B B \cdot 2(S + 1/2))}{\sinh(\beta \mu_B B)}$$

also:

$$Z_{\text{at}} = e^{-\beta E_{\gamma LS}} \frac{\sinh(\beta \mu_B B (L + 1/2))}{\sinh(\beta \mu_B B / 2)} \frac{\sinh(\beta \mu_B B \cdot 2(S + 1/2))}{\sinh(\beta \mu_B B)}$$

und:

$$F = -NkT \ln \left(e^{-\beta E_{\gamma LS}} \frac{\sinh(\beta \mu_B B (L + 1/2))}{\sinh(\beta \mu_B B / 2)} \frac{\sinh(\beta \mu_B B \cdot 2(S + 1/2))}{\sinh(\beta \mu_B B)} \right)$$

$$F = -N kT \ln \left(\frac{\sinh(\beta \mu_B B (L + 1/2))}{\sinh(\beta \mu_B B / 2)} \frac{\sinh(\beta \mu_B B \cdot 2(S + 1/2))}{\sinh(\beta \mu_B B)} \right) + N E_{\gamma LS}$$

mittleres Gesamtmoment:

$$\frac{\partial F(T, B)}{\partial B} = -kT \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial B} = -kT \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial B} \sum e^{-\beta (E_{\gamma LS} + (M_L + 2M_S) \mu_B B)}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{Z} \sum (M_L + 2M_S) \mu_B e^{-\beta(E_{\gamma LS} + (M_L + 2M_S)\mu_B B)} \\
&= \frac{1}{\hbar} N \frac{1}{Z} \text{Sp}_{at} (L_z + 2S_z) \mu_B e^{-\beta H} = \frac{1}{\hbar} N \langle L_z + 2S_z \rangle_{at} \mu_B
\end{aligned}$$

also: $(\mathbf{m} = -\mu_B(\mathbf{L} + g\mathbf{S})/\hbar)$

$$N \langle m_z \rangle_{at} = - \frac{\partial F(T, B)}{\partial B}$$

Magnetisierung: $(\mathbf{M} = (N/V) \langle \mathbf{m}_i \rangle)$

$$M = - \frac{1}{V} \frac{\partial F(T, B)}{\partial B}$$

hier:

$$M = - \frac{1}{V} \frac{\partial F(T, B)}{\partial B} = \frac{NkT}{V} \frac{\partial}{\partial B} \ln \left(\frac{\sinh(\beta\mu_B B(L + 1/2)) \sinh(\beta\mu_B B \cdot 2(S + 1/2))}{\sinh(\beta\mu_B B/2) \sinh(\beta\mu_B B)}$$

mit

$$\frac{d}{dx} (\ln \sinh(x)) = \frac{\cosh x}{\sinh x} = \coth x$$

folgt:

$$M = \frac{N}{V} \mu_B (LB_L(\beta\mu_B BL) + 2SB_S(2\beta\mu_B BS))$$

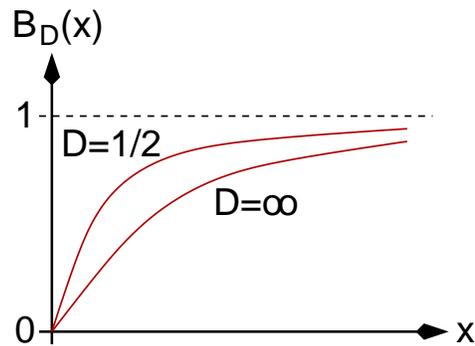
mit der **Brillouin-Funktion**:

$D = L$ oder $D = S$

$$B_D(x) = \frac{2D + 1}{2D} \coth \left(\frac{2D + 1}{2D} x \right) - \frac{1}{2D} \coth \left(\frac{1}{2D} x \right)$$

Diskussion:

- $D = 1/2 \rightarrow B_{1/2}(x) = \tanh x$
- $D \rightarrow \infty \rightarrow B_\infty(x) = \coth x - \frac{1}{x}$ **Langevin-Funktion**
- $B_D(x) = \frac{D + 1}{3D} x + \frac{D + 1}{3D} \frac{2D^2 + 2D + 1}{30D^2} x^3 + \dots$
- $B_D(x) = -B_D(-x)$
- $B_D(x) \rightarrow \pm 1$ für $x \rightarrow \pm \infty$



Verhalten für hohes T oder schwaches B , d.h. $x = \beta\mu_B BD \ll 1$:

$$\begin{aligned}
 M &= \frac{N}{V} \mu_B (LB_L(\beta\mu_B BL) + 2SB_S(2\beta\mu_B BS)) \\
 &= \frac{N}{V} \mu_B \left(L \frac{L+1}{3L} \beta\mu_B BL + 2S \frac{S+1}{3S} 2\beta\mu_B BS \right) \\
 &= \frac{N}{V} \frac{1}{3} \mu_B^2 (L(L+1) + 4S(S+1)) \beta B
 \end{aligned}$$

magnetische Suszeptibilität

$$\chi = \mu_0 \frac{\partial M(T, B)}{\partial B}$$

$$\chi = \frac{C}{T}$$

Curie-Gesetz für $T \rightarrow \infty$ oder $B \rightarrow 0$

mit Curie-Konstante:

$$C = \frac{N}{V} \frac{1}{3k} \mu_0 \mu_B^2 (L(L+1) + 4S(S+1))$$

charakteristische Eigenschaft eines Systems **lokalisierter** Momente

b) starke Spin-Bahn-WW:

$\hbar^2 \Lambda(\gamma, L, S) \gg kT, \mu_B B$ (anomaler Zeeman-Effekt)

→ L, S, J, M_J sind gute Quantenzahlen

→ $|i, \gamma, L, S, J, M_J\rangle$ Eigenzustände von H_i

Feld-Term:

$$\frac{1}{\hbar} \mu_B (L_z + 2S_z) B$$

Eigenenergien:

$$E_{i,\gamma,L,S,J,M_J} = E_{\gamma LSJ} + g_J(L, S)M_J\mu_B B$$

mit Lande g-Faktor (Wigner-Eckart-Theorem)

$$g_J(L, S) = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}$$

atomare Zustandssumme:

$$Z_{at} = e^{-\beta E_{\gamma LSJ}} \sum_{M_J=-J}^J e^{-\beta g_J M_J \mu_B B} = e^{-\beta E_{\gamma LSJ}} \frac{\sinh(\beta g_J \mu_B B (J + 1/2))}{\sinh(\beta g_J \mu_B B / 2)}$$

Magnetisierung:

$$M = \frac{N}{V} J g_J \mu_B B_J(\beta g_J \mu_B B_0 J)$$

Suszeptibilität für hohe T oder schwaches B :

$$\chi = \frac{C}{T} \quad \text{Curie-Gesetz}$$

mit Curie-Konstante

$$C = \frac{N}{V} \frac{1}{3k} \mu_0 \mu_B^2 g_J^2 J(J+1)$$

2.2 Paramagnetismus itineranter Momente

Spin-Paramagnetismus im Sommerfeld-Modell:

- partiell besetztes Valenzband → endliches magnetisches Moment
- orbitale Bewegung → orbitales Moment
Elektronenspin → Spinmoment
- i.allg. orbitales Moment \ll Spinmoment
(l_j im Gegensatz zu s_j keine Erhaltungsgröße)
- Festkörper → itinerante Elektronen → itinerante Spinmomente
- nicht-wechselwirkendes Elektronengas → Paramagnetismus

Hamilton-Operator N_e wechselwirkungsfreier Elektronen:

$$H = \sum_{j=1}^{N_e} H_1^{(j)} \quad \text{mit } H_1 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$$

Ein-Elektronen-Zustände:

$$\phi(\mathbf{r}) \chi_\sigma \quad \text{mit } \chi_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \chi_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Ein-Teilchen-Problem:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(\mathbf{r}) = \varepsilon \phi(\mathbf{r})$$

Elektronen im Volumen $V = L^3$, zyklische Randbedingungen:

$$\phi(\mathbf{r} + L\mathbf{e}_\mu) = \phi(\mathbf{r})$$

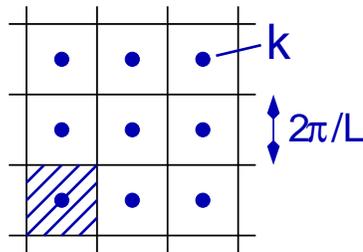
\mathbf{e}_μ : Einheitsvektor in $\mu = x, y, z$ -Richtung

Lösung:

$$|\mathbf{k}, \sigma\rangle = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \chi_\sigma \quad \text{mit } \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad \text{und } \varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Randbedingungen:

$$e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}+L\mathbf{e}_\mu)} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad \Rightarrow \quad e^{iL\mathbf{k}\mathbf{e}_\mu} = e^{iLk_\mu} = 1$$



also:

$$k_\mu = \frac{2\pi}{L} n_\mu \quad n_\mu \text{ ganze Zahl}$$

erlaubte \mathbf{k} -Vektoren

Rastervolumen im \mathbf{k} -Raum:

$$\Delta^3 k = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

Hamilton-Operator in Diagonaldarstellung:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \varepsilon(\mathbf{k}) |\mathbf{k}, \sigma\rangle \langle \mathbf{k}, \sigma|$$

betrachte Ein-Elektronen-Zustand zu Wellenvektor \mathbf{k}_1 und Spin σ_1 :

$$|\mathbf{k}_1, \sigma_1\rangle$$

Charakterisierung durch Besetzungszahlen:

$$n_{\mathbf{k}\sigma} = 1 \quad \text{für } \mathbf{k} = \mathbf{k}_1, \sigma = \sigma_1$$

$$n_{\mathbf{k}\sigma} = 0 \quad \text{sonst}$$

Zwei-Elektronen-Zustand:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\mathbf{k}_1, \sigma_1\rangle^{(1)} |\mathbf{k}_2, \sigma_2\rangle^{(2)} - |\mathbf{k}_1, \sigma_1\rangle^{(2)} |\mathbf{k}_2, \sigma_2\rangle^{(1)} \right)$$

beachte: Teilchenvertauschung liefert keinen neuen physikalischen Zustand

Ununterscheidbarkeit identischer Fermionen

Charakterisierung durch Besetzungszahlen:

$$n_{\mathbf{k}\sigma} = 1 \quad \text{für } \mathbf{k} = \mathbf{k}_1, \sigma = \sigma_1$$

$$n_{\mathbf{k}\sigma} = 1 \quad \text{für } \mathbf{k} = \mathbf{k}_2, \sigma = \sigma_2$$

$$n_{\mathbf{k}\sigma} = 0 \quad \text{sonst}$$

beachte: $n_{\mathbf{k}\sigma} = 2$ nicht möglich

Pauli-Prinzip

(antisymmetrisierter) N_e -Elektronen-Zustand:

$$|\{n_{\mathbf{k},\sigma}\}\rangle \quad \text{mit } \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} n_{\mathbf{k},\sigma} = N_e$$

Orthonormalbasis des N_e -Elektronen-Hilbert-Raums!

Def: Besetzungszahloperator

$$\hat{n}_{\mathbf{k},\sigma} |\{n_{\mathbf{k},\sigma}\}\rangle = n_{\mathbf{k},\sigma} |\{n_{\mathbf{k},\sigma}\}\rangle$$

Def: Teilchenzahloperator

$$\hat{N}_e = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}$$

Hamilton-Operator des Sommerfeld-Modells:

$$H = \sum_{i=1}^{N_e} \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_i) \right)$$

“erste Quantisierung”

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}$$

“zweite Quantisierung”

beachte: $V(\mathbf{r}) \equiv 0 \rightarrow \varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

z -Komponente des Elektronenspins:

$$S_{\mathbf{k},z} = \frac{\hbar}{2}(\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} - \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow})$$

Spinmoment:

$$m_{\mathbf{k},z} = -\frac{1}{\hbar}\mu_B g S_{\mathbf{k},z} = -\mu_B(\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} - \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow})$$

Gesamtmoment:

$$-\frac{1}{\hbar}\mu_B g \sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k},z} = -\mu_B(\widehat{N}_{e,\uparrow} - \widehat{N}_{e,\downarrow})$$

Magnetisierung:

$$M = -\frac{1}{V}\mu_B(\langle \widehat{N}_{e,\uparrow} \rangle - \langle \widehat{N}_{e,\downarrow} \rangle) = -\frac{1}{V} \frac{\partial \Omega}{\partial B}$$

$\Omega = \Omega(T, V, \mu, B)$: großkanonisches Potenzial

System im äußeren Feld:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{e}{2m} g B \sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k},z} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma} + \mu_B B \sum_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} - \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) \end{aligned}$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$$

also:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}$$

mit

$$\varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) + z_{\sigma} \mu_B B \quad \text{und } z_{\uparrow} = 1, z_{\downarrow} = -1$$

großkanonische Zustandssumme:

$$\begin{aligned} \Xi &= \text{Sp} e^{-\beta(H - \mu \widehat{N}_e)} = \sum_{\{n_{\mathbf{k},\sigma}\}} \langle \{n_{\mathbf{k},\sigma}\} | e^{-\beta(H - \mu \widehat{N}_e)} | \{n_{\mathbf{k},\sigma}\} \rangle \\ &= \sum_{\{n_{\mathbf{k},\sigma}\}} \langle \{n_{\mathbf{k},\sigma}\} | e^{-\beta(\sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} (\varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) - \mu) \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma})} | \{n_{\mathbf{k},\sigma}\} \rangle \\ &= \sum_{\{n_{\mathbf{k},\sigma}\}} e^{-\beta(\sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} (\varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) - \mu) n_{\mathbf{k},\sigma})} \\ &= \sum_{\{n_{\mathbf{k},\sigma}\}} \prod_{\mathbf{k},\sigma} e^{-\beta(\varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) - \mu) n_{\mathbf{k},\sigma}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \prod_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{n_{\mathbf{k}, \sigma}=0,1} e^{-\beta(\varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k})-\mu)n_{\mathbf{k}, \sigma}} \\
&= \prod_{\mathbf{k}, \sigma} (1 + e^{-\beta(\varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k})-\mu)})
\end{aligned}$$

großkanonisches Potenzial:

$$\Omega = -kT \ln \Xi = -kT \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \ln(1 + e^{-\beta(\varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k})-\mu)})$$

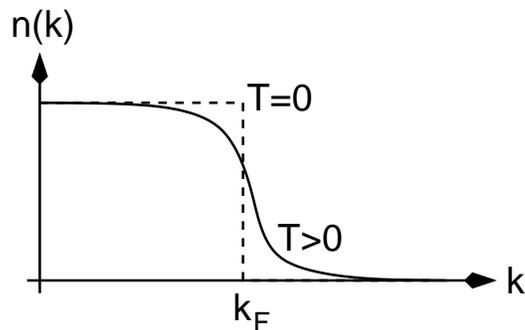
mittlere Besetzungszahl:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle &= \frac{\partial \Omega}{\partial \varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k})} & (\langle A \rangle = \partial \Omega / \partial \lambda, H = H_0 + \lambda A) \\
&= -kT \frac{-\beta}{1 + e^{-\beta(\varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k})-\mu)}} e^{-\beta(\varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k})-\mu)} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k})-\mu)} + 1} = f(\varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) - \mu)
\end{aligned}$$

Fermi-Verteilungsfunktion:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\beta E} + 1}$$

\mathbf{k} quasi-kontinuierlich ($\Delta k = (2\pi^3/V) \rightarrow 0$ für $V \rightarrow \infty$)



für $T = 0$ ist:

$$f(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) = \Theta(\mu - \varepsilon(\mathbf{k})) = \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon(\mathbf{k}))$$

$\varepsilon_F \equiv \mu(T = 0)$: Fermi-Energie

\mathbf{k} mit $\varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) = \varepsilon_F$: Fermi-Wellenvektor

$\{\mathbf{k} | \varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) = \varepsilon_F\}$: Fermi-Fläche (im Feld spinaufgespalten)

Magnetisierung:

$$M = -\frac{1}{V} \frac{\partial \Omega}{\partial B} = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\partial \Omega}{\partial \varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k})} \frac{\partial \varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k})}{\partial B} = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} f(\varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) - \mu) z_{\sigma} \mu_B$$

$$M = -\frac{\mu_B}{V} \langle \widehat{N}_{e, \uparrow} \rangle - \langle \widehat{N}_{e, \downarrow} \rangle$$

Zustandsdichte

$$\begin{aligned} \rho_{\sigma}^{(0)}(E) &= \text{Anzahl Zustände } \mathbf{k}, \sigma \text{ mit } E < \varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) < E + \Delta \text{ pro } \Delta \\ &= \frac{1}{\Delta} \left(\sum_{\mathbf{k}} \Theta(E + \Delta - \varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k})) - \sum_{\mathbf{k}} \Theta(E - \varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k})) \right) \end{aligned}$$

$\Delta \rightarrow 0$, also:

$$\rho_{\sigma}^{(0)}(E) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - \varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k}))$$

für $\varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ist:

$$\begin{aligned} \rho_{\sigma}^{(0)}(E) &= \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{\infty} dk k^2 \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{\partial}{\partial E} \int_0^{\infty} dk k^2 \Theta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{\partial}{\partial E} \frac{1}{3} k^3 \Big|_{k=\sqrt{2mE}/\hbar} \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \right)^3 \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{1}{3} \left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \right)^3 \frac{3}{2} E^{1/2} \end{aligned}$$

$$\rho_{\sigma}^{(0)}(E) = \frac{(2m)^{3/2} V}{4\pi^2 \hbar^3} E^{1/2}$$

für $T = 0$ ist:

$$\langle \widehat{N}_{e, \sigma} \rangle = \int_0^{\varepsilon_F} dE \rho_{\sigma}^{(0)}(E)$$

also:

$$\langle \widehat{N}_{e, \sigma} \rangle = \frac{(2m)^{3/2} V}{4\pi^2 \hbar^3} \frac{2}{3} \varepsilon_F^{3/2}$$

damit ist:

$$M = -\frac{1}{V} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE \rho_{\sigma}^{(0)}(E) f(E - \mu) z_{\sigma} \mu_B$$

und

$$\chi = \mu_0 \frac{\partial M}{\partial B} = -\frac{\mu_0 \mu_B}{V} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{\partial}{\partial B} \rho_{\sigma}^{(0)}(E) f(E - \mu) z_{\sigma}$$

wegen

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial B} \rho_{\sigma}^{(0)}(E) &= \frac{\partial}{\partial B} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - \varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k})) = -\frac{\partial}{\partial E} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - \varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k})) \frac{\partial \varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k})}{\partial B} \\ &= -z_{\sigma} \mu_B \frac{\partial}{\partial E} \rho_{\sigma}^{(0)}(E) \end{aligned}$$

ist also ($z_{\sigma}^2 = 1$):

$$\chi = \chi(T, \mu, B) = \frac{\mu_0 \mu_B^2}{V} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE \rho_{\sigma}^{(0)'}(E) f(E - \mu)$$

Temperaturabhängigkeit? →

Sommerfeld-Entwicklung: ($F(\omega)$: T -unabhängig, regulär in Fermi-Schicht)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE f(E - \mu) F(E) = \int_{-\infty}^{\mu} dE F(E) + \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n T^{2n} F^{(2n-1)}(\mu)$$

mit $\alpha_n = 2 \left(1 - \frac{1}{2^{2n-1}}\right) \zeta(2n)$ und $\zeta(n) = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p^n}$ (Riemannsches ζ -Fkt.)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE f(E - \mu) F(E) = \int_{-\infty}^{\mu} dE F(E) + \frac{\pi^2}{6} T^2 F'(\mu) + \mathcal{O}(T/\mu)^4$$

$$\chi = \frac{\mu_0 \mu_B^2}{V} \sum_{\sigma} \left(\int_{-\infty}^{\mu} dE \rho_{\sigma}^{(0)'}(E) + \frac{\pi^2}{6} T^2 \rho_{\sigma}^{(0)''}(E) + \dots \right)$$

mit $\rho^{(0)}(E) = \sum_{\sigma} \rho_{\sigma}^{(0)}(E)$

$T = 0$:

$$\chi = \frac{\mu_0 \mu_B^2}{V} \rho^{(0)}(\varepsilon_F)$$

→ magnetischer Response bestimmt durch totale Zustandsdichte

$T > 0$:

beachte: μ ist (für festes N_e) temperaturabhängig

- $\langle \widehat{N}_e \rangle = \int dE f(E - \mu) \rho^{(0)}(E) = N_e(T = 0) = N_e$
- Sommerfeld-Entwicklung: $N_e = N_e(T, V, \mu)$
- Auflösen $\rightarrow \mu = \mu(T, V, N_e) = \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{6} T^2 \frac{\rho^{(0)'(\varepsilon_F)}{\rho^{(0)}(\varepsilon_F)} + \dots$
- Einsetzen in Sommerfeld-Entwicklung von $\chi = \chi(T, V, \mu)$
- $\chi = \chi(T = 0) \left(1 + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \left(\frac{\rho^{(0)''(\varepsilon_F)}{\rho^{(0)}(\varepsilon_F)} - \frac{\rho^{(0)'(\varepsilon_F)^2}{\rho^{(0)}(\varepsilon_F)^2} \right) \right)$

für $\varepsilon_\sigma(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, $\rho^{(0)}(E) = \text{const.} \sqrt{E}$ ist:

$$\chi = \chi(T = 0) \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \frac{(kT)^2}{\varepsilon_F^2} + \dots \right)$$

beachte: $\varepsilon_F \sim \text{eV}$, $kT_{\text{Raum}} \approx 1/40$

\rightarrow nahezu T -unabhängige Pauli-Spinsuszeptibilität (Pauli-Prinzip!)

Paramagnetismus:

lokalierte Momente	itinerante Momente
$\chi \propto 1/T$	nahezu T -unabhängiges χ
Curie-Verhalten	Pauli-Verhalten

2.3 Lokaler Spin

N_e itinerante Elektronen, $j = 1, \dots, N_e$: Teilchenindex

$s^{(j)}$ ist **keine Observable** (Ununterscheidbarkeitsprinzip)

statt dessen: $S_{\mathbf{k},z} = \frac{\hbar}{2} (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} - \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow})$

$S_{\mathbf{k},z}$ "Spin (z-Komponente) eines Elektrons im Zustand $|\mathbf{k}\rangle$ "

analog:

S_i "lokaler Spin bei \mathbf{R}_i "

oder

$$\mathbf{m}_i = -g\mu_B \mathbf{S}_i / \hbar \quad \text{“lokales Spinnmoment bei } \mathbf{R}_i \text{”}$$

Definition:

$$S_{iz} = \frac{\hbar}{2} (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})$$

mit $\hat{n}_{i\sigma}$ Besetzungszahloperator des Zustands $|i\sigma\rangle$ und

$$|i\sigma\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} |\mathbf{k}\sigma\rangle$$

x, y -Komponenten:

$$S_{ix} = \frac{1}{2} (S_{i+} + S_{i-})$$

$$S_{iy} = \frac{1}{2i} (S_{i+} - S_{i-})$$

es gilt:

$$\mathbf{S}_i = \mathbf{S}_i^\dagger \quad S_{i\pm} = S_{ix} \pm iS_{iy}$$

$S_{i\pm}$: Leiteroperatoren, d.h.

$$S_{i+}|i, \downarrow\rangle = \hbar|i, \uparrow\rangle$$

$$S_{i-}|i, \uparrow\rangle = \hbar|i, \downarrow\rangle$$

Darstellung mit Erzeugern und Vernichtern $c_{i\sigma}^\dagger, c_{i\sigma}$:

$$S_{i+} = \hbar c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} \quad S_{i-} = \hbar c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} = S_{i+}^\dagger$$

kompakt:

$$\mathbf{S}_{i\mu} = \frac{\hbar}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma'}^{(\mu)} c_{i\sigma'} \quad \mu = x, y, z$$

mit den Pauli-Matrizen:

$$\sigma^{(x)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^{(y)} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^{(z)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Drehimpulsalgebra:

$$[S_{ix}, S_{iy}]_- = i\hbar S_{iz} \quad (\text{und zyklisch})$$

$$[S_{ix}, S_{jy}]_- = i\hbar \delta_{ij} S_{iz} \quad (\text{und zyklisch})$$

gilt dann und nur dann wenn

$$[c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}^\dagger]_+ = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} \quad ([A, B]_+ = AB + BA)$$

fermionische Antivertauschungsrelationen

wegen $(c_{i\sigma}^\dagger)^2 = 0$ (Pauli-Prinzip) gilt:

$$\hat{n}_{i\sigma}^2 = (c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma})^2 = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger (1 - c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) c_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} = \hat{n}_{i\sigma}$$

→ Eigenwerte von $\hat{n}_{i\sigma}$: Besetzungszahlen $n_{i\sigma} = 0, 1$

→ Eigenwerte von $S_{iz} = \frac{\hbar}{2}(\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})$: $0, \pm 1/2$

→ $S = 0$ und $S = 1/2$, Eigenwerte von \mathbf{S}_i^2 : $0, (3/4)\hbar^2$

→ \mathbf{S}_i ist kein Spin-1/2!

beachte auch: $\mathbf{S}_i^2 = 3S_{iz}^2$

es gilt:

- $\mathbf{s}^{(j)}$: Spin des j -ten Elektrons, $j = 1, \dots, N_e$ (keine Obs.), $(\mathbf{s}^{(j)})^2 = (3/4)\hbar^2$
- \mathbf{S}_i : Spin am i -ten Gitterplatz, $i = 1, \dots, N$ (Observable), $\mathbf{S}_i^2 \neq \text{const.}$

aber:

Gesamtspin

$$\mathbf{S} = \sum_{j=1}^{N_e} \mathbf{s}^{(j)} = \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i$$

denn:

$$\mathbf{S} = \sum_{ii'\sigma\sigma'} \langle i\sigma^{(1)} | \mathbf{s}^{(1)} | i'\sigma'^{(1)} \rangle c_{i\sigma}^\dagger c_{i'\sigma'} = \sum_{i\sigma\sigma'} \langle i\sigma | \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} | i\sigma' \rangle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma'} = \sum_{i\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma'}$$

Kapitel 3

Kopplung magnetischer Momente

3.1 Dipol- vs. Coulomb-Wechselwirkung

Paramagnet: Ordnung der Momente durch äußeres Magnetfeld

Ferromagnet: Ordnung der Momente durch inneres Magnetfeld

$$\boxed{\text{Austauschfeld } B_A}$$

thermodynamisches Argument zur Abschätzung von B_A :

Kopplung der Momente durch Austauschfeld \Leftrightarrow thermische Fluktuationen

Ordnung \Leftrightarrow Unordnung

U minimal \Leftrightarrow S maximal

Zustand wird bestimmt durch minimale freie Energie:

$$F = U - TS = \min.$$

für $T = T_C$:

$$\boxed{\mu_B B_A \sim kT_C}$$

mit:

$\mu_B B_A$: Energie eines Moments im Austauschfeld

kT : thermische Energie

typische Curie-Temperaturen ferromagnetischer Materialien:

Material	T_C in K	kT_C in eV	B_A in T
Ni	630	0.055	940
Gd	290	0.025	430
EuO	70	0.006	100

vergleiche: Laborfeldstärken ~ 10 T

Austauschfeld B_A phänomenologisches Konzept, reale Wechselwirkung?

Dipol-Dipol-Wechselwirkung ?

magnetischer Dipol bei $\mathbf{R}_i = 0 \rightarrow$ Vektorpotenzial:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{m}_i \times \mathbf{r}}{r^3}$$

\mathbf{B} -Feld des magnetischen Moments:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{m}_i \times \mathbf{r}}{r^3} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{3\mathbf{n}(\mathbf{n}\mathbf{m}_i) - \mathbf{m}_i}{r^3} \quad (\mathbf{n} = \mathbf{r}/r)$$

Feld eines Moments bei $\mathbf{R}_i \neq 0$:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{3(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)((\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)\mathbf{m}_i) - (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)^2 \mathbf{m}_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|^5}$$

Feld aller Momente bei $\mathbf{r} = \mathbf{R}_j$:

$$\mathbf{B}(\mathbf{R}_j) = \sum_{i=1, \dots, L}^{i \neq j} \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{3\mathbf{R}_{ij}(\mathbf{R}_{ij}\mathbf{m}_i) - \mathbf{R}_{ij}^2 \mathbf{m}_i}{R_{ij}^5} \quad (\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)$$

Energie eines magnetischen Moments \mathbf{m}_j bei \mathbf{R}_j im Feld aller anderen:

$$E_j = -\mathbf{B}(\mathbf{R}_j)\mathbf{m}_j = \sum_i \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{R}_{ij}^2 \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j - 3(\mathbf{R}_{ij}\mathbf{m}_j)(\mathbf{R}_{ij}\mathbf{m}_i)}{R_{ij}^5}$$

Abschätzung: $z =$ Anzahl n.N., $|\mathbf{m}_i| \sim \mu_B$, $R_{ij} = d_{\text{n.N.}} \sim \text{\AA}$

$$E_j \sim \frac{\mu_0}{4\pi} z \frac{\mu_B^2}{d_{\text{n.N.}}^3} \sim 10^{-4} \text{ eV} \ll kT_C \sim 10 \text{ meV}$$

\rightarrow Dipol-Kopplung zu schwach!

magnetostatische (relativistische) WW \ll elektrost. (klassische) Coulomb-WW

- Problem: klassische Coulomb-Wechselwirkung $\frac{\rho(\mathbf{r}_i)\rho(\mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$ spinunabhängig!
- Konsequenz: Quantenmechanik (Pauli-Prinzip) notwendig

3.2 Weiß'scher Ferromagnet

phänomenologischer Ansatz:

- Austauschfeld proportional zur Magnetisierung: $B_A = \lambda\mu_0 M$
- permanente Momente verhalten sich wie ein Paramagnet mit durch J charakterisierter Brillouin-Funktion

also:

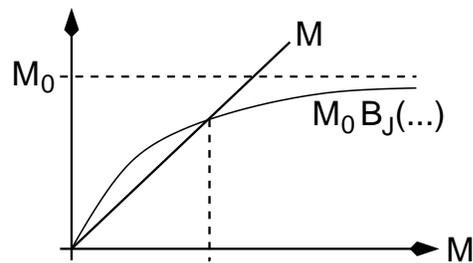
$$M = \frac{N}{V} J g_J \mu_B B_J(\beta g_J \mu_B B_A J)$$

$B_A = \lambda\mu_0 M \rightarrow$ nichtlineare Bestimmungsgleichung für M

Diskussion:

- $M = 0$ ist Lösung, **paramagnetische Lösung**
- $M \neq 0$ Lösung $\rightarrow -M$ Lösung
- Lösungen $M \neq 0$, falls:

$$\left. \frac{d}{dM} \frac{N}{V} J g_J \mu_B B_J(\beta g_J \mu_B B_A J) \right|_{M=0} > 1$$



- für $T > T_C$, $T \rightarrow T_C$ ist $M \rightarrow 0$, $B_A \rightarrow 0 \rightarrow$

$$M = \frac{N}{V} J g_J \mu_B B_J(\beta_C g_J \mu_B B_A J) \rightarrow \frac{N}{V} J g_J \mu_B \frac{J+1}{3J} (\beta_C g_J \mu_B B_A J)$$

$B_A = \lambda\mu_0 M$:

$$M = \frac{N}{V} g_J \mu_B \frac{1}{3} J(J+1) \beta_C g_J \mu_B \lambda \mu_0 M$$

also:

$$T_C = \frac{N}{V} \frac{1}{3k} \mu_0 \mu_B^2 g_J^2 J(J+1) \lambda$$

mit der Curie-Konstanten

$$C = \frac{N}{V} \frac{1}{3k} \mu_0 \mu_B^2 g_J^2 J(J+1)$$

ist:

$$\boxed{T_C = C\lambda} \quad \text{Curie-Temperatur}$$

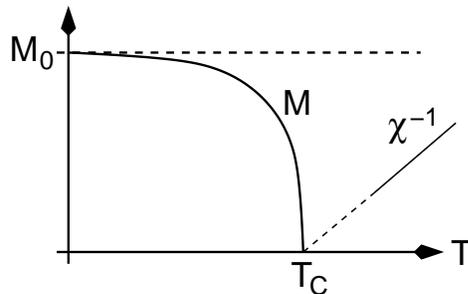
- für $T \rightarrow 0$ ist:

$$\beta \rightarrow \infty \quad B_J(x) \rightarrow \pm 1$$

also:

$$\boxed{M \rightarrow \pm M_0}$$

mit **Sättigungsmagnetisierung** $M_0 = \frac{N}{V} J g_J \mu_B$



- für $T > T_C$ ist $M = 0$ bzw. $M \neq 0$ nur für $B_0 \neq 0$:

$$M = \frac{N}{V} J g_J \mu_B B_J(\beta g_J \mu_B (B_0 + \lambda \mu_0 M) J)$$

$T \rightarrow \infty$:

$$M = \frac{N}{V} J g_J \mu_B \frac{J+1}{3J} (\beta g_J \mu_B (B_0 + \lambda \mu_0 M) J)$$

$$M = \frac{C}{T} \left(\frac{1}{\mu_0} B_0 + \lambda M \right)$$

auflösen:

$$M = \frac{1}{\mu_0} B_0 \frac{C}{T - \lambda C}$$

damit gilt:

$$\boxed{\chi = \mu_0 \left(\frac{\partial M}{\partial B_0} \right)_T = \frac{C}{T - T_C}}$$

Curie-Weiß-Gesetz

3.3 Magnetische Kopplung

$m_i = -S_i/\hbar$: lokales Spinnmoment bei R_i

magnetische Kopplung: m_j hat Vorzugsrichtung bei gegebenem festen m_i

→ kollektive Ordnung setzt magnetische Kopplung voraus

→ magnetische Kopplung aber nicht hinreichend für kollektive Ordnung

Bsp: Frustration

$$H = -JS_1S_2 - JS_2S_3 - JS_3S_1$$

S_i : lokaler Spin mit $s = 1/2$, $J < 0$: antiferromagnetische Kopplung

kollektive Ordnung auf Dreiecksgitter mit antiferromagnetischer Kopplung ?

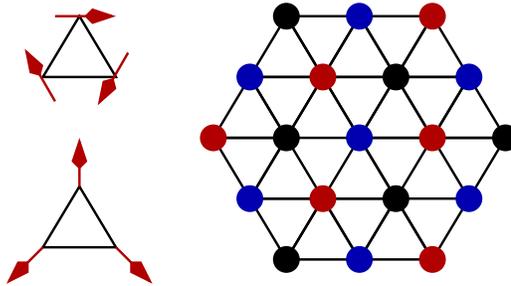
$$H = -\frac{J}{2}(S_1 + S_2 + S_3)^2 + \frac{J}{2}(S_1^2 + S_2^2 + S_3^2)$$

$$H = -\frac{J}{2}(S_1 + S_2 + S_3)^2 + \frac{J}{2}3S(S + 1)$$

klassisch: $H = \min$ für

$$S_1 + S_2 + S_3 = 0$$

nichtkollineare 120° Ordnung auf 3 Untergittern



auch für Quantenspins! ($T = 0$)

Frage:

Wie kann die spinunabhängige Coulomb-Wechselwirkung zu einer magnetischen Kopplung führen ?

Antwort:

Pauli-Prinzip, Fermi-Statistik

Beispiel:

$N_e = 2$ ununterscheidbare Fermionen ($s = 1/2$), spinunabhängiger Hamiltonian:

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

Hilbert-Raum:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{Bahn}} \otimes \mathcal{H}_{\text{Spin}}$$

H spinunabhängig \rightarrow Eigenzustand faktorisiert in Bahn- und Spinanteil:

$$|\Psi\rangle = |\text{Bahn}\rangle |\text{Spin}\rangle$$

ONB von $\mathcal{H}_{\text{Spin}}$:

Singulett, antisymmetrisch unter Teilchenaustausch:

$$|S = 0, M_S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle^{(1)} |\downarrow\rangle^{(2)} - |\downarrow\rangle^{(1)} |\uparrow\rangle^{(2)})$$

Triplet, symmetrisch unter Teilchenaustausch

$$|S = 1, M_S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle^{(1)} |\downarrow\rangle^{(2)} + |\downarrow\rangle^{(1)} |\uparrow\rangle^{(2)})$$

$$|S = 1, M_S = 1\rangle = |\uparrow\rangle^{(1)} |\uparrow\rangle^{(2)}$$

$$|S = 1, M_S = -1\rangle = |\downarrow\rangle^{(1)} |\downarrow\rangle^{(2)}$$

gesamter Zustand antisymmetrische \rightarrow 4 Möglichkeiten:

$$|\Psi\rangle = |\text{Bahn}\rangle^{(+)} |S = 0, M_S = 0\rangle$$

$$|\Psi\rangle = |\text{Bahn}\rangle^{(-)} |S = 1, M_S\rangle$$

H wirkt nur auf Bahnanteil:

$$H|\text{Bahn}\rangle^{(\pm)} = E^{(\pm)}|\text{Bahn}\rangle^{(\pm)}$$

unterschiedliche Zustände \rightarrow

$$E^{(+)} \neq E^{(-)} \quad \text{möglich}$$

\rightarrow bevorzugte Parallel-/Antiparallelstellung der Spins möglich !

\rightarrow magnetische Kopplung

effektiver Spin-Hamiltonian:

definiere:

$$H_{\text{eff}} = C_0 - J\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2$$

mit

$$H_{\text{eff}} = C_0 - \frac{J}{2} [(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 - \mathbf{S}_1^2 - \mathbf{S}_2^2] = C_0 + \frac{3\hbar^2}{4}J - \frac{J}{2}\mathbf{S}^2$$

ist dann

$$H_{\text{eff}}|\text{Bahn}\rangle^{(+)}|S = 0, 0\rangle = \left(C_0 + \frac{3\hbar^2}{4}J\right)|\text{Bahn}\rangle^{(+)}|S = 0, 0\rangle$$

und

$$H_{\text{eff}}|\text{Bahn}\rangle^{(-)}|S = 1, M_S\rangle = \left(C_0 + \frac{3\hbar^2}{4}J - \frac{J}{2}2\hbar^2\right)|\text{Bahn}\rangle^{(-)}|S = 1, M_S\rangle$$

wähle

$$C_0 = \frac{1}{4}(E^{(+)} + 3E^{(-)}) \quad \boxed{J = \frac{1}{\hbar^2}(E^{(+)} - E^{(-)})}$$

also:

$$\boxed{H = H_{\text{eff}}}$$

***J*: Austauschwechselwirkung**

$J > 0$: ferromagnetische Kopplung

$J < 0$: antiferromagnetische Kopplung

3.4 Direkte Austauschwechselwirkung

mikroskopische Bedeutung der Austauschwechselwirkung?

Zusammenhang mit Coulomb-Wechselwirkung?

Bsp: 2-Elektronen-System (Heitler-London-Verfahren)

$$\boxed{H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + V(\mathbf{r}_1) + V(\mathbf{r}_2) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}$$

H : spinunabhängig, symmetrisch unter Teilchenvertauschung

$$H = H_1 + H_2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = H_{\text{frei}} + H_{\text{WW}}$$

die Teilprobleme

$$H_1|\varphi_m^{(1)}\rangle = E_m|\varphi_m^{(1)}\rangle$$

$$H_2|\chi_n^{(2)}\rangle = E_n|\chi_n^{(2)}\rangle$$

seien gelöst, $|\varphi_m^{(1)}\rangle, |\chi_n^{(2)}\rangle$: Bahnanteile

definiere für festes m, n :

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\varphi_m^{(1)}\rangle |\chi_n^{(2)}\rangle \pm |\chi_n^{(1)}\rangle |\varphi_m^{(2)}\rangle \right)$$

es ist:

$$H_{\text{frei}} |\psi^{(\pm)}\rangle = (E_m + E_n) |\psi^{(\pm)}\rangle$$

die Eigenenergie $E_m + E_n$ ist also 4-fach entartet:

$$|\Psi\rangle = |\psi^{(+)}\rangle |S = 0, 0\rangle$$

$$|\Psi\rangle = |\psi^{(-)}\rangle |S = 1, M_S\rangle$$

wegen Ununterscheidbarkeitsprinzip gilt strenggenommen:

$$\{|\varphi_m\rangle\} = \{|\chi_m\rangle\}$$

Kerne bei \mathbf{R}_1 bzw. $\mathbf{R}_2 \rightarrow$

$V(\mathbf{r})$ hat Singularitäten bei \mathbf{R}_1 und $\mathbf{R}_2 \rightarrow$

Elektron an Kern bei \mathbf{R}_1 oder bei \mathbf{R}_2 gebunden

definiere daher:

bei \mathbf{R}_1 lokalisierte Zustände:

$$\{|\varphi_m\rangle\} \quad H_1^{(\text{at})} |\varphi_m^{(1)}\rangle = E_m |\varphi_m^{(1)}\rangle$$

bei \mathbf{R}_2 lokalisierte Zustände:

$$\{|\chi_m\rangle\} \quad H_2^{(\text{at})} |\chi_n^{(2)}\rangle = E_n |\chi_n^{(2)}\rangle$$

mit rein atomaren Hamiltonians $H_1^{(\text{at})}, H_2^{(\text{at})}$ (Singularität nur bei \mathbf{R}_1 oder \mathbf{R}_2)

also ist für $|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2| \rightarrow \infty$:

$$\langle \varphi_m | \chi_n \rangle \rightarrow 0$$

für die jeweiligen Grundzustände insbesondere:

$$\langle \varphi_0 | \chi_0 \rangle \rightarrow 0$$

i.allg. ist für $|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2| < \infty$:

$$\langle \varphi_0 | \chi_0 \rangle = L \ll 1 \quad \text{Überlappintegral}$$

betrachte jetzt volles Problem $H_{\text{frei}} + H_{\text{WW}}$

approximative Grundzustandsberechnung mittels Ritzschem Variationsprinzip

$$0 = \delta \frac{\langle \psi^{(\pm)} | H | \psi^{(\pm)} \rangle}{\langle \psi^{(\pm)} | \psi^{(\pm)} \rangle}$$

Testzustand (Bahnanteil):

$$\boxed{|\psi^{(\pm)}\rangle = c_1 |\varphi_0^{(1)}\rangle |\chi_0^{(2)}\rangle + c_2 |\chi_0^{(1)}\rangle |\varphi_0^{(2)}\rangle} \quad c_1, c_2: \text{Variationsparameter}$$

beachte: polare Zustände der Form $|\varphi_0^{(1)}\rangle |\varphi_0^{(2)}\rangle$ sind energetisch ungünstig

es ist:

$$\langle \psi^{(\pm)} | \psi^{(\pm)} \rangle = c_1^2 + c_2^2 + 2c_1 c_2 L^2$$

und

$$\begin{aligned} \langle \psi^{(\pm)} | H | \psi^{(\pm)} \rangle &= c_1^2 \langle \varphi_0^{(1)} | \langle \chi_0^{(2)} | H | \varphi_0^{(1)} \rangle | \chi_0^{(2)} \rangle + c_2^2 \langle \chi_0^{(1)} | \langle \varphi_0^{(2)} | H | \chi_0^{(1)} \rangle | \varphi_0^{(2)} \rangle \\ &+ c_1 c_2 \langle \varphi_0^{(1)} | \langle \chi_0^{(2)} | H | \chi_0^{(1)} \rangle | \varphi_0^{(2)} \rangle + c_1 c_2 \langle \chi_0^{(1)} | \langle \varphi_0^{(2)} | H | \varphi_0^{(1)} \rangle | \chi_0^{(2)} \rangle \end{aligned}$$

also:

$$\langle \psi^{(\pm)} | H | \psi^{(\pm)} \rangle = (c_1^2 + c_2^2 + 2c_1 c_2 L^2) 2E_0 + (c_1^2 + c_2^2) D + 2c_1 c_2 E$$

mit

$$\boxed{D = \langle \varphi_0^{(1)} | \langle \chi_0^{(2)} | H_{\text{WW}} | \varphi_0^{(1)} \rangle | \chi_0^{(2)} \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \iint d^3r_1 d^3r_2 \frac{|\varphi_0(\mathbf{r}_1)|^2 |\chi_0(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}$$

direktes Coulomb-Integral

$$\boxed{E = \langle \varphi_0^{(1)} | \langle \chi_0^{(2)} | H_{\text{WW}} | \chi_0^{(1)} \rangle | \varphi_0^{(2)} \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \iint d^3r_1 d^3r_2 \frac{\varphi_0^*(\mathbf{r}_1) \chi_0^*(\mathbf{r}_2) \varphi_0(\mathbf{r}_2) \chi_0(\mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}$$

Austauschintegral

insgesamt:

$$\frac{\langle \psi^{(\pm)} | H | \psi^{(\pm)} \rangle}{\langle \psi^{(\pm)} | \psi^{(\pm)} \rangle} = \frac{(c_1^2 + c_2^2 + 2c_1 c_2 L^2) 2E_0 + (c_1^2 + c_2^2) D + 2c_1 c_2 E}{c_1^2 + c_2^2 + 2c_1 c_2 L^2}$$

Ableiten nach c_1 und Null Setzen führt auf:

$$c_1^2 = c_2^2 \quad \text{also:} \quad c_2 = \pm c_1$$

→ (Anti-)Symmetrisierungsbedingung erfüllt

einsetzen in Normierungsbedingung:

$$1 = \langle \psi^{(\pm)} | \psi^{(\pm)} \rangle = c_1^2 + c_2^2 + 2c_1 c_2 L^2 = 2c_1^2 \pm 2c_1^2 L^2 = 2c_1^2 (1 \pm L^2)$$

$$c_1 = \pm c_2 = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm L^2)}}$$

für die totale Grundzustandsenergie folgt:

$$\frac{\langle \psi^{(\pm)} | H | \psi^{(\pm)} \rangle}{\langle \psi^{(\pm)} | \psi^{(\pm)} \rangle} = \frac{(2 \pm 2L^2)2E_0 + 2D \pm 2E}{2 \pm 2L^2}$$

also:

$$E^{(\pm)} = 2E_0 + \frac{D \pm E}{1 \pm L^2}$$

effektiver Spin-Hamiltonian:

$$H_{\text{eff}} = C_0 - JS_1S_2$$

mit

$$J = \frac{1}{\hbar^2}(E^{(+)} - E^{(-)})$$

also:

$$J = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{D + E}{1 + L^2} - \frac{D - E}{1 - L^2} \right)$$

bei kleinem Überlapp $L \ll 1$:

$$J = 2E/\hbar^2$$

Heisenberg:

Der (nichtklassische) Austauschanteil der Coulomb-Wechselwirkung ist für magnetische Kopplung verantwortlich !

Verallgemeinerung auf Gitter: → **Heisenberg-Modell**

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j$$

Diskussion:

- effektives Gittermodell mit magnetischer Kopplung z.B. zwischen nächsten Nachbarn
- kollektive Ordnung? Stabilität gegenüber thermischen und Quanten-Fluktuationen?
- Variationsansatz vernachlässigt polare Zustände
 - Elektronen sind lokalisiert ($L \rightarrow 0$)
 - nur für Isolatoren geeignet (z.B. EuO, nicht: Fe, Co, Ni)
- aber: $E \neq 0$ nur für $L \neq 0$

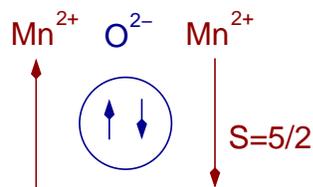
- direkter Austausch als Kopplungsmechanismus oft nicht dominant
andere Modelle des Magnetismus bzw. Heisenberg-Modell mit anderer Interpretation für J realistischer

3.5 Superaustausch

Übergangsmetalloxide (z.B. MnO: Mn $3d^5 4s^2$, O: $2p^4$)

- lokale magnetische Momente der Kationen koppeln (Mn, $S = 5/2$, 1. Hundsche Regel)
- kein Überlapp der Mn-Orbitale
- **indirekte Kopplung** über Anion (O): Mn-O-Mn **Superaustausch**
- Isolatoren

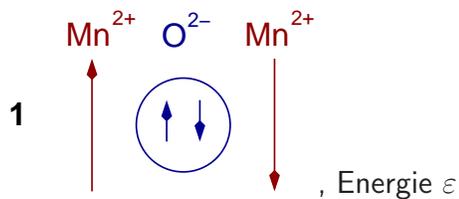
einfaches Modell:



Kopplung der Mn-Spins ?

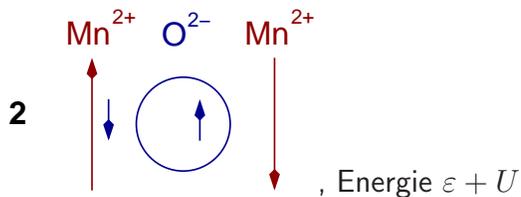
energetisch mögliche Zustände:

Zustand



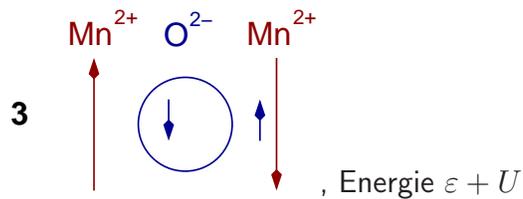
– O-2p-Elektronen am O-Atom, bilden Spin-Singulett

Zustand



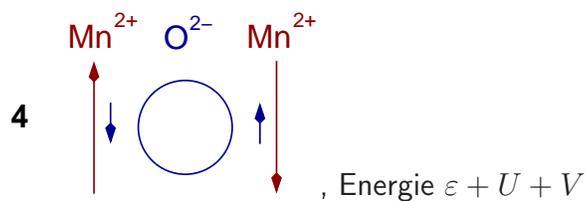
– 1. Hund'sche Regel → Spin des O-2p-Elektron antiparallel zum Mn-Spin

Zustand



– U : Coulomb-Wechselwirkungsenergie im 3d-Zustand

Zustand



– nur möglich bei antiparalleler Orientierung der Mn-Spins

Hopping-Integral:

$$t = \langle 1|H|2\rangle = \langle 1|H|3\rangle$$

weiter ist:

$$\langle 2|H|4\rangle = \langle 3|H|4\rangle = t \quad \text{falls Mn-Spins antiparallel:}$$

$$\langle 2|H|4\rangle = \langle 3|H|4\rangle = 0 \quad \text{falls Mn-Spins parallel:}$$

also:

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon & t & t & 0 \\ t & \varepsilon + U & 0 & t/0 \\ t & 0 & \varepsilon + U & t/0 \\ 0 & t/0 & t/0 & \varepsilon + U + V \end{pmatrix}$$

es folgt: Grundzustand für **antiparallele** Mn-Spins

qualitativ: Hopping beider O-Elektronen auf Mn nur bei antiparallelen Mn-Spins möglich und energetisch günstig, da kinetische Energie abgesenkt wird

Superaustausch bewirkt antiferromagnetische Kopplung

noch weiter vereinfachtes Modell:

- $N = 2$ nichtentartete (s-artige) Orbitale an benachbarten Gitterplätzen
- Hilbert-Raum am Platz i :
 - $|i, 0\rangle$, Energie 0
 - $|i, \uparrow\rangle$, Energie ε
 - $|i, \downarrow\rangle$, Energie ε
 - $|i, \uparrow\downarrow\rangle$, Energie $\varepsilon + U$
- "Hubbard- U " intraatomare Coulomb-Wechselwirkung
- $N_e = 2$ Elektronen insgesamt ($N_e = N$: Halbfüllung)
 - Grundzustand bei unabhängigen Orbitalen:
 - 1 Elektron pro Orbital → magnetisches Spinmoment, $S = 1/2$
- Hopping t zwischen den Orbitalen
 - $t \gg U$ → Elektronen delokalisiert → **Metall**, Sommerfeld-Modell
 - $U \gg t$ → Elektronen immobil (Energiestrafe U) → **Mott-Isolator**

Hamilton-Operator in 2. Quantisierung:

$$H = \varepsilon \sum_{i=1,2} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + U \sum_{i=1,2} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + t(c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} + c_{2\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} + c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} + c_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow})$$

H ist spinunabhängig

Zustände mit $N_e = 2$:

$$|1\rangle = |1 \uparrow, 1 \downarrow\rangle$$

$$|2\rangle = |2 \uparrow, 2 \downarrow\rangle$$

$$|3\rangle = |1 \uparrow, 2 \downarrow\rangle$$

$$|4\rangle = |2 \uparrow, 1 \downarrow\rangle$$

$$|5\rangle = |1 \uparrow, 2 \uparrow\rangle$$

$$|6\rangle = |1 \downarrow, 2 \downarrow\rangle$$

Hamilton-Matrix:

$$H = \left(\begin{array}{cccc|cc} 2\varepsilon + U & 0 & t & -t & & \\ 0 & 2\varepsilon + U & t & -t & & 0 \\ t & t & 2\varepsilon & 0 & & \\ -t & -t & 0 & 2\varepsilon & & \\ \hline & & & & 2\varepsilon & 0 \\ & & & & 0 & 2\varepsilon \end{array} \right)$$

Grundzustand: Singulett ($S = 0$)

$$E^{(-)} = \frac{U}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{U^2 + 16t^2} = -\frac{4t^2}{U} + \mathcal{O}(t^3/U^2)$$

erster angeregter Zustand, Triplett ($S = 1$)

$$E^{(+)} = 0 \quad (3\text{-fach entartet})$$

also:

$$H_{\text{eff}} = C_0 - J\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2$$

mit $J = (E^{(+)} - E^{(-)})/\hbar^2$

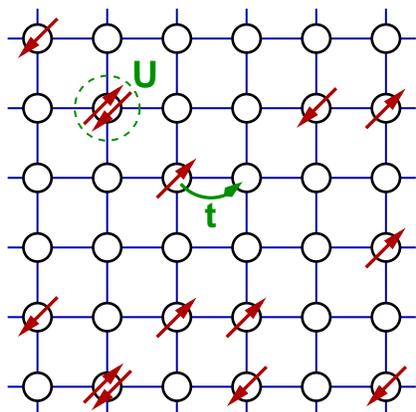
$$J = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{4t^2}{U}$$

antiferromagnetische Kopplung

Verallgemeinerung auf ein Gittermodell

$$H = \varepsilon \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow} n_{i\sigma} + t \sum_{i,j}^{n.N.} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

Hubbard-Modell



- (neben Heisenberg-Modell) ein Standardmodell magnetischer Ordnung

- kinetische Energie und spinunabhängige Coulomb-Wechselwirkung
- Hubbard- U : stark abgeschirmte, rein lokale Wechselwirkung
System mit schmalen Bändern (3d, 4f)
- $U \gg t$ und Halbfüllung: Mott-Isolator
 $U \ll t$ oder "Dotierung": Metall
- Superaustausch \rightarrow antiferromagnetische Kopplung bei Halbfüllung

Ableitung eines effektiven Niederenergiemodells für $U \gg t$:
(für komplettes Gittermodell!)

es ist:

$$H = T + V$$

mit

$$T = t \sum_{ij} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}, \quad V = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

(nach Wahl des Energienullpunkts, so dass $\varepsilon = 0$)

definiere

$$\hat{d} = \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

Eigenwertgleichung:

$$\hat{d}|d, r\rangle = d|d, r\rangle$$

d : Anzahl doppelt besetzter Gitterplätze, hochgradig entartet

definiere:

$$P_d = \sum_r |d, r\rangle \langle d, r| \quad (\text{Projektor auf den } d\text{-Unterraum})$$

Orthogonalität und Vollständigkeit

$$P_d P_{d'} = \delta_{dd'} P_d \quad \sum_{d=0}^L P_d = \mathbf{1}$$

Zerlegung von H :

$$H = \left(\sum_d P_d \right) H \left(\sum_{d'} P_{d'} \right)$$

$$T_{\Delta d} = \sum_d P_{d+\Delta d} T P_d$$

$T_{\Delta d}$ ändert d um Δd

$$H = T_0 + T_1 + T_{-1} + V$$

betrachte

$$H_0 = T_0 + V$$

als gelöst $(H_0|d, r\rangle = \varepsilon_d|d, r\rangle \quad \forall r)$ und

$$H_1 = T_1 + T_{-1} = \mathcal{O}(t)$$

als kleine Störung

Resolventen-Methode

Schrödinger-Gleichung:

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

Zerlegung von $|\Psi\rangle$:

$$|\Psi\rangle = \sum_{d=0}^{\infty} P_d|\Psi\rangle = |\Psi_0\rangle + |\Psi_1\rangle + \dots$$

hier:

$$|\Psi\rangle = |\Psi_0\rangle + |\Psi_{>}\rangle \quad |\Psi_{>}\rangle = |\Psi_1\rangle + \dots$$

Schrödinger-Gleichung

$$\begin{pmatrix} T_0 & T_{-1} & & & \\ T_1 & T_0 + U & T_{-1} & & \\ & T_1 & T_0 + 2U & \dots & \\ & & \dots & \dots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\Psi_0\rangle \\ |\Psi_1\rangle \\ |\Psi_2\rangle \\ \dots \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |\Psi_0\rangle \\ |\Psi_1\rangle \\ |\Psi_2\rangle \\ \dots \end{pmatrix}$$

hier:

$$\begin{pmatrix} T_0 & T_{-1} \\ T_1 & H_{>} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\Psi_0\rangle \\ |\Psi_{>}\rangle \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |\Psi_0\rangle \\ |\Psi_{>}\rangle \end{pmatrix}$$

2. Gleichung:

$$T_1|\Psi_0\rangle + H_{>}|\Psi_{>}\rangle = E|\Psi_{>}\rangle$$

$$|\Psi_{>}\rangle = \frac{1}{E - H_{>}} T_1|\Psi_0\rangle$$

1. Gleichung:

$$T_0|\Psi_0\rangle + T_{-1}|\Psi_{>}\rangle = E|\Psi_0\rangle$$

$$\left(T_0 + T_{-1} \frac{1}{E - H_{>}} T_1\right) |\Psi_0\rangle = E |\Psi_0\rangle$$

also:

$$H_{\text{eff}} = T_0 + T_{-1} \frac{1}{E - H_{>}} T_1$$

es ist $H_{>} = U + \mathcal{O}(t)$ im $d = 1$ -Unterraum

für $E = \mathcal{O}(t)$ ($d = 0$ -Unterraum) ist also:

$$H_{\text{eff}} = T_0 - \frac{1}{U} T_{-1} T_1 + \mathcal{O}(t^3/U^2)$$

- andere Methoden zur Ableitung von effektiven Niederenergiemodellen:
kanonische Transformation oder Störungstheorie
- Resolventenmethode algebraisch am wenigsten aufwändig
- gleiches Resultat
- Behandlung höherer Ordnungen: Chernyshev et al, cond-mat/0407255

$T_0 = ?$

für $N_e = N$ (Halbfüllung) ist:

$$T_0 = P_0 T P_0 = t P_0 \sum_{ij}^{n.N.} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} P_0 = 0$$

allgemein:

$$T_0 = t \sum_{ij}^{n.N.} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} (1 - n_{i-\sigma}) (1 - n_{j-\sigma}) c_{j\sigma}$$

zweiter Term: $-\frac{1}{U} T_{-1} T_1$

mit lokalen Spins

$$\mathbf{S}_{i\mu} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^{\dagger} \sigma_{\sigma\sigma'}^{(\mu)} c_{i\sigma'} \quad \mu = x, y, z$$

ist

$$-\frac{1}{U} T_{-1} T_1 = -\frac{J}{2} \sum_{ij}^{n.N.} \left(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} \right)$$

mit

$$J = -\frac{4t^2}{U}$$

insgesamt folgt:

$$H_{\text{eff}} = t \sum_{ij} \sum_{\sigma}^{n.N.} c_{i\sigma}^{\dagger} (1 - n_{i-\sigma}) (1 - n_{j-\sigma}) c_{j\sigma} - \frac{J}{2} \sum_{ij}^{n.N.} \left(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} \right)$$

(*t*-*J*-Modell)

$H_{\text{eff}} = H$ im $d = 0$ -Unterraum bis auf Terme der Ordnung $\mathcal{O}(t^3/U^2)$ für $N_e = N$ und Terme der Ordnung $\mathcal{O}(t^2/U)$ für $N_e < N$.

für Halbfüllung ($N_e = N$) ist:

$$H_{\text{eff}} = -\frac{J}{2} \sum_{ij}^{n.N.} \left(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} \right)$$

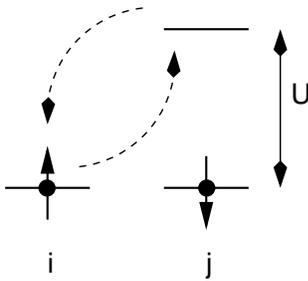
(Heisenberg-Modell)

Diskussion:

- Herausprojizieren hochenergetischer Zustände
 → einfachere effektive Modelle mit weniger Freiheitsgraden
 (Idee der Renormierungsgruppe: Systematisierung dieses Verfahrens, "Fluss" der Wechselwirkungsparameter: $U \rightarrow J$)
- $N_e = N$: Niederenergiesektor des Hubbard-Modells: nur Spindynamik
 Hopping wegen "Energistrafe" $U/t \rightarrow \infty$ unterdrückt
- für $N_e = N$ ist $\mathbf{S}_i^2 = 3S_{iz}^2 = 3(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 2d_i)/4 = 3/4$ im $d = 0$ -Unterraum
 → $\mathbf{S}_i^2 = S(S + 1)$ mit $S = 1/2$
- Abbildung auf antiferromagnetisches Heisenberg-Modell, $J < 0$

Anderson-Superaustausch-Mechanismus

- kinetische Energie + spinunabhängige Coulomb-WW + Pauli-Prinzip → effektive Spin-Spin-Wechselwirkung
- anschaulich: bei AF-Ordnung ist (virtuelles) nächst-Nachbar-Hopping (hin und zurück) möglich (Pauli-Prinzip) und führt zu Absenkung der kinetischen Energie

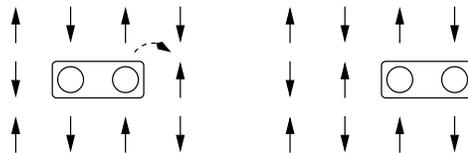


- t - J -Modell: Hopping möglich

$N = L - 1$: Hopping führt zu Frustration des AF → String-Potenzial



gepaarte Löcher sind mobiler → Supraleitung ?



3.6 Doppelaustausch

indirekte **ferromagnetische** magnetische Kopplung

Hintergrund:

- Manganate, z.B.: Sr-dotiertes LaMnO_3 :
 $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$
- $D = 3$ kubisches Gitter
- antiferromagnetisch für $x = 0$
- ferromagnetisch in gewissem Dotierungsbereich x
- kolossaler Magnetowiderstandseffekt (CMR):
Änderung der Leitfähigkeit um mehrere Größenordnungen in Abhängigkeit von äußerem Magnetfeld

atomare Elektronenkonfigurationen:



Ausgangsverbindung ($x = 0$): LaMnO_3



anderes Ende der Dotierungsreihe:

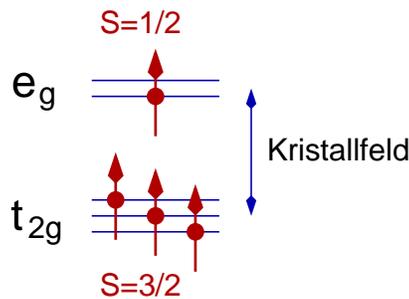
$x = 1$: SrMnO_3



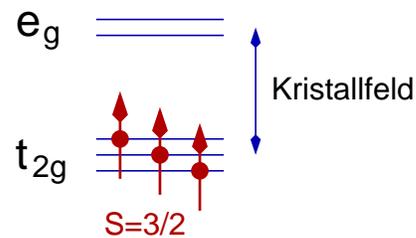
Leitfähigkeit?

- Abweichung von sphärischer Symmetrie in **kubischem Kristallfeld**
- Aufspaltung der 5 (atomaren) Zustände Mn-3d-Schale im Festkörper
3-fach entartetes t_{2g} -Level
2-fach entartetes e_g -Level
- Hundsche Regel:
3 Elektronen in t_{2g} mit Spin- $\uparrow \rightarrow$ lokaler $S = 3/2$ -Spin

Mn^{3+} -Ionen in $\text{La}^{3+} \text{Mn}^{3+} \text{O}^{2-}$:



Mn^{4+} -Ionen in $\text{Sr}^{2+} \text{Mn}^{4+} \text{O}^{2-}$:



- t_{2g} -Zustände bei höheren Bindungsenergien
- Band mit geringer Dispersion \rightarrow lokales Spin-Moment $S = 3/2$

- breiteres e_g -Band mit itineranten Elektronen (Momenten)

aber:

$\text{La}^{3+}\text{Mn}^{3+}\text{O}^{2-}$ korrelationsinduzierter (Mott) Isolator

(Doppelbesetzung von e_g -Zuständen am gleichen Mn ungünstig)

$\text{Sr}^{2+}\text{Mn}^{4+}\text{O}^{2-}$ Band-Isolator

dotierte Systeme:



x Löcher im e_g -Band \rightarrow Ladungsträger \rightarrow Metall

intraatomare Kopplung zwischen itineranten und lokalisierten Momenten:

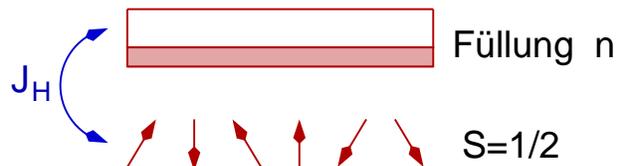
$$-J_H \mathbf{s} \mathbf{S}$$

Hundsche Kopplung, also $J_H > 0$

Modell der elektronischen Struktur:

$$H = t \sum_{ij} \sum_{\sigma}^{n.N.} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - J_H \sum_i \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{S}_i$$

ferromagnetisches Kondo-Gitter-Modell



Diskussion:

- vereinfachende Modellannahmen:
nicht-entartetes Valenzband
lokalisierter $S = 1/2$ -Spin
- Parameter: Bandfüllung $n = N_e/N$
- Störstellen-Kondo-Modell:

$$H = t \sum_{ij} \sum_{\sigma}^{n.N.} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - J_H \mathbf{s}_{i_0} \cdot \mathbf{S}_{i_0} \quad i_0: \text{Störstellenplatz}$$

- antiferromagnetisches Kondo-Gitter-Modell: $J_H \rightarrow J < 0$

effektives Niederenergiemodell zum **periodischen Anderson-Modell**
(analog zu Hubbard-Modell \rightarrow Heisenberg-Modell)

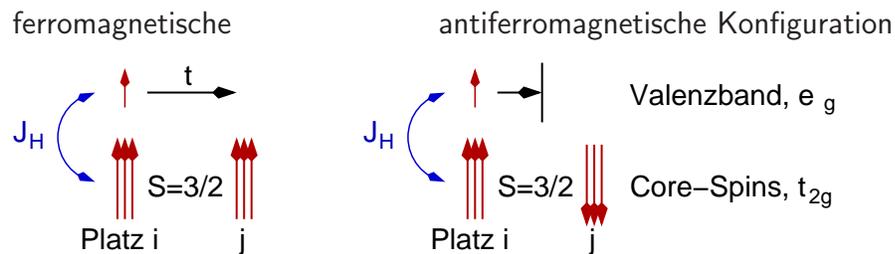
$$H = t \sum_{ij} \sum_{\sigma}^{n.N.} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + V \sum_{i\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma})$$

$$+ \varepsilon_f \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma} + U \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma} f_{i-\sigma}^{\dagger} f_{i-\sigma}$$

magnetische Kopplung:

keine direkte Kopplung der Mn- t_{2g} - $S = 3/2$ -Spins

indirekter **Doppelaustausch-Mechanismus**:



\rightarrow Hopping, also Absenken der kinetischen Energie nur für FM Konfiguration

CMR-Effekt:

- ferromagnetischer Doppelaustausch
 - \rightarrow kollektive ferromagnetische Ordnung für $T < T_C$
- für $T > T_C$: magnetisch ungeordnete lokale Momente:
 - \rightarrow starke Streuung der Leitungsbandelektronen
- äußeres Magnetfeld
 - \rightarrow ferromagnetische Ausrichtung der lokalen Momente
 - \rightarrow Reduzierung der Streuung, stark sinkender Widerstand
- Effekt bei T_C am stärksten, stärkster Response auf äußeres Feld

3.7 Stoner-Mechanismus

Fe, Co, Ni: metallischer Ferromagnetismus itineranter Elektronen

- keine lokalisierten Spins
- starke Coulomb-Wechselwirkung unter den 3d-Elektronen
- schmales 3d-Band, vereinfachend: nichtentartet
- Bandfüllung: nichtganzzahlig (Hybridisierung mit 4s-Zuständen)
- ferromagnetische Metalle

→ Hubbard-Modell

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

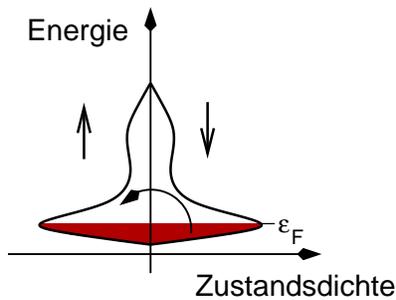
mit $t_{ij} = t < 0$ für nächste Nachbarn, $t_{ij} = 0$ sonst

$t_{ii} = 0$: Wahl des Energienullpunkts

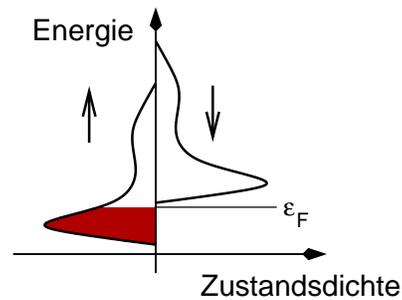
Stoner:

abstoßende Coulomb-Wechselwirkung bewirkt ferromagnetische Kopplung

paramagnetischer Zustand



ferromagnetischer Zustand



- Paramagnet:
 - minimale kinetische Energie
 - ungünstig für Wechselwirkungsenergie
- Ferromagnet:
 - minimale Wechselwirkungsenergie
 - ungünstig für kinetische Energie

Ferromagnetismus wird durch hohe Zustandsdichte an der Fermi-Energie begünstigt

- Minimierung der Wechselwirkungsenergie
- bei nur geringer Erhöhung der kinetischen Energie

→ **Stoner-Kriterium**

$$U\rho(\varepsilon_F) > 1$$

(grobe) Klassifizierung (einiger) magnetischer Materialien:

	Fe, Co, Ni	La _{1-x} Sr _x MnO ₃	EuO	MnO, V ₂ O ₃
magn. Momente	itinerant	itin.+lok.	lokalisiert	itinerant
Transport	Metall	schl. Metall	Isolator	(Mott-)Isolator
Ordnung	ferro	ferro	ferro	antiferro
Mechanismus	Stoner	Doppelaustausch	direkt	Superaustausch
Modell	Hubbard	FKGM	Heisenberg	Hubbard ($n = 1$)

alle Materialien paramagnetisch für hohe T

ferromagnetisch unterhalb T_C **Curie-Temperatur** oder

antiferromagnetisch unterhalb T_N **Neél-Temperatur**

Aufgabe der **Viel-Teilchen-Theorie**:

- Modellierung verschiedener Materialklassen
- Identifikation von Kopplungsmechanismen
- Lösen der Viel-Teilchen-Probleme
- Ableitung von Bedingungen für kollektive magnetische Ordnung
- Berechnung magnetischer Kenngrößen

Kapitel 4

Kollektive Ordnung

- magnetischer Kopplungsmechanismus notwendig aber nicht hinreichend für kollektive Ordnung
- exemplarische Untersuchung von kollektivem Magnetismus anhand des Ising-Modells
- realistischere Modelle: Heisenberg, Hubbard extrem schwierig, s.u.

setze: $\hbar = k = \mu_B = 1$

Heisenberg-Modell:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i,j}^{n.N.} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - B \sum_{i=1}^N S_i$$

mit lokalen Spins \mathbf{S}_i (z.B. Spinquantenzahl $S = 1/2$)

$$[S_{ix}, S_{jy}] = iS_{iz} \quad (\text{und zyklische Permutationen})$$

auf Gitter mit $i = 1, \dots, N$ Plätzen

Modell-Varianten:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i,j}^{n.N.} [\alpha(S_{ix}S_{jx} + S_{iy}S_{jy}) + \beta S_{iz}S_{jz}]$$

$\alpha = \beta$: Heisenberg-Modell

$\alpha = 0, \beta = 1$: Ising-Modell

$\alpha = 1, \beta = 0$: XY-Modell

4.1 Eindimensionales Ising-Modell

Ising-Modell:

$$H = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i-1} - B \sum_{i=1}^N S_i \quad (J, B > 0)$$

– hier: eindimensionales Modell

$D = 1$: lösbar (Ising, Lenz \sim 1920)

$D = 2$: lösbar für $B = 0$ (Onsager 1944)

$D = 3$: nicht analytisch lösbar, numerische Lösung problemlos

$D = \infty$: lösbar (Weiß'sche Molekularfeldtheorie, s.u.)

– allgemeines Demonstrationsmodell der statistischen Physik

hier: ferromagnetische Kopplung \rightarrow kollektive ferromagnetische Ordnung?

– S_i kurz für S_{iz} , lokale Spins an Plätzen eines Gitters: $i = 1, \dots, N$

– alle Observablen kommutieren \rightarrow "klassisches" (aber diskretes) Modell

– Darstellung eines Spins: $S_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ (ohne Faktor $\hbar/2!$)

– mögliche Werte (Eigenwerte): $s_i = \pm 1$

– periodische Randbedingung: $i = 0 \Leftrightarrow i = N$

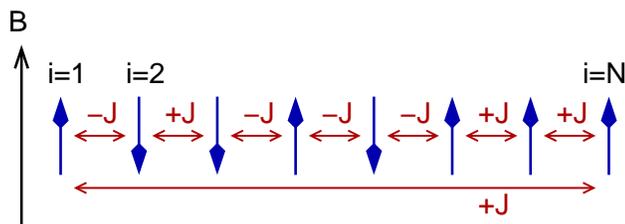
– Energie eines Spins im Feld B :

$-B$, falls $s_i = +1$ (Spin parallel zum Feld, $B > 0$)

B , falls $s_i = -1$ (Spin antiparallel zum Feld, $B > 0$)

– Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn

WW-Energie $-J$ falls $S_i S_{i-1} = +1$ (bevorzugt parallele Spins, $J > 0$)



– GZE: $E_0 = -N(J + B)$, GZ: $s_1 = \dots = s_N = +1$

– Gesamtmoment: $M = \sum_i \langle S_i \rangle$ (vergl.: $M = -\hbar^{-1} g \mu_B \sum_i \langle S_i \rangle$)

Ableitung der Gleichgewichtsthermodynamik in **kanonischer Gesamtheit**

Zustandssumme: $\beta = 1/T$

$$Z = Z(T, B, J, N) = \text{Sp } e^{-\beta H}$$

ONB des Hilbert-Raums:

$$\{|s_1\rangle \cdots |s_N\rangle\}$$

also:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \exp\left(\beta J \sum_i s_i s_{i-1} + \beta B \sum_i s_i\right) \\ &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \prod_i \exp(\beta J s_i s_{i-1} + \beta B s_i) \end{aligned}$$

(entspricht **klassischer** Zustandssumme)

Transfermatrixmethode

$$\prod_i \exp(\beta J s_i s_{i-1} + \beta B s_i) = \prod_i \exp\left(\beta J s_i s_{i-1} + \frac{1}{2} \beta B (s_i + s_{i-1})\right) = \prod_i Q_{s_i, s_{i-1}}$$

mit Transfermatrix

$$Q = \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta B} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta B} \end{pmatrix}$$

definiere Vektoren (Eigenvektoren von S_i zu $s_i = \pm$):

$$|+1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

dann ist:

$$\langle s_i | Q | s_{i-1} \rangle = Q_{s_i, s_{i-1}}$$

und:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N Q_{s_i, s_{i-1}} \\ &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \langle s_N | Q | s_{N-1} \rangle \cdots \langle s_2 | Q | s_1 \rangle \langle s_1 | Q | s_N \rangle \\ &= \sum_{s_N=\pm 1} \langle s_N | Q^N | s_N \rangle \end{aligned}$$

$$Z = \text{Sp } Q^N$$

Q reell und symmetrisch \rightarrow

$$Q = UqU^T$$

mit U reell und orthogonal, $UU^T = \mathbf{1}$, q diagonal

$$\begin{aligned} Z &= \text{Sp } Q^N = \text{Sp } (UqU^T \cdots UqU^T) = \text{Sp } q^N \\ &= \text{Sp } \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}^N = \text{Sp } \begin{pmatrix} \lambda_1^N & 0 \\ 0 & \lambda_2^N \end{pmatrix} = \lambda_1^N + \lambda_2^N \end{aligned}$$

λ_i : Eigenwerte von Q

für $N \rightarrow \infty$ ist also:

$$Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N = \lambda_{\max}^N \left(1 + \frac{\lambda_{\min}^N}{\lambda_{\max}^N} \right) \rightarrow \lambda_{\max}^N$$

$$Z = \lambda_{\max}^N$$

beachte λ_{\max} nicht entartet!

Theorem von Perron und Frobenius:

sei A eine reelle $M \times M$ -Matrix mit $A_{ij} > 0 \rightarrow$

- es gibt einen nichtentarteten reellen Eigenwert $\lambda > 0$

- mit $\lambda > |\lambda'|$ für alle Eigenwerte $\lambda' \neq \lambda$

- $\exists \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_M)$ Eigenvektor zu λ mit $x_i > 0$

statt Beweis: direkte Rechnung:

$$\begin{aligned} 0 &= \det \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta B} - \lambda & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta B} - \lambda \end{pmatrix} \\ &= \lambda^2 - \lambda (e^{\beta J + \beta B} + e^{\beta J - \beta B}) + e^{2\beta J} - e^{-2\beta J} \end{aligned}$$

also:

$$\begin{aligned} \lambda &= e^{\beta J} \frac{1}{2} (e^{\beta B} + e^{-\beta B}) \pm \sqrt{\frac{1}{4} e^{2\beta J} (e^{\beta B} + e^{-\beta B})^2 - e^{2\beta J} + e^{-2\beta J}} \\ &= e^{\beta J} \left(\cosh(\beta B) \pm \sqrt{\cosh^2(\beta B) - 1 + e^{-4\beta J}} \right) \end{aligned}$$

(konsistent mit P.-F.-Theorem)

somit:

$$Z(T, B, N) = e^{N\beta J} \left(\cosh(\beta B) + \sqrt{\cosh^2(\beta B) - 1 + e^{-4\beta J}} \right)^N$$

→ Ableitung der Thermodynamik, z.B.

magnetisches Gesamtmoment

$$\begin{aligned} M &= \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp} \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle e^{-\beta H} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial B} \ln Z \\ &= \frac{N}{\beta} \frac{1}{[\dots]} \frac{\partial}{\partial B} \left[e^{\beta J} \left(\cosh(\beta B) + \sqrt{\cosh^2(\beta B) - 1 + e^{-4\beta J}} \right) \right] \\ &= \frac{N}{\beta} \frac{e^{\beta J}}{[\dots]} \left(\beta \sinh(\beta B) + \frac{2 \cosh(\beta B) \sinh(\beta B) \beta}{2 \sqrt{\cosh^2(\beta B) - 1 + e^{-4\beta J}}} \right) \\ &= \frac{N}{\beta} \frac{1}{\cosh(\beta B) + \sqrt{\dots}} \frac{\beta}{\sqrt{\dots}} \left(\sinh(\beta B) \sqrt{\dots} + \cosh(\beta B) \sinh(\beta B) \right) \\ &= N \frac{\cosh(\beta B) - \sqrt{\dots}}{\cosh^2(\beta B) - \cosh^2(\beta B) + 1 - e^{-4\beta J}} \frac{\sinh(\beta B) \sqrt{\dots} + \cosh(\beta B) \sinh(\beta B)}{\sqrt{\dots}} \\ &= N \frac{\cosh^2(\beta B) \sinh(\beta B) - \sinh(\beta B) \sqrt{\dots}^2}{(1 - e^{-4\beta J}) \sqrt{\dots}} \\ &= N \frac{-\sinh(\beta B)(e^{-4\beta J} - 1)}{(1 - e^{-4\beta J}) \sqrt{\dots}} \end{aligned}$$

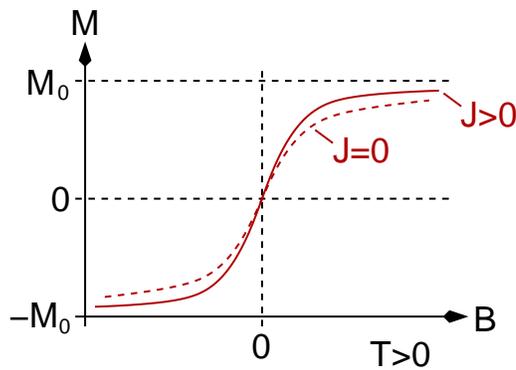
also:

$$M = N \frac{\sinh(\beta B)}{\sqrt{\cosh^2(\beta B) - 1 + e^{-4\beta J}}}$$

thermische Zustandsgleichung

Diskussion:

- $B = 0 \rightarrow M = 0$
- $B \rightarrow \infty \rightarrow M \rightarrow N \tanh(\beta B) \rightarrow N = M_0$
- $M(T, B, N) = -M(T, -B, N)$
- $T \rightarrow 0, \beta \rightarrow \infty \rightarrow M \rightarrow M_0$
- $T \rightarrow \infty, \beta \rightarrow 0 \rightarrow M \rightarrow 0$



für $T > 0$ ist

$$\lim_{B \rightarrow 0} M(T, B, N) = 0$$

→ keine spontane magnetische Ordnung, **Paramagnet**

beachte:

$$0 = \lim_{T \rightarrow 0} \lim_{B \rightarrow 0} M(T, B, N) \neq \lim_{B \rightarrow 0} \lim_{T \rightarrow 0} M(T, B, N) = \pm M_0$$

idealer Paramagnet: $J = 0$ (nicht-w.w. Momente)

$$M(T, B, N) = N \tanh(\beta B)$$

isotherme Suszeptibilität des idealen Paramagneten:

$$\chi = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial M}{\partial B} \right)_{T, N} = \frac{\cosh^2(\beta B) - \sinh^2(\beta B)}{\cosh^2(\beta B)} \beta$$

für $B \rightarrow 0$ **oder** $T \rightarrow \infty$ ist:

$$\chi = \beta = \frac{1}{T}$$

Curie-Gesetz

(mit Curie-Konstante 1)

warum keine magnetische Ordnung? → betrachte Korrelationen

mit

$$H = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i-1} - \sum_{i=1}^N B_i S_i \quad (J, B_i > 0)$$

ist

$$Z = Z(T, \{B_i\}, N) \quad F = F(T, \{B_i\}, N)$$

und:

$$\frac{\partial F}{\partial B_i} = -T \frac{\partial}{\partial B_i} \ln \sum_{s_1, \dots, s_N} e^{\beta J \sum s_{i-1} s_i + \beta \sum B_i s_i}$$

$$= -T \frac{1}{Z} \sum_{s_1, \dots, s_N} \beta s_i e^{-\beta H} = -\langle S_i \rangle$$

sowie:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F}{\partial B_i \partial B_j} &= -\frac{\partial \langle S_i \rangle}{\partial B_j} = -\frac{\partial}{\partial B_j} \frac{1}{Z} \sum_{s_1, \dots, s_N} s_i e^{-\beta H} \\ &= \frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial B_j} \sum_{s_1, \dots, s_N} s_i e^{-\beta H} - \frac{1}{Z} \sum_{s_1, \dots, s_N} s_i \beta s_j e^{-\beta H} \\ &= \langle S_i \rangle \left(-\beta \frac{\partial}{\partial B_j} F \right) - \beta \langle S_i S_j \rangle \end{aligned}$$

also:

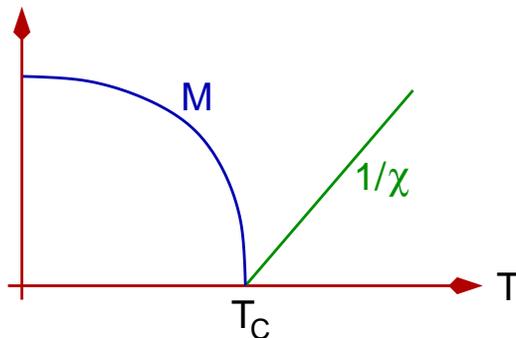
$$\boxed{-\frac{\partial^2 F}{\partial B_i \partial B_j} = \frac{\partial \langle S_i \rangle}{\partial B_j} = \frac{\partial \langle S_j \rangle}{\partial B_i} = \beta (\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle)}$$

$\frac{\partial \langle S_i \rangle}{\partial B_j}$: **lineare Antwort**

$\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle$: **Korrelationsfunktion**

(spontane) magnetische Ordnung:

Erwartung:



bei $T = T_C$, **Curie-Temperatur**:

endliche lineare Antwort bei infinitesimal schwachem Feld, also:

$$\chi(T, B = 0, N) = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial M}{\partial B} \right)_{T, N} \Big|_{B=0} \rightarrow \infty \quad (T \rightarrow T_C)$$

jetzt ist:

$$\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial B} M = \frac{1}{N} \sum_i \frac{\partial}{\partial B_i} \sum_j \langle S_j \rangle = \frac{1}{N} \sum_{ij} \frac{\partial \langle S_j \rangle}{\partial B_i} = \frac{1}{N} \beta \sum_{ij} (\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle)$$

Translationsinvarianz ausnutzen: $\langle S_i S_j \rangle = \langle S_{i-j} S_0 \rangle = \langle S_d S_0 \rangle$, Abstand $d = i - j$

$$\chi = \frac{1}{N} \beta N \sum_d (\langle S_d S_0 \rangle - \langle S_0 \rangle \langle S_0 \rangle) = \beta \sum_d (\langle S_d S_0 \rangle - \langle S_0 \rangle \langle S_0 \rangle)$$

definiere **Korrelationslänge** ξ :

$$\langle S_d S_0 \rangle - \langle S_0 \rangle \langle S_0 \rangle \propto e^{-d/\xi} \quad \text{für } d \rightarrow \infty$$

Erwartung: exponentieller Zerfall der Korrelationsfunktion für große Abstände (S_d und S_0 unabhängig bei n.N. bzw. kurzreichweitiger WW)

offensichtlich gilt, dass

$$\boxed{\chi \rightarrow \infty \Rightarrow \xi \rightarrow \infty}$$

Korrelationslänge divergiert bei T_C !

Berechnung von ξ

$Z(T, \{B_i\}, N)$ nicht bekannt

→ direkte Berechnung der Korrelationsfunktion für $B = 0$:

für $B = 0$ ist: $\langle S_i \rangle = \langle S_j \rangle = 0$, bleibt also:

$$\begin{aligned} \langle S_i S_j \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{s_1, \dots, s_N} s_i s_j e^{\beta J \sum_i s_i s_{i-1}} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{s_1} \cdots \sum_{s_N} s_i s_j \prod_{i=1}^N \langle s_i | Q | s_{i-1} \rangle \quad Q = \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{s_i} \sum_{s_j} \sum_{s_N} \langle s_N | Q^{N-i} | s_i \rangle s_i \langle s_i | Q^{i-j} | s_j \rangle s_j \langle s_j | Q^j | s_N \rangle \end{aligned}$$

falls $i > j$; mit

$$\sigma \equiv \sum_{s_i} |s_i\rangle s_i \langle s_i| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(z-Pauli-Matrix) ist jetzt

$$\begin{aligned} \langle S_i S_j \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{s_N} \langle s_N | Q^{N-i} \sigma Q^{i-j} \sigma Q^j | s_N \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \text{Sp} (Q^{N-i} \sigma Q^{i-j} \sigma Q^j) \\ &= \frac{1}{Z} \text{Sp} (\sigma Q^{i-j} \sigma Q^{N-i+j}) \end{aligned}$$

Diagonalisierung der Transfermatrix:

$$Q = UqU^T \quad UU^T = 1$$

mit

$$q = \begin{pmatrix} 2 \cosh(\beta J) & 0 \\ 0 & 2 \sinh(\beta J) \end{pmatrix} \quad U = U^T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

es folgt:

$$\langle S_i S_j \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp} \left(\sigma U q^{i-j} U^T \sigma U q^{N-i+j} U^T \right)$$

und mit

$$\sigma' = U^T \sigma U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ist:

$$\begin{aligned} \langle S_i S_j \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Sp} \left(\sigma' q^{i-j} \sigma' q^{N-i+j} \right) \\ &= \frac{1}{(2^N \cosh(\beta J))^N} \text{Sp} \left(\begin{pmatrix} 2 \sinh(\beta J) & 0 \\ 0 & 2 \cosh(\beta J) \end{pmatrix}^{i-j} \begin{pmatrix} 2 \cosh(\beta J) & 0 \\ 0 & 2 \sinh(\beta J) \end{pmatrix}^{N-(i-j)} \right) \\ &= \frac{1}{(\cosh(\beta J))^N} \left(\sinh^{i-j}(\beta J) \cosh^{N-(i-j)}(\beta J) + \cosh^{i-j}(\beta J) \sinh^{N-(i-j)}(\beta J) \right) \\ &= \tanh^{i-j}(\beta J) + \tanh^{N-(i-j)}(\beta J) \end{aligned}$$

da $\tanh x < 1$ für $x \neq 0$, ist im Limes $N \rightarrow \infty$:

$$\boxed{\langle S_i S_j \rangle = \tanh^{(i-j)}(\beta J)}$$

Korrelationsfunktion nur vom Abstand abhängig

$$\langle S_i S_j \rangle = \langle S_d S_0 \rangle = \tanh^d(\beta J)$$

Bestimmung der Korrelationslänge ($x = \tanh(\beta J)$):

$$\langle S_i S_j \rangle = x^d = e^{\ln(x^d)} = e^{-\ln(1/x^d)} = e^{-d \ln(1/x)}$$

mit

$$\boxed{\xi^{-1} \equiv \ln(1/x) = \ln \coth(\beta J)}$$

ist dann

$$\langle S_i S_j \rangle = e^{-d/\xi}$$

Divergenz von ξ nur für $T \rightarrow 0$, $\beta \rightarrow \infty$

es ist:

$$\begin{aligned}
\chi &= \frac{1}{N} \beta \sum_{ij} (\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle) \\
&= \frac{1}{N} \beta \sum_i \langle S_i^2 \rangle + 2 \frac{1}{N} \beta \sum_{i>j} \langle S_i S_j \rangle \\
&= \beta + 2 \frac{1}{N} \beta \sum_i \sum_{d=1}^{\infty} \tanh^d(\beta J) \\
&= \beta \left(1 + 2 \sum_{d=1}^{\infty} \tanh^d(\beta J) \right) \\
&= \beta \left(1 - 2 + 2 \frac{1}{1 - \tanh(\beta J)} \right) \\
&\boxed{\chi = \beta \left(\frac{2}{1 - \tanh(\beta J)} - 1 \right)}
\end{aligned}$$

- $J = 0$ (idealer Paramagnet, s.o.): $\chi = 1/T$
divergent bei $T = 0$ wegen GZ-Entartung $g = 2^N$
- $T \rightarrow \infty, \beta \rightarrow 0$: $\chi = \beta \left(\frac{2}{1 - \beta J + \mathcal{O}(\beta^3)} - 1 \right) = \beta + 2J\beta^2 + \mathcal{O}(\beta^3 J^2)$
Curie-Gesetz: $\chi \propto 1/T$ für hohe T
- $T \rightarrow 0, \beta \rightarrow \infty$: $\tanh(\beta J) \rightarrow 1, \chi \rightarrow \infty$ exponentiell
- Phasenübergang nur bei $T_C = 0$

Frage: Phasenübergänge bei endlichen T ?

4.2 Unendlichdimensionales Ising-Modell

D -dimensionales hyperkubisches Gitter: jeder Platz hat $q = 2D$ n.N.

D -dimensionales Ising-Modell:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{ij}^{n.N.} S_i S_j - B \sum_i S_i$$

beachte:

$$\frac{1}{N} \left\langle -\frac{J}{2} \sum_{ij}^{n.N.} S_i S_j \right\rangle = -\frac{J}{2} \frac{1}{N} \sum_{ij}^{n.N.} \langle S_i S_j \rangle = Jq \times \mathcal{O}(1) \rightarrow \infty$$

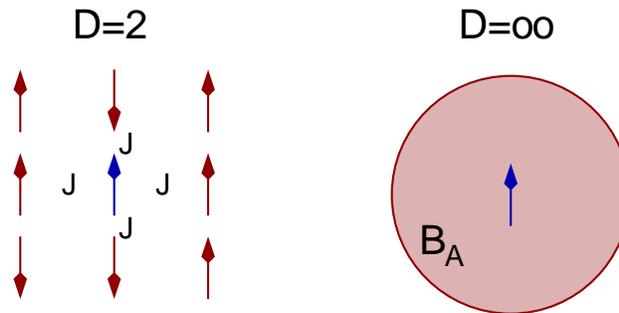
für $D, q \rightarrow \infty$, während

$$\frac{1}{N} \left\langle -B \sum_i S_i \right\rangle = -B \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle = B \times \mathcal{O}(1)$$

daher **Skalierung**:

$J = \frac{J^*}{q} \quad J^* = \text{const.}$	für $D, q \rightarrow \infty$
---	-------------------------------

Idee der Molekularfeld-Theorie:



- D endlich: Spin am Gitterplatz i "sieht" lokales Feld

$$J \sum_j^{n.N.} S_j$$

→ Ising-Hamiltonian $\sum_i S_i \times J \sum_j^{n.N.} S_j$

- Feld fluktuiert von Spin-Konfiguration zu Spin-Konfiguration
- Limes $q \rightarrow \infty$:
Unterdrückung der Fluktuationen

- Spin am Gitterplatz i "sieht" globales Feld

$$B_A$$

→ vereinfachter Hamiltonian $\sum_i S_i \times B_A$

Molekularfeld-Näherung

es gilt ($i \neq j$):

$$S_i S_j = S_i \langle S_j \rangle + S_j \langle S_i \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + F$$

mit Fluktuationsterm

$$F = (S_i - \langle S_i \rangle)(S_j - \langle S_j \rangle)$$

Molekularfeld-Näherung

exakt für $D \rightarrow \infty$

damit $H \rightarrow H_{\text{MF}}$:

$$\begin{aligned} H_{\text{MF}} &= -\frac{J}{2} \sum_{ij}^{n.N.} 2\langle S_j \rangle S_i + \frac{J}{2} \sum_{ij}^{n.N.} \langle S_j \rangle \langle S_i \rangle - B \sum_i S_i \\ &= -\sum_i \left(J \sum_j^{n.N.(i)} \langle S_j \rangle + B \right) S_i + \frac{J}{2} \sum_{ij}^{n.N.} \langle S_j \rangle \langle S_i \rangle \\ &= -\sum_i \left(B_i^{(A)} + B \right) S_i + \frac{J}{2} \sum_{ij}^{n.N.} \langle S_j \rangle \langle S_i \rangle \end{aligned}$$

mit **Austauschfeld**

$$B_i^{(A)} \equiv J \sum_j^{n.N.(i)} \langle S_j \rangle$$

Translationsinvarianz:

$$\langle S_i \rangle = m_i = m \quad \forall i$$

mit der Koordinationszahl q ist:

$$H_{\text{MF}} = - (B_A + B) \sum_i S_i + \frac{J}{2} N q m^2$$

und

$$B_A = q J m$$

Diskussion:

- MFT: Gitter-Modell \rightarrow atomares Modell
- mikroskopische Begründung der Weißschen Theorie
- Selbstkonsistenz: $m \rightarrow B_A \rightarrow H_{\text{MF}} \rightarrow F_{\text{MF}} \rightarrow m$

Auswertung der MFT:

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial F_{\text{MF}}}{\partial B}$$

(denn Kopplungsterm: $-B \sum_i S_i$)

Berechnung von Z_{MF} :

$$\begin{aligned} Z_{\text{MF}} &= \text{Sp } e^{-\beta H_{\text{MF}}} \\ &= \sum_{S_1, S_2, \dots} \langle S_1, S_2, \dots | e^{\beta \sum_i (B_A + B) S_i} | S_1, S_2, \dots \rangle e^{-\beta N q J m^2 / 2} \\ &= e^{-\beta N q J m^2 / 2} \sum_{S_1, S_2, \dots} \prod_i e^{\beta (B_A + B) S_i} \\ &= e^{-\beta N q J m^2 / 2} \prod_i \sum_{S_i = \pm 1} e^{\beta (B_A + B) S_i} \\ &= e^{-\beta N q J m^2 / 2} (e^{\beta (B_A + B)} + e^{-\beta (B_A + B)})^N \end{aligned}$$

es folgt:

$$\begin{aligned} F_{\text{MF}} &= -T \ln Z_{\text{MF}} \\ &= -NT \ln (e^{\beta (B_A + B)} + e^{-\beta (B_A + B)}) + N q J m^2 / 2 \end{aligned}$$

also:

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial F_{\text{MF}}}{\partial B} = T \beta \frac{e^{\beta (B_A + B)} - e^{-\beta (B_A + B)}}{e^{\beta (B_A + B)} + e^{-\beta (B_A + B)}}$$

Mean-Field-Gleichung:

$$m = \tanh (\beta (q J m + B))$$

Selbstkonsistenz-Gleichung für m

$T \rightarrow 0, \beta \rightarrow \infty : m \rightarrow \pm 1$ Sättigungsmoment

$T \rightarrow \infty, \beta \rightarrow 0 : m \rightarrow 0$ paramagnetische Lösung

$B = 0$:

$m = 0$ ist Lösung, paramagnetische Phase

$m \neq 0$: Ferromagnetismus ?

$$m \rightarrow 0, \tanh x = x - \frac{1}{3} x^3 + \mathcal{O}(x^5)$$

$$m = \beta_C q J m$$

$$\boxed{T_C = qJ} \quad (\text{Curie-Temperatur})$$

→ typisches MF-Resultat: $T_C \propto J, q$

$$m = \beta q J m - \frac{1}{3}(\beta q J m)^3$$

$$m^2 = 3 \frac{T^2}{T_C^2} \frac{T_C - T}{T_C}$$

$$T \rightarrow T_C : \quad m \propto \sqrt{\frac{T_C - T}{T_C}}$$

kritischer Exponent: $\beta = 1/2$

→ charakteristisch für MF!

($m = t^\beta$, $t = (T_C - T)/T_C$, $\beta \approx 0.325$ 3D-Ising)

$B > 0$:

$T > T_C$, $B \rightarrow 0 \rightarrow m \rightarrow 0 \rightarrow x$ klein in $\tanh x$:

$$m = \beta q J m + \beta B$$

$$m = \beta B \frac{1}{1 - \beta q J} = B \frac{1}{T - T_C}$$

$$\frac{\partial m}{\partial B} = \frac{1}{T - T_C}$$

Curie-Weiß-Verhalten der Suszeptibilität

→ kritischer Exponent $\gamma = 1$ ($\chi = (-t)^{-\gamma}$, $\gamma = 1.2402$ 3D Ising)

4.3 Langreichweitige Wechselwirkung

betrachte Ising-Modell

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N J_{ij} S_i S_j - B \sum_i S_i$$

mit symmetrischer, positiv semidefiniter $N \times N$ Matrix J

Diagonalisierung:

$$j = U^T J U, \quad U^T U = \mathbf{1}$$

j Diagonalmatrix mit Elementen $J_q \geq 0$, $q = 1, \dots, N$

beachte:

$J_q \geq 0 \quad \forall q$ kann mit $J_{ii} = J_0 > 0$ in H sichergestellt werden
(liefert nur additive thermodynamisch irrelevante Konstante in H)

definiere:

$$S_q = \sum_i U_{qi} S_i$$

damit ist:

$$\sum_i S_i = \sum_i \sum_q U_{iq}^T S_q = \sum_q \sigma_q S_q \quad \text{wobei } \sigma_q = \sum_i U_{qi}$$

und

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{q=1}^N J_q S_q^2 - B \sum_q \sigma_q S_q$$

Zustandssumme:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp \left(\frac{1}{2} \beta \sum_q J_q S_q^2 + \beta B \sum_q \sigma_q S_q \right)$$

es ist:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \prod_q^{J_q > 0} \exp \left(\frac{1}{2} \beta J_q S_q^2 + \beta B \sigma_q S_q \right) \prod_q^{J_q = 0} \exp (\beta B \sigma_q S_q)$$

Gauß-Integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} = \sqrt{\pi}$$

und für beliebiges y :

$$\int dx e^{-(x-y)^2} = \sqrt{\pi}$$

also:

$$e^{y^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int dx e^{-x^2 + 2xy}$$

Hubbard-Stratonovich-Transformation:

$$e^{ay^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int dx e^{-x^2 + 2\sqrt{a}xy}$$

beachte:

statt quadratischer (links) nur lineare y -Abhängigkeit (rechts) im Exponenten

Idee: $S_q^2 \rightarrow S_q$, Ausführen der S_i -Summen möglich

zu zahlender "Preis": $\int dx$

Anwendung:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \prod_q^{J_q > 0} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int dx_q \exp\left(-x_q^2 + 2\sqrt{\beta J_q/2} x_q S_q + \beta B \sigma_q S_q\right) \prod_q^{J_q = 0} \exp(\beta B \sigma_q S_q)$$

- Spin-Summen können jetzt ausgeführt werden
- aber evtl. hochdimensionales Integral
- Modell "separabel" bei endlich vielen Eigenwerten mit $J_q > 0$

Beispiel: Ising-Modell mit $J_{ij} = J/N$ für alle i, j

Langreichweitige Wechselwirkung, dimensionsloses Modell

Eigenwerte der J -Matrix:

$$J_q = J \text{ für } q = 1$$

$$J_q = 0 \text{ für } q = 2, \dots, N$$

Eigenvektor zu $J_q = J$ (Komponenten $i = 1, \dots, N$):

$$U_{1i} = 1/\sqrt{N} \quad (\rightarrow \sigma_{q=1} = \sqrt{N})$$

es ist:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{S_i\}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int dx \exp\left(-x^2 + \sqrt{2\beta J} x S_{q=1} + \beta B \sqrt{N} S_{q=1}\right) \prod_{q \geq 2} \exp(\beta B \sigma_q S_q) \\ &= \sum_{\{S_i\}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int dx \exp\left(-x^2 + \sqrt{2\beta J} x S_{q=1}\right) \exp\left(\beta B \sum_{q=1}^N \sigma_q S_q\right) \\ &= \sum_{\{S_i\}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int dx \exp\left(-x^2 + \sqrt{2\beta J} x \sum_i \frac{1}{\sqrt{N}} S_i + \beta B \sum_i S_i\right) \end{aligned}$$

Skalierung $x \rightarrow \sqrt{\beta N} x$:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{S_i\}} \sqrt{\frac{\beta N}{\pi}} \int dx \exp\left(-N\beta x^2 + (\beta\sqrt{2J} x + \beta B) \sum_i S_i\right) \\ &= \sqrt{\frac{\beta N}{\pi}} \int dx \exp(-N\beta x^2) \sum_{\{S_i\}} \prod_i \exp\left((\beta\sqrt{2J} x + \beta B) S_i\right) \end{aligned}$$

Ausführen der Spin-Summen:

$$Z = \sqrt{\frac{\beta N}{\pi}} \int dx \exp(-N\beta x^2) \prod_i 2 \cosh(\beta\sqrt{2J} x + \beta B)$$

$$= \sqrt{\frac{\beta N}{\pi}} \int dx \exp \left[-N \left(\beta x^2 - \ln 2 \cosh(\beta \sqrt{2J} x + \beta B) \right) \right]$$

Auswertung des Integrals für $N \rightarrow \infty$ mit Sattelpunktmethode:

$$\int dx \exp(Ng(x)) \approx \exp(Ng(x_0)) \quad \text{mit} \quad g'(x_0) = 0$$

also:

$$0 = \frac{d}{dx} \left(\beta x^2 - \ln 2 \cosh(\beta \sqrt{2J} x + \beta B) \right)_{x=x_0}$$

$$2\beta x_0 = \tanh(\beta \sqrt{2J} x_0 + \beta B) \beta \sqrt{2J}$$

$$2 \frac{x_0}{\sqrt{2J}} = \tanh(\beta \sqrt{2J} x_0 + \beta B)$$

mit $x_0 \equiv \sqrt{J/2} m$ ist

$$m = \tanh(\beta J m + \beta B)$$

Diskussion:

- Selbstkonsistenzgleichung der Molekularfeldtheorie
- Sattelpunktmethode exakt falls $g(x)$ für $N \rightarrow \infty$ unabhängig von N
- Phasenübergang bei $T_C = J$
- Ferromagnetismus in jeder Dimension, falls Wechselwirkung hinreichend langreichweitig

4.4 Hubbard-Modell: exakte Aussagen

Exakte Aussagen für den Grundzustand ($T = 0$) des Hubbard-Modells mit N_e Elektronen und N Plätzen ($N_e, N < \infty$)

$$H = \sum_{ij,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma}$$

Definition Ein Gitter heißt **bipartit**, falls es in zwei Untergitter A, B zerlegt werden kann, so dass jeder nächste Nachbar eines Platzes aus A in B liegt und umgekehrt.

Nagaoka-Ferromagnetismus

Die Grundzustände des $U = \infty$ -Hubbard-Modells auf einem bipartiten Gitter mit $N_e = N - 1$ Elektronen sind vollständig spinpolarisiert, d.h. sie haben Spinquantenzahl $S = (N - 1)/2$.

Einer der Grundzustände ist $|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^N (-1)^i \prod_{j \neq i} c_{j\uparrow}^\dagger |0\rangle$

Bei Nächst-Nachbar-Hüpfen ist die Grundzustandsenergie $E_0 = -zt$ (z : Anzahl nächster Nachbarn, t : Nächst-Nachbar-Hopping).

Beweis: Y. Nagaoka, Phys. Rev. **147**, 392 (1966)

Diskussion:

- Theorem gültig auch für $N_e = N + 1$: Teilchen-Loch-Transformation
- Beweis kann nicht direkt auf endliches $U < \infty$ oder auf endliche Dichten $\lim_{N \rightarrow \infty} N_e/N < 1$ erweitert werden
 beachte: für $N_e = N$ ist der Grundzustand des $U = \infty$ -Hubbard-Modells 2^N -fach entartet; Entartung wird für endliche Dichten oder endliches U aufgehoben
 → Relevanz es Theorems für realistische Situationen?
- Beweisidee:
 - $U = \infty$ → keine Doppelbesetzungen, $E = E_{\text{kin}}$
 - E_{kin} = Summe über geschlossene Pfade des Lochs auf dem Gitter
 - im allg. hinterlässt das Loch auf einem Pfad eine Störung der Spin-Konfiguration → kein (negativer) Beitrag zu E_{kin} für viele Pfade
 - für ferromagnetischen Zustand bleibt die Konfiguration für alle geschlossenen Pfade ungestört → maximaler (negativer) Beitrag zu E_{kin} → E minimal für ferromagnetischen Zustand

Lieb'sches Theorem

Betrachte das Hubbard-Modell für $U > 0$ auf einem bipartiten Gitter, bestehend aus zwei Untergittern A und B mit N_A bzw. N_B Plätzen und sei $N_e = N_A + N_B = N$ (Halbfüllung). Dann gilt: Ein Grundzustand $|\Psi\rangle$ hat Spinquantenzahl $S = |N_A - N_B|/2$. $|\Psi\rangle$ ist eindeutig bis auf die triviale $2S + 1$ -fache Rotationsentartung.

Beweis: E. Lieb, Phys. Rev. Lett. **62**, 1201 (1989); Erratum, ibid. **62**, 1927 (1989)

Diskussion:

- Theorem gilt für Halb­füllung
- $N_A = N_B \rightarrow S = 0$, nichtentartetes Singulett, kein Ferromagnetismus
- Antiferromagnetismus nicht ausgeschlossen

Lieb'sches Theorem für $U < 0$

Betrachte das $U < 0$ -Hubbard-Modell auf einem bipartiten Gitter mit N_e gerade. Dann ist der Grundzustand ein Singulett ($S = 0$) und nicht entartet.

Beweis: E. Lieb, Phys. Rev. Lett. **62**, 1201 (1989)

Diskussion:

- Beweis durch Zurückführen auf das $U > 0$ -Hubbard-Modell durch Teilchen-Loch-Transformation.
- $S = 0$ physikalisch klar für $|U/t| \gg 1$, Grundzustand: System lokal gepaarter Elektronen.
- nichttrivial ist: Eindeutigkeit des Grundzustands und $|U/t|$ beliebig

Lieb-Mattis-Theorem

Gegeben ist das Hubbard-Modell mit Hopping (nur) zwischen nächsten Nachbarn auf einer eindimensionalen Kette (offene Randbedingungen). Dann hat der Grundzustand Spinquantenzahl $S = 0$ oder $S = 1/2$.

Beweis: E. H. Lieb und D. Mattis, Phys. Rev. **125**, 164 (1962)

Diskussion:

- U beliebig, N_e beliebig
- keine (makroskopische) Magnetisierung, kein Ferromagnetismus
- Antiferromagnetismus ist möglich (es kann nicht auf Paramagnetismus geschlossen werden)

Kanamoris Ansatz

keine ferromagnetische Ordnung im Limes geringer Elektronendichten N_e/N

Beweis: t -Matrix-Theorie

Diskussion:

- anschaulich: geringe Dichte, U ist praktisch nicht effektiv
-

Mermin-Wagner-Theorem

s.u.

weitere Aussagen:

Mielke, Tasaki:

- FM Grundzustand für $D = 2$, Kagomé-Gitter
dispersionslose Bereiche des Bloch-Bands ("flat-band ferromagnetism")

Müller-Hartmann:

- FM Grundzustand für $D = 1$, $n \rightarrow 0$, Hopping zwischen übernächsten
Nachbarn
Bloch-Band mit entarteten Minima

Tasaki:

- ähnlich, aber mit isolierendem FM Grundzustand bei Viertelfüllung

Kapitel 5

Spontane Symmetriebrechung

5.1 Heisenberg-Modell, SU(2)-Invarianz

Hamilton-Operator:

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j$$

- Feld $\mathbf{B} = 0$, keine induzierte Ordnung
- $J_{ii} = 0$, $J_{ij} = J_{ji} = J_{ij}^*$
oft nur n.N.-Kopplung:

$$J_{ij} = J/2, \text{ falls } i, j \text{ n.N.}$$

$$J_{ij} = 0, \text{ sonst}$$

- $[S_{ix}, S_{jy}]_- = i\delta_{ij} S_{iz}$ (und zyklisch)

- $\mathbf{S}_i^\dagger = \mathbf{S}_i$, $\mathbf{S}_i^2 = S(S+1)$

- Leiteroperatoren $S_{i\pm} = S_{ix} \pm iS_{iy}$

$$\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j = S_{iz} S_{jz} + \frac{1}{2}(S_{i+} S_{j-} + S_{i-} S_{j+})$$

$$[S_{i+}, S_{j-}]_- = 2\delta_{ij} S_{iz}$$

$$[S_{iz}, S_{j\pm}]_- = \pm\delta_{ij} S_{i\pm}$$

$$S_{i\pm} S_{i\mp} = S(S+1) \pm S_{iz} - S_{iz}^2$$

- Hilbert-Raum:

\mathcal{H}_i : Hilbert-Raum des i -ten Spins

$$\mathcal{H} = \otimes_{i=1}^N \mathcal{H}_i \quad (\text{keine (Anti-)Symmetrisierung!})$$

$$\text{ONB: } \{|M_1 M_2 \cdots M_N\rangle\}$$

$$\text{mit } |M_1 M_2 \cdots M_N\rangle = |M_1\rangle |M_2\rangle \cdots |M_N\rangle, \quad M_i = -S, \dots, (S-1), S$$

$$\dim \mathcal{H} = (2S+1)^N$$

Wirkung der Spins auf Basiszustände:

$$S_{iz} |\cdots M_i \cdots\rangle = M_i |\cdots M_i \cdots\rangle$$

$$S_{i\pm} |\cdots M_i \cdots\rangle = \sqrt{S(S+1) - M_i(M_i \pm 1)} |\cdots M_i \pm 1 \cdots\rangle$$

- totaler Spin: $\mathbf{S}_t = \sum_i \mathbf{S}_i$
- $[\mathbf{S}_t, H]_- = 0$
 - \mathbf{S}_t ist Erhaltungsgröße
 - H ist invariant unter unitären Transformationen $U = e^{ia\mathbf{S}_t}$
 - H ist SU(2)-invariant

5.2 Brechung der SU(2)-Symmetrie

betrachte maximal polarisierten, ferromagnetischen Zustand

$$|F\rangle = |M_1 = S, \dots, M_N = S\rangle = |S, \dots, S\rangle$$

$$H|F\rangle = -J \sum_{ij}^{n.N.} \left(S_{iz} S_{jz} + \frac{1}{2} (S_{i+} S_{j-} + S_{i-} S_{j+}) \right) |F\rangle = -JNqS^2 |F\rangle$$

q : Koordinationszahl

$J > 0$ → $|F\rangle$ ist GZ von H

$$\langle \mathbf{S}_t \rangle_F = \langle F | \mathbf{S}_t | F \rangle = S_t \mathbf{e}_z$$

“Problem”: $|F'\rangle = |-S, \dots, -S\rangle$

$$H|F'\rangle = -JNqS^2 |F'\rangle, \quad \langle \mathbf{S}_t \rangle_{F'} = \langle F' | \mathbf{S}_t | F' \rangle = -S_t \mathbf{e}_z$$

also: $|F\rangle$ und $|F'\rangle$ sind Grundzustände von H → $\langle \mathbf{S}_t \rangle = \text{Sp}(\rho \mathbf{S}_t) = 0$?

$\langle \mathbf{S}_t \rangle = 0$: Symmetrie des gemischten Zustands = Symmetrie von H

$\langle \mathbf{S}_t \rangle \neq 0$: Symmetrie des gemischten Zustands < Symmetrie von H

spontane Symmetriebrechung

Berechnung von $\langle \mathbf{S}_t \rangle$:

$[\mathbf{S}_t, H]_- = 0 \rightarrow$ gemeinsame Eigenzustände von $H, \mathbf{S}_t^2, S_{tz}: |ES_t M_t\rangle$

Energie-Eigenwerte:

$$\begin{aligned}
 E &= E(S_t, M_t) = \langle ES_t M_t | H | ES_t M_t \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{S_t(S_t+1) - (M_t-1)M_t}} \langle ES_t M_t - 1 | S_{t-} H S_{t+} | ES_t M_t - 1 \rangle \\
 &= \frac{1}{S_t(S_t+1) + M_t - M_t^2} \langle ES_t M_t - 1 | (S_t(S_t+1) - S_{tz} - S_{tz}^2) H | ES_t M_t - 1 \rangle \\
 &= \langle ES_t M_t - 1 | H | ES_t M_t - 1 \rangle \\
 &= E(S_t, M_t - 1)
 \end{aligned}$$

M_t -unabhängig!

$$\begin{aligned}
 \rightarrow \langle \mathbf{S}_t \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Sp} (\mathbf{S}_t e^{-\beta H}) \\
 &= \frac{1}{\sum_{n, M_t} e^{-\beta E_n}} \sum_{n, M_t} \langle n M_t | \mathbf{S}_t | n M_t \rangle e^{-\beta E_n} \\
 &= \frac{1}{\sum_{n, M_t} e^{-\beta E_n}} \sum_{n, M_t} M_t \mathbf{e}_z e^{-\beta E_n} \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

kein Ferromagnetismus???

\rightarrow symmetriebrechendes Feld \mathbf{B} (in z -Richtung)

$$H \rightarrow H - g\mu_B \mathbf{B} \sum_i \mathbf{S}_i = H - g\mu_B B \sum_i S_{iz} = H - g\mu_B B S_{tz}$$

Frage:

$$\lim_{B \rightarrow 0} \langle \mathbf{S}_t \rangle \neq 0 \quad ?$$

$$\begin{aligned}
 \lim_{B \rightarrow 0} \langle \mathbf{S}_t \rangle &= \lim_{B \rightarrow 0} \frac{1}{Z} \text{Sp} (\mathbf{S}_t e^{-\beta(H - g\mu_B B S_{tz})}) \\
 &= \lim_{B \rightarrow 0} \frac{1}{Z} \sum_{n, M_t} M_t \mathbf{e}_z e^{-\beta(E_n - g\mu_B B M_t)} \\
 &= \frac{1}{\lim_{B \rightarrow 0} Z} \sum_{n, M_t} M_t \mathbf{e}_z \lim_{B \rightarrow 0} e^{-\beta(E_n - g\mu_B B M_t)} \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

Ausweg: $\langle \mathbf{S}_t \rangle \neq 0$ nur für $N \rightarrow \infty$ und/oder $\beta \rightarrow \infty$!

In einem endlichen System gibt es keinen Phasenübergang bei $T > 0$!

$$\lim_{B \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \mathbf{S}_t \rangle_{B,N,T>0} \neq \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{B \rightarrow 0} \langle \mathbf{S}_t \rangle_{B,N,T>0} = 0 \quad (\text{evtl.})$$

$$\lim_{B \rightarrow 0} \lim_{T \rightarrow 0} \langle \mathbf{S}_t \rangle_{B,L,T} \neq \lim_{T \rightarrow 0} \lim_{B \rightarrow 0} \langle \mathbf{S}_t \rangle_{B,N,T} = 0 \quad (\text{evtl.})$$

beachte: $\beta \rightarrow \infty$ bedeutet imaginäre Zeit $\tau \in [0, \infty]$

hier:

$$\begin{aligned} \lim_{B \rightarrow 0} \lim_{T \rightarrow 0} \langle \mathbf{S}_t \rangle &= \lim_{B \rightarrow 0} \lim_{T \rightarrow 0} \frac{1}{Z} \sum_{n, M_t} M_t \mathbf{e}_z e^{-\beta(E_n - g\mu_B B M_t)} \\ &= \lim_{B \rightarrow 0} \lim_{T \rightarrow 0} \frac{\sum_{n, M_t} M_t \mathbf{e}_z e^{-\beta(E_n - g\mu_B B M_t)}}{\sum_{n, M_t} e^{-\beta(E_n - g\mu_B B M_t)}} \\ &= \lim_{B \rightarrow 0} \lim_{T \rightarrow 0} \frac{S_t \mathbf{e}_z e^{-\beta(E_0 - g\mu_B B S)}}{e^{-\beta(E_0 - g\mu_B B S)}} = S_t \mathbf{e}_z \end{aligned}$$

$\lim_{B \rightarrow 0} \lim_{T \rightarrow 0} \langle \mathbf{S}_t \rangle$ bzw. $\lim_{B \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \mathbf{S}_t \rangle$ heißt **anomaler Erwartungswert**

Überlegungen auch gültig bei Ordnungsparametern, die nicht mit H vertauschen, z.B.:

$$\left[\sum_i (-1)^i \mathbf{S}_i, H \right]_- \neq 0$$

bei AF Ordnung $\langle \mathbf{S}_i \rangle = \mathbf{m}_i = (-1)^i m \mathbf{e}_z$:

$$\langle \sum_i (-1)^i \mathbf{S}_i \rangle = \sum_i (-1)^i \mathbf{m}_i = N m \mathbf{e}_z$$

→ Neel-Zustand $|\uparrow, \downarrow, \uparrow, \dots\rangle$ kein Eigenzustand von H

5.3 Magnonen

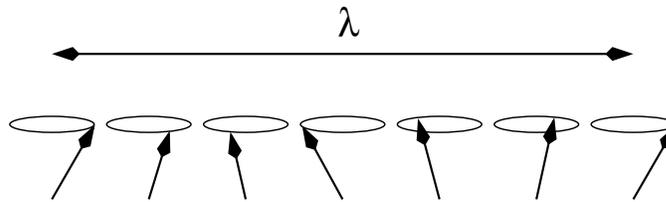
Goldstone-Theorem: H sei invariant unter einer **kontinuierlichen** Gruppe von Symmetrie-Transformationen. Dann gilt:

Entweder ist der GZ von H ebenfalls invariant
oder es gibt bosonische Anregungen mit beliebig kleiner Energie (Goldstone-Moden).

hier: Goldstone-Bosonen eines Ferromagneten = Magnonen / Spinwellen

Anschaulich: nur geringe Energie nötig um Spins aus der z-Richtung herauszudrehen, wenn gleichzeitig viele Spins nur etwas gekippt werden.
 → 2 transversale Moden.

Spinwelle mit Wellenlänge λ



Energie für $\lambda \rightarrow \infty$ minimal

weiteres Beispiel:

Flüssigkeit (kontinuierliche Translationsinvarianz) → kristalliner Festkörper
 Goldstone-Moden: akustische Phononen, langwellige Gitterschwingungen

Fourier-Transformation:

$$S_z(\mathbf{k}) = \sum_i e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} S_{iz} \quad S_{\pm}(\mathbf{k}) = \sum_i e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} S_{i\pm}$$

$$J(\mathbf{k}) = \frac{1}{L} \sum_{ij} J_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} = J(-\mathbf{k})$$

kubisches Gitter, $J_{ij} = J > 0$ für i, j n.N. →

$$J(\mathbf{k}) = 2J(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)) = \max \quad \text{für } \mathbf{k} = 0$$

Kommutatoren:

$$[S_z(\mathbf{k}), S_{\pm}(\mathbf{k}')]_- = \pm S_{\pm}(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \quad [S_+(\mathbf{k}), S_-(\mathbf{k}')]_- = 2S_z(\mathbf{k} + \mathbf{k}')$$

Hamiltonian:

$$H = -\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} J(\mathbf{k}) (S_+(\mathbf{k}) S_-(-\mathbf{k}) + S_z(\mathbf{k}) S_z(-\mathbf{k})) - B S_z(0)$$

definiere Ein-Magnon-Zustand:

$$|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2SL}} S_-(\mathbf{k}) |F\rangle \quad |F\rangle = |S, S, \dots\rangle$$

Orthonormierung:

$$2LS \langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \langle F | S_+(-\mathbf{k}) S_-(\mathbf{k}') | F \rangle = \langle F | 2S_z(-\mathbf{k} + \mathbf{k}') | F \rangle = 2LS \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$

Eigenzustand:

$$\begin{aligned}
\sqrt{2SL} H|\mathbf{k}\rangle &= HS_-(\mathbf{k})|F\rangle = S_-(\mathbf{k})H|F\rangle + [H, S_-(\mathbf{k})_-]|F\rangle \\
&= S_-(\mathbf{k})E_0|F\rangle \\
&\quad - \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{p}} J(\mathbf{p}) (2S_z(\mathbf{p} + \mathbf{k})S_-(-\mathbf{p}) - S_z(\mathbf{p})S_-(-\mathbf{p} + \mathbf{k}) - S_-(\mathbf{p} + \mathbf{k})S_z(-\mathbf{p})) |F\rangle \\
&\quad + BS_-(\mathbf{k})|F\rangle \\
&= \sqrt{2SLE_0}|\mathbf{k}\rangle \\
&\quad - \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{p}} J(\mathbf{p}) (2S_-(-\mathbf{p})S_z(\mathbf{p} + \mathbf{k}) - S_-(-\mathbf{p} + \mathbf{k})S_z(\mathbf{p}) - S_-(\mathbf{p} + \mathbf{k})S_z(-\mathbf{p})) |F\rangle \\
&\quad + \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{p}} J(\mathbf{p}) (2S_-(\mathbf{k}) + S_-(\mathbf{k})) |F\rangle \\
&\quad + B\sqrt{2SL}|\mathbf{k}\rangle
\end{aligned}$$

(mit $S_z(\mathbf{k})S_-(\mathbf{k}') = S_-(\mathbf{k}')S_z(\mathbf{k}) - S_-(\mathbf{k} + \mathbf{k}')$)

$$\begin{aligned}
&= \sqrt{2SL}(E_0 + B)|\mathbf{k}\rangle \\
&\quad - \frac{1}{L} (J(-\mathbf{k})2S_-(\mathbf{k}) - J(0)S_-(\mathbf{k}) - J(0)S_-(\mathbf{k})) LS|F\rangle
\end{aligned}$$

(mit $S_z(\mathbf{k})|F\rangle = LS\delta_{\mathbf{k},0}|F\rangle$ und $\sum_{\mathbf{k}} J(\mathbf{k}) = J_{ii} = 0$)

$$= \sqrt{2SL}(E_0 + B - 2SJ(\mathbf{k}) + 2SJ(0))|\mathbf{k}\rangle$$

$|\mathbf{k}\rangle$ ist Eigenzustand!

$$\boxed{H|\mathbf{k}\rangle = E_{\mathbf{k}}|\mathbf{k}\rangle \quad E_{\mathbf{k}} = E_0 + B - 2SJ(\mathbf{k}) + 2SJ(0)}$$

beachte: Zwei- und Mehr-Magnonen-Zustände keine Eigenzustände!

Anregungsenergie:

$$\boxed{\omega(\mathbf{k}) = E_{\mathbf{k}} - E_0 = B + 2S(J(0) - J(\mathbf{k}))}$$

spontan gebrochene Symmetrie: $B = 0 \rightarrow \omega(\mathbf{k}) = 2S(J(0) - J(\mathbf{k}))$

es ist $\omega(\mathbf{k}) \geq 0$ und $\omega(\mathbf{k}) \rightarrow 0$ für $\mathbf{k} \rightarrow 0$ (langwelliger Limes!)

Holstein-Primakoff-Transformation, Darstellung der Spins durch Bosonen:

$$S_{iz} = S - b_i^\dagger b_i \quad (\text{Bosonenzahl: Abweichung von vollst. Polarisation})$$

$$S_{i+} = \sqrt{2S} \sqrt{1 - b_i^\dagger b_i / (2S)} b_i \quad (\text{sinnvoll nur für } \langle n_i \rangle = \langle b_i^\dagger b_i \rangle \ll S)$$

$$S_{i-} = b_i^\dagger \sqrt{1 - b_i^\dagger b_i / (2S)} \sqrt{2S} \quad (S_{i-} = S_{i+}^\dagger)$$

damit gilt:

- $[b_i, b_j^\dagger]_- = \delta_{ij} \quad \Leftrightarrow$ Drehimpulsalgebra für S_i
- $S_i^2 = \dots = S(S+1)$
- $H = - \sum_{ij} J_{ij} \left(S_{iz} S_{jz} + \frac{1}{2} (S_{i+} S_{j-} + S_{i-} S_{j+}) \right) - B \sum_i S_{iz}$
 $= -JLqS^2 - BLS + \sum_{ij} ((B + 2SqJ)\delta_{ij} - 2SJ_{ij}) b_i^\dagger b_j + \mathcal{O}(b^\dagger b^\dagger b b)$
 $= E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \mathcal{O}(b^\dagger b^\dagger b b) \quad (\text{mit } b_{\mathbf{k}}^\dagger = L^{-1/2} \sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} b_i^\dagger)$
- $b_{\mathbf{k}}^\dagger | \text{Bose-Vakuum} \rangle = | \mathbf{k} \rangle$, Ein-Magnonen-Zustand
 $\rightarrow b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}^\dagger$ vernichten/erzeugen Magnonen

Magnonen-Gas:

$$\boxed{H_{MG} = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}} \quad \text{mit } [b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}^\dagger]_- = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$

Abbildung für $T \rightarrow 0$:

$$\boxed{\text{Heisenberg-Modell} \leftrightarrow \text{Magnonen-Gas}}$$

Thermodynamik des Magnonen-Gases (ideales Bose-Gas mit $\mu = 0$):

mittlere Besetzungszahl:

$$\langle n_{\mathbf{k}} \rangle = b(\omega(\mathbf{k})) = \frac{1}{e^{\beta\omega(\mathbf{k})} - 1}$$

innere Energie:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}) \langle n_{\mathbf{k}} \rangle = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \frac{\omega(\mathbf{k})}{e^{\beta\omega(\mathbf{k})} - 1} \\ &= E_0 + \int dz \frac{z \rho_0(z)}{e^{\beta z} - 1} \quad \text{mit } \rho_0(E) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - \omega(\mathbf{k})) \propto \sqrt{E} \quad (\text{s.u.}) \\ &= E_0 + \text{const} \int dz \frac{z^{3/2}}{e^{\beta z} - 1} = E_0 + \text{const} \times T^{5/2} \quad (\text{Substitution } x = \beta z) \end{aligned}$$

Wärmekapazität:

$$\boxed{C_{B=0}(T) \propto T^{3/2}}$$

(Quasi-)Teilchen: $C \propto T \rightarrow$ keine Fermi-Flüssigkeit

Magnonenzustandsdichte (kubisches Gitter, Dimension D , $B = 0$):

Dispersion:

$$\omega(\mathbf{k}) = 2S(J(0) - J(\mathbf{k}))$$

mit:

$$J(\mathbf{k}) = \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} J_{ij} = 2J \sum_{\mu=1}^D \cos(k_\mu a) = 2J(D - \frac{1}{2}a^2 \mathbf{k}^2 + \dots)$$

also:

$$\omega(\mathbf{k}) = 2SJa^2 \mathbf{k}^2 + \dots = \frac{k^2}{2m^*} + \dots \quad \text{mit } m^* = (4Sa^2J)^{-1}$$

Zustandsdichte für $E \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \rho_0(E) &= \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - \omega(\mathbf{k})) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - \frac{k^2}{2m^*}) \propto \int dk k^{D-1} \delta((\sqrt{2m^*E} - k)(\sqrt{2m^*E} + k)) \\ &= \int dk k^{D-1} \frac{1}{2\sqrt{2m^*E}} \delta(\sqrt{2m^*E} - k) \propto E^{-1/2} E^{(D-1)/2} \end{aligned}$$

für $E \rightarrow 0$:

$$\boxed{\rho_0(E) \propto E^{(D/2)-1}}$$

Gesamtagnonenzahl:

$$\langle N \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle \propto \int_0^\infty dE \frac{\rho_0(E)}{e^{\beta E} - 1} \xrightarrow{E \rightarrow 0} \int_0^\infty dE \frac{E^{\frac{D}{2}-1}}{\beta E} \sim \int_0^\infty dE E^{\frac{D}{2}-2}$$

also $\langle N \rangle \rightarrow \infty$ für (tiefe) $T > 0$ und für $D = 2$ ($\ln E$) und $D = 1$ ($E^{-1/2}$)!

Was passiert hier?

Die Divergenz für $\mathbf{k} \rightarrow 0$ wird durch langwellige transversale thermische Fluktuationen (Magnonen) verursacht. Die Magnonen zerstören also die langreichweitige Ordnung für $D = 1, 2$ für $T \rightarrow 0$, $T > 0$

5.4 Mermin-Wagner-Theorem

Mermin, Wagner 1966:

Theorem: Es gibt keine spontane ($B = 0$) ferromagnetische Ordnung im $D = 1$ und $D = 2$ Heisenberg-Modell mit kurzreichweitiger Wechselwirkung für $T > 0$.

Allgemeiner:

Für $T > 0$ und $D = 1$ und $D = 2$ ist keine mit einer *spontanen* Brechung einer *kontinuierlichen* Symmetrie verbundene langreichweitige Ordnung möglich.

Diskussion:

- Heisenberg-Modell und andere Modelle:
Hubbard-, Kondo-Gitter-, periodisches Anderson-Modell, etc.
- gültig für verschiedene Ordnungsphänomene (F, AF, SL, CDW, ...)
- wichtig:
 - 1) kontinuierliche Symmetrie
(keine Anisotropien, keine symmetriebrechenden Felder)
 - 2) kurzreichweitige Wechselwirkung
- keine Aussage des Theorems zu $T = 0$ bzw. zu $D \geq 3$
- Schwäche der MF-Theorie: keine echte D -Abhängigkeit ($T_C = qJ$)

Skizze des formalen Beweises für das Heisenberg-Modell:

1. Definition eines Skalarprodukts im Raum der Operatoren
2. Cauchy-Schwarzsche Ungleichung \rightarrow Bogoliubov-Ungleichung
3. Ausnutzen für Spin-Operatoren
4. Abschätzung für m für $B = 0$, $T > 0$ in Abhängigkeit von D

1) Skalarprodukt

$$(A, B) = \sum_{m,n}^{E_n \neq E_m} \langle n | A^\dagger | m \rangle \langle m | B | n \rangle \frac{W_m - W_n}{E_n - E_m}$$

mit $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, $W_n = e^{-\beta E_n} / \sum_n e^{-\beta E_n}$

Axiome leicht verifizierbar

aber: $(A, A) = 0$ impliziert nicht $A = 0$ → positiv *semi*-definites Skalarprodukt
(unwichtig für Cauchy-Schwarz)

2) Bogoliubov-Ungleichung:

CS: $(A, A)(B, B) \geq |(A, B)|^2$ setze $B = [C^\dagger, H]_-$, C beliebig

auswerten:

$$(A, B) = (A, [C^\dagger, H]_-) = \dots = \langle [C^\dagger, A^\dagger]_- \rangle$$

$$(B, B) = ([C^\dagger, H]_-, [C^\dagger, H]_-) = \langle [C^\dagger, [H, C]_-]_- \rangle$$

$$(A, A) \leq \frac{\beta}{2} \langle [A^\dagger, A]_+ \rangle$$

mit der Abschätzung

$$\begin{aligned} \frac{W_m - W_n}{E_n - E_m} &= \frac{1}{Z} \frac{e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_n}}{E_n - E_m} \frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_n}} \\ &= (W_m + W_n) \frac{\tanh(\frac{\beta}{2}(E_n - E_m))}{E_n - E_m} \leq \frac{\beta}{2} (W_m + W_n) \end{aligned}$$

→

$$\frac{\beta}{2} \langle [A^\dagger, A]_+ \rangle \langle [C^\dagger, [H, C]_-]_- \rangle \geq (A, A)(B, B) \geq |(A, B)|^2 = |\langle [C^\dagger, A^\dagger]_- \rangle|^2$$

$$\boxed{\frac{\beta}{2} \langle [A^\dagger, A]_+ \rangle \langle [[C, H]_-, C^\dagger]_- \rangle \geq |\langle [C, A]_- \rangle|^2}$$

Bogoliubov-Ungleichung

3) Auswerten für $A = S_-(-\mathbf{k})$, $C = S_+(\mathbf{k})$

$$\langle [C, A]_- \rangle = \langle [S_+(\mathbf{k}), S_-(-\mathbf{k})]_- \rangle = \langle 2S_z(0) \rangle = 2L \langle S_{iz} \rangle = 2Lm$$

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \langle [A^\dagger, A]_+ \rangle &= \sum_{\mathbf{k}} \langle [S_+(\mathbf{k}), S_-(-\mathbf{k})]_+ \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle S_{i+} S_{j-} + S_{j+} S_{i-} \rangle \\ &= 2L \sum_i \langle S_{ix}^2 + S_{iy}^2 \rangle \leq 2L^2 S(S+1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle [[C, H]_-, C^\dagger]_- \rangle &= \langle [[S_+(\mathbf{k}), H]_-, S_-(\mathbf{-k})]_- \rangle = \sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle [S_{i+}, H]_-, S_{j-}]_- \rangle \\
&= 2 \sum_{ij} J_{ij} (1 - e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}) \langle S_{i+} S_{j-} + 2S_{iz} S_{jz} \rangle - 2B \sum_i \langle S_{iz} \rangle \\
&= X(\mathbf{k}) = |X(\mathbf{k})| \leq X(\mathbf{k}) + X(-\mathbf{k}) \\
&= 4 \sum_{ij} J_{ij} (1 - \cos(\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j))) \langle S_{i+} S_{j-} + 2S_{iz} S_{jz} \rangle - 4BLm \\
&= X - 4BLm = X^* - 4BLm \leq X + X^* - 4BLm \\
&= 4 \sum_{ij} J_{ij} (1 - \cos(\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j))) \langle S_{i+} S_{j-} + S_{i-} S_{j+} + 4S_{iz} S_{jz} \rangle - 4BLm \\
&= 4 \sum_{ij} J_{ij} (1 - \cos(\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j))) \langle 2S_i S_j + 2S_{iz} S_{jz} \rangle - 4BLm \\
&\leq 8 \sum_{ij} J_{ij} (1 - \cos(\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j))) (S(S+1) + S^2) - 4BLm \\
&\leq 16S(S+1) \sum_{ij} J_{ij} (1 - \cos(\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j))) + 4BLm \\
&\leq 16S(S+1) \sum_{ij} J_{ij} \frac{1}{2} (\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j))^2 + 4BLm \\
&\leq 8S(S+1) \sum_{ij} J_{ij} k^2 |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|^2 + 4BLm \\
&= LQk^2 + 4BLm \quad \text{mit } Q = 8S(S+1) \frac{1}{L} \sum_{ij} J_{ij} |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|^2 < \infty !
\end{aligned}$$

(keine langreichweitige WW)

4) Abschätzung für m

$$2L^2 S(S+1) \geq \sum_{\mathbf{k}} \langle [A^\dagger, A]_+ \rangle \geq \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|[C, A]_-|^2}{\langle [[C, H]_-, C^\dagger]_- \rangle} \geq \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \frac{4L^2 m^2}{LQk^2 + 4BLm}$$

→

$$\beta S(S+1) \geq \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \frac{4m^2}{Qk^2 + 4Bm} = \text{const.} \times m^2 \int_0 dk \frac{k^{D-1}}{Qk^2 + 4Bm}$$

für $B = 0$ (Isotropie) und $T > 0$ ist:

entweder $m = 0$ **oder** $\int_0 dk k^{D-3}$ konvergent

→

entweder $m = 0$ **oder** $D \geq 3$ q.e.d.

mit $k \sim z^{1/2}$ gleicher Ausdruck wie bei der Diskussion der Gesamtmagnonenzahl:

$$\int_0 dk k^{D-3} \sim \int_0 dz z^{-1/2} z^{(D-3)/2} \sim \int_0 dz z^{(D/2)-2}$$

Kapitel 6

Magnetismus und elektronische Struktur

Beispiele für Magnetismus itineranter Elektronen:

- Stoner-Theorie des Ferromagnetismus
- Slater-Modell für Antiferromagnetismus

(beides: Molekularfeldtheorie für Hubbard-Modell)

6.1 Itineranter Ferromagnetismus

Ferromagnetismus:

- homogene parallele Ordnung lokaler magnetischer Momente:
 $\langle \mathbf{S}_i \rangle = \langle \mathbf{S}_j \rangle$ für alle i, j
- spontane Magnetisierung $\langle \mathbf{S}_i \rangle \neq 0$
o.B.d.A.: $\langle \mathbf{S}_i \rangle \propto \mathbf{e}_z$
- Ursache: Coulomb-WW + Pauli-Prinzip
- Hubbard-Modell: metallischer Ferromagnetismus
- Molekularfeld-Approximation für das Hubbard-Modell → Stoner-Theorie
- Fragen:
Bedingungen für kollektive FM Ordnung?
 T - n - und U -Abhängigkeiten magnetischer Kenngrößen?
Kritisches Verhalten am Phasenübergang, kritische Exponenten?

Hubbard-Modell:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma}$$

Entkopplung:

$$n_{i\sigma} n_{i-\sigma} = n_{i\sigma} \langle n_{i-\sigma} \rangle + \langle n_{i\sigma} \rangle n_{i-\sigma} - \langle n_{i\sigma} \rangle \langle n_{i-\sigma} \rangle + F$$

Vernachlässigung Fluktuationsterms

$$F = (n_{i\sigma} - \langle n_{i\sigma} \rangle)(n_{i-\sigma} - \langle n_{i-\sigma} \rangle) \approx 0$$

liefert:

$$H \approx H' = \sum_{ij\sigma} (t_{ij} + \delta_{ij} U \langle n_{i-\sigma} \rangle) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{const.}$$

Stoner-Modell:

$$H_{\text{Stoner}} = \sum_{ij\sigma} (t_{ij} + \delta_{ij} U \langle n_{i-\sigma} \rangle) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$$

Translationsinvarianz: $\langle n_{i-\sigma} \rangle = n_{-\sigma}$

dimensionslose Magnetisierung: $m = n_\uparrow - n_\downarrow$

Elektronendichte: $n = n_\uparrow + n_\downarrow$

mit

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} \langle n_{i-\sigma} \rangle n_{i\sigma} &= n_\downarrow n_{i\uparrow} + n_\uparrow n_{i\downarrow} \\ &= \frac{1}{2}(n - m)n_{i\uparrow} + \frac{1}{2}(n + m)n_{i\downarrow} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} (n - z_{\sigma} m) n_{i\sigma} \quad \text{mit } z_{\uparrow} = +1, z_{\downarrow} = -1 \end{aligned}$$

ist

$$H_{\text{Stoner}} = \sum_{ij\sigma} (t_{ij} + \delta_{ij} \frac{U}{2} (n - z_{\sigma} m)) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$$

Fourier-Transformation:

$$H_{\text{Stoner}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\varepsilon(\mathbf{k}) + \frac{U}{2} (n - z_{\sigma} m)) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \tilde{\varepsilon}_{\sigma}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$$

$$\text{mit } \tilde{\varepsilon}_{\sigma}(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) + \frac{U}{2} (n - z_{\sigma} m)$$

\mathbf{k} -unabhängige "Austauschspaltung" $\Delta = Um$

H_{Stoner} : Fermi-Gas mit renormierten Ein-Teilchen-Energien

also: $\langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = f(\tilde{\varepsilon}_\sigma(\mathbf{k}) - \mu)$

Fourier-Rücktransformation liefert:

$$\boxed{n_\sigma = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} f(\tilde{\varepsilon}_\sigma(\mathbf{k}) - \mu)} \quad \text{Bestimmungsgleichung für } n_\uparrow, n_\downarrow$$

es folgt:

$$\begin{aligned} m &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} z_\sigma \frac{1}{e^{\beta(\tilde{\varepsilon}_\sigma(\mathbf{k}) - \mu)} + 1} \\ &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu + Un/2)} e^{-\beta Um/2} + 1} - \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu + Un/2)} e^{\beta Um/2} + 1} \right) \\ &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{e^x e^{-y} + 1} - \frac{1}{e^x e^y + 1} \right) \\ &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{e^x e^y - e^x e^{-y}}{e^{2x} + e^x e^{-y} + e^x e^y + 1} \right) \\ &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^y - e^{-y}}{e^x + e^{-y} + e^y + e^{-x}} \\ &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\sinh(\beta Um/2)}{\cosh(\beta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu + Un/2)) + \cosh(\beta Um/2)} \end{aligned}$$

Bestimmungsgleichung für m bei festem n (also $\mu = \mu(n)$)

definiere freie Zustandsdichte (normiert auf Eins):

$$\rho_0(z) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \delta(z - \varepsilon(\mathbf{k}))$$

damit:

$$m = \int dz \rho_0(z) \frac{\sinh(\beta Um/2)}{\cosh(\beta(z - \mu + Un/2)) + \cosh(\beta Um/2)}$$

Diskussion:

- $m = 0$ ist stets Lösung (Paramagnet)
- $m > 0$ Lösung $\rightarrow -m < 0$ Lösung
- $T \rightarrow \infty, \beta \rightarrow 0$:

$$\sinh x = x + \frac{1}{6}x^3 + \dots \quad \text{und} \quad \cosh x = 1 + \frac{1}{2}x^2 + \dots$$

es folgt $m = \beta U m / 4 + \dots$

also: $m = 0$ für $T \rightarrow \infty$

- für $T \rightarrow T_C$, $T < T_C$ ist $m \neq 0$ aber klein
erste nicht-triviale Ordnung der Entwicklung der Bestimmungsgleichung für m liefert:

$$1 = \frac{\beta_C U}{2} \int dz \rho_0(z) \frac{1}{\cosh(\beta_C(z - \mu + Un/2)) + 1}$$

(Bestimmungsgleichung für die Curie-Temperatur)

- $T_C = T_C(U, n) \rightarrow 0$ für $n \rightarrow n_c$ oder $U \rightarrow U_c$
 n_c bzw. U_c markiert den Quantenphasenübergang bei $T = 0$
mit

$$\begin{aligned} \delta(z) &= \frac{d}{dz} \Theta(z) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{d}{dz} \frac{1}{e^{-\beta z} + 1} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\beta e^{-\beta z}}{(e^{-\beta z} + 1)^2} \\ &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\beta}{e^{-\beta z} + 2 + e^{\beta z}} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \frac{\beta}{1 + \cosh(\beta z)} \end{aligned}$$

folgt:

$$1 = U \int dz \rho_0(z) \delta(z + Un/2 - \mu) = U \rho_0(\mu - Un/2)$$

für $T = 0$ ist: $\mu = \varepsilon_F = \varepsilon_F^{(0)} + Un/2$

($\varepsilon_F^{(0)}$: Fermi-Energie des freien ($U = 0$) Systems gleicher Teilchendichte)

denn für $m = 0$ gilt: $\tilde{\varepsilon}_\sigma(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) + Un/2$

$$\rightarrow \boxed{U \rho_0(\varepsilon_F^{(0)}) = 1} \quad (\text{Stoner-Kriterium})$$

Interpretation des Stoner-Kriteriums:

- ferromagnetische Ausrichtung lokaler Spins reduziert die WW-Energie:

$$U \sum_i \langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$$

denn: WW nur zwischen \uparrow - und \downarrow -Elektronen

- allgemein (nicht nur Hubbard-Modell):
Pauli-Prinzip nur effektiv bei Elektronen mit gleicher Spinausrichtung
 \rightarrow Pauli-Prinzip bei parallelen Spins wirkt wie effektive Abstoßung
 \rightarrow Elektronen werden auf Distanz gehalten
 \rightarrow Reduzierung der WW-Energie

- allerdings: Erhöhung der kinetischen Energie:

$$\sum_{ij\sigma} t_{ij} \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle$$

denn: um \downarrow - zu \uparrow -Elektronen werden zu lassen, müssen diese (wegen des Pauli-Prinzips) unbesetzte Zustände höherer Energie auffüllen

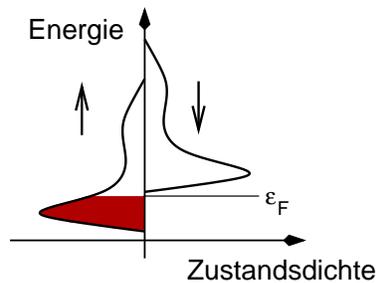
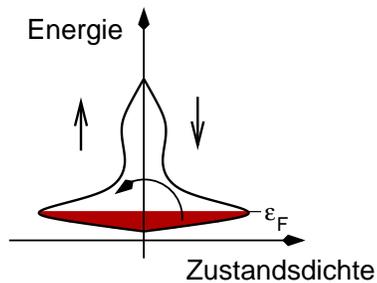
- also:

gut für Ferromagnetismus:

- großes U (starke Reduzierung der WW-Energie)
- hohe Zustandsdichte bei $\varepsilon_F^{(0)}$ (geringe Erhöhung der kinetischen Energie)

paramagnetischer Zustand

ferromagnetischer Zustand



Abschätzung von T_C :

$$1 = \frac{\beta_C U}{2} \int dz \rho_0(z) \frac{1}{\cosh(\beta_C(z - \mu + Un/2)) + 1}$$

Modellzustandsdichte: $\rho_0(z) = 1/W$ für $-W/2 \leq z \leq W/2$

$$1 = \frac{\beta_C U}{2} \frac{1}{W} \int_{-W/2}^{W/2} dz \frac{1}{\cosh(\beta_C(z - \mu + Un/2)) + 1}$$

für realistische T ist $\mu(T) \approx \varepsilon_F = \varepsilon_F^{(0)} + Un/2$

also:

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{\beta_C U}{2} \frac{1}{W} \int_{-W/2}^{W/2} dz \frac{1}{\cosh(\beta_C(z - \varepsilon_F^{(0)})) + 1} \\ &= \frac{\beta_C U}{4W} \int_{-W/2}^{W/2} dz \frac{1}{\cosh^2(\beta_C(z - \varepsilon_F^{(0)})/2)} \\ &= \frac{\beta_C U}{4W} \frac{2}{\beta_C} \left[\tanh(\beta_C(z - \varepsilon_F^{(0)})/2) \right]_{z=-W/2}^{z=W/2} \\ &= \frac{U}{2W} \left(\tanh(\beta_C(W/2 - \varepsilon_F^{(0)})/2) - \tanh(\beta_C(-W/2 - \varepsilon_F^{(0)})/2) \right) \end{aligned}$$

Abschätzung für $\varepsilon_F^{(0)} = 0$ (Halbfüllung):

$$1 = \frac{U}{2W} (\tanh(\beta_C W/4) - \tanh(-\beta_C W/4)) = \frac{U}{W} \tanh(\beta_C W/4)$$

$$\frac{\beta_C W}{4} = \operatorname{arctanh} \frac{W}{U} \approx \frac{W}{U} \quad \text{für große } U$$

also:

$$\boxed{T_C \sim U}$$

beachte:

- Halbfüllung: eigentlich antiferromagnetische Ordnung
- hier: nur grobe Abschätzung
- Fazit: unrealistisch hohe Werte für T_C
- Molekularfeldapproximation fraglich

kritischer Exponent der Magnetisierung?

$$m = \int dz \rho_0(z) \frac{\sinh(\beta U m/2)}{\cosh(\beta(z - \mu + U n/2)) + \cosh(\beta U m/2)}$$

Entwicklung für $T \rightarrow T_C$:

$$\begin{aligned} m &= \left(\frac{\beta U m}{2} + \mathcal{O}(m^3) \right) \int \frac{dz \rho_0(z)}{\cosh(\beta(z - \mu + U n/2)) + 1 + (1/2)(\beta U m/2)^2} \\ &= \left(\frac{\beta U m}{2} + \mathcal{O}(m^3) \right) \int \frac{\rho_0(z) dz}{\cosh(\beta(z - \mu + U n/2)) + 1} \\ &\quad - \left(\frac{\beta U m}{2} + \mathcal{O}(m^3) \right) (1/2)(\beta U m/2)^2 \int \frac{\rho_0(z) dz}{(\cosh(\beta(z - \mu + U n/2)) + 1)^2} \end{aligned}$$

definiere:

$$I = \int \frac{\rho_0(z) dz}{(\cosh(\beta_C(z - \mu + U n/2)) + 1)^2} \Big|_{T_C}$$

beachte (s.o.):

$$\frac{2}{\beta_C U} = \int \frac{\rho_0(z) dz}{\cosh(\beta_C(z - \mu + U n/2)) + 1}$$

dann ist in führender Ordnung in $T - T_C$:

$$m = \left(\frac{\beta U m}{2} + \mathcal{O}(m^3) \right) \frac{2}{\beta_C U} - \left(\frac{\beta U m}{2} + \mathcal{O}(m^3) \right) (1/2)(\beta_C U m/2)^2 I$$

$$m = \frac{\beta U m}{2} \left(\frac{2}{\beta_C U} - (1/2)(\beta_C U m/2)^2 I \right)$$

$$1 = \frac{\beta U}{2} \left(\frac{2}{\beta_C U} - \frac{(\beta_C U)^2}{8} I m^2 \right)$$

also:

$$\boxed{m^2 = \text{const.} \frac{T_C - T}{T_C}} \quad \text{für } T \leq T_C$$

kritischer Exponent $\beta = 1/2$

klassischer (Landau) Wert für den Exponenten !

6.2 Itineranter Antiferromagnetismus

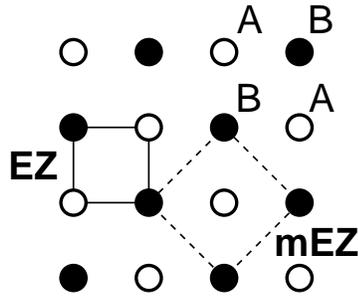
Slater-Modell für Antiferromagnetismus:

- bipartites Gitter in D Dimensionen, hier: $D = 2$, Quadratgitter
- Untergitter $m = A, m = B$
- "chemisches" Gitter: $i = 1, \dots, L$, Ortsvektoren \mathbf{R}_i
"magnetisches" Gitter $I = 1, \dots, L/2$, Ortsvektoren \mathbf{R}_I
- Basisvektoren der chemischen EZ: $(a, 0)^T, (0, a)^T$ (Gitterkonstante: a)
Basisvektoren der magnetischen EZ: $(a, a)^T/\sqrt{2}, (a, -a)^T/\sqrt{2}$
im Folgenden: $a = 1$
- Ein-Teilchen-ONB: $\{|Im\sigma\rangle\}$ mit $i = (I, m)$ und $\sigma = \uparrow, \downarrow$
- Hubbard-Modell in Hartree-Fock-Näherung:
$$H_{\text{Slater}} = \sum_{ij\sigma} (t_{ij} + \delta_{ij} U \langle n_{i-\sigma} \rangle) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$$
- Teilchendichte:
$$n_i = \langle n_{i\uparrow} \rangle + \langle n_{i\downarrow} \rangle = n = \text{const.}$$
- dimensionslose Magnetisierung:
$$m_i = \langle n_{i\uparrow} \rangle - \langle n_{i\downarrow} \rangle = m e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i} \text{ mit } \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$$

also: $m_i = m$ für $i \in A$ und $m_i = -m$ für $i \in B$
alternierend ("staggered")

- m : Ordnungsparameter

$m = 0$ Paramagnet, $m > 0$: Antiferromagnet



mit ($z_{\uparrow} = +1$, $z_{\downarrow} = -1$)

$$\langle n_{i-\sigma} \rangle = \frac{1}{2} (n_i + z_{-\sigma} m_i) = \frac{1}{2} (n - z_{\sigma} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i} m)$$

ist:

$$H_{\text{Slater}} = \sum_{ij\sigma} \left(t_{ij} + \delta_{ij} \frac{Un}{2} - \delta_{ij} z_{\sigma} \frac{Um}{2} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i} \right) c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}$$

definiere:

$$\Delta = Um \quad \tilde{t}_{ij} = t_{ij} + \delta_{ij} \frac{1}{2} Un$$

damit:

$$H_{\text{Slater}} = \sum_{ij\sigma} \left(\tilde{t}_{ij} - \delta_{ij} z_{\sigma} \frac{\Delta}{2} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i} \right) c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}$$

Fourier-Transformation mit $\mathbf{k} \in BZ$ (chemische Brillouin-Zone)

$$c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{i=1}^L e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} c_{i\sigma}^{\dagger} = \sum_i U_{i\mathbf{k}} c_{i\sigma}^{\dagger} \quad U_{i\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}$$

bewirkt Diagonalisierung des ersten Terms:

$$\sum_{ij\sigma} \tilde{t}_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}$$

Dispersion für Modell mit Hopping zwischen nächsten ($t_{ij} = -t < 0$) und übernächsten Nachbarn ($t_{ij} = -t'$):

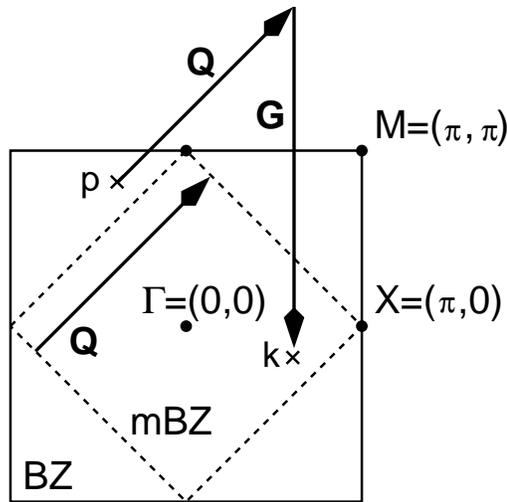
$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t \sum_{s=1}^D \cos k_s - 4t' \sum_{s<s'} \cos k_s \cos k_{s'} \quad (\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) + Un/2)$$

zweiter Term: ($c_{i\sigma}^{\dagger} = \sum_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}i}^{\dagger} c_{i\sigma}^{\dagger}$)

$$\begin{aligned}
& - \sum_{ij\sigma} \delta_{ij} z_\sigma \frac{\Delta}{2} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} = - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}} \sum_{\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \left(\sum_{ij} U_{ki}^\dagger \delta_{ij} z_\sigma \frac{\Delta}{2} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i} U_{jp} \right) c_{\mathbf{p}\sigma} \\
& = - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}} \sum_{\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \left(\frac{1}{L} \sum_i e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} z_\sigma \frac{\Delta}{2} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}_i} \right) c_{\mathbf{p}\sigma} \\
& = - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}} \sum_{\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \left(z_\sigma \frac{\Delta}{2} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{p} \oplus \mathbf{Q}} \right) c_{\mathbf{p}\sigma}
\end{aligned}$$

wobei $\mathbf{p} \oplus \mathbf{Q} = \mathbf{p} + \mathbf{Q} + \mathbf{G}$ mit einem (eindeutig definierten) Vektor des reziproken chemischen Gitters \mathbf{G} , so dass $\mathbf{p} + \mathbf{Q} + \mathbf{G} \in \text{BZ}$

$$\begin{aligned}
& = - \frac{\Delta}{2} \sum_{\sigma} z_\sigma \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \\
& = - \frac{\Delta}{2} \sum_{\sigma} z_\sigma \sum_{\mathbf{k} \in \text{mBZ}} c_{\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{\Delta}{2} \sum_{\sigma} z_\sigma \sum_{\mathbf{k} \notin \text{mBZ}} c_{\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \\
& = - \frac{\Delta}{2} \sum_{\sigma} z_\sigma \sum_{\mathbf{k} \in \text{mBZ}} c_{\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{\Delta}{2} \sum_{\sigma} z_\sigma \sum_{\mathbf{k} \in \text{mBZ}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}\sigma}
\end{aligned}$$



$$\mathbf{k} \in \text{BZ} \rightarrow \mathbf{k} \oplus \mathbf{Q} \in \text{BZ}$$

$$\mathbf{k} \in \text{mBZ} \rightarrow \mathbf{k} \oplus \mathbf{Q} \in \text{BZ}, \notin \text{mBZ}$$

$$\mathbf{k} \in \text{BZ}, \notin \text{mBZ} \rightarrow \mathbf{k} \oplus \mathbf{Q} \in \text{mBZ}$$

es ist:

$$H_{\text{Slater}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{\Delta}{2} \sum_{\sigma} z_\sigma \sum_{\mathbf{k} \in \text{mBZ}} c_{\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{\Delta}{2} \sum_{\sigma} z_\sigma \sum_{\mathbf{k} \in \text{mBZ}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}\sigma}$$

Matrix-Schreibweise:

$$H_{\text{Slater}} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma}^{mBZ} (c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}\oplus\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger}) \begin{pmatrix} \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) & -z_{\sigma} \frac{\Delta}{2} \\ -z_{\sigma} \frac{\Delta}{2} & \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\sigma} \\ c_{\mathbf{k}\oplus\mathbf{Q}\sigma} \end{pmatrix}$$

beachte: $\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}) = \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} + \mathbf{Q} + \mathbf{G}) = \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$

- Fourier-Transformation bzgl. des chemischen Gitter \rightarrow Teil-Diagonalisierung
- zweiter Term des Hamiltonians mit reduzierter Translationssymmetrie
- Diagonalisierung des verbleibenden 2×2 -Problems: 2 Bänder in der mBZ.

Eigenenergien $\eta_r(\mathbf{k})$:

$$0 = (\eta - \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}))(\eta - \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q})) - \frac{\Delta^2}{4}$$

$$0 = \eta^2 - (\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) + \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}))\eta + \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k})\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}) - \frac{\Delta^2}{4}$$

$$\eta_r(\mathbf{k}) = \frac{\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) + \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q})}{2} \pm \sqrt{\frac{(\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) + \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}))^2}{4} - \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k})\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}) + \frac{\Delta^2}{4}}$$

$$\boxed{\eta_r(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left(\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) + \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}) \pm \sqrt{(\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) - \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}))^2 + \Delta^2} \right)}$$

Eigenenergien spinunabhängig, Eigenvektoren spinabhängig

es ist:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) & -z_{\sigma} \frac{\Delta}{2} \\ -z_{\sigma} \frac{\Delta}{2} & \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} \eta_+(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \eta_-(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \mathbf{S}^{\dagger}$$

mit:

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_{\sigma}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}$$

falls:

$$(\eta_-(\mathbf{k}) - \eta_+(\mathbf{k})) \cos \phi \sin \phi = -z_{\sigma} \frac{\Delta}{2}$$

$$\eta_+(\mathbf{k}) \cos^2 \phi + \eta_-(\mathbf{k}) \sin^2 \phi = \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k})$$

$$\eta_+(\mathbf{k}) \sin^2 \phi + \eta_-(\mathbf{k}) \cos^2 \phi = \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q})$$

also falls ($2 \sin x \cos x = \sin 2x$ und $\cos^2 x - \sin^2 x = \cos 2x$):

$$\cos 2\phi = \frac{\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) - \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q})}{\eta_+(\mathbf{k}) - \eta_-(\mathbf{k})}$$

$$\sin 2\phi = \frac{z_\sigma \Delta}{\eta_+(\mathbf{k}) - \eta_-(\mathbf{k})}$$

also:

$$\tan 2\phi = \frac{z_\sigma \Delta}{\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) - \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q})}$$

$\Delta = 0$: mBZ mit 2 Bändern $r = \pm$ nur durch Halbierung der BZ

für $\mathbf{k} = \mathbf{Q}$ ist $\mathbf{k} = \mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}$ und

$$\eta_r(\mathbf{k} = \mathbf{Q}) = \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) \pm \Delta/2$$

→ Δ ist das Gap am Rand der mBZ

→ System isolierend für $\Delta > 0$

→ Slater-Isolator

nach der Diagonalisierung:

System wechselwirkungsfreier Fermionen:

$$H_{\text{Slater}} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r\sigma}^{\text{mBZ}} \eta_r(\mathbf{k}) d_{\mathbf{k}r\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}r\sigma}$$

also:

$$\Omega = -T \sum_{\mathbf{k}r\sigma} \ln(1 + \exp(-\beta(\eta_r(\mathbf{k}) - \mu)))$$

es ist $\Omega = \Omega(\Delta)$

$$\Delta \text{ koppelt an } - \sum_{ij\sigma} z_\sigma \frac{1}{2} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} = -\frac{1}{2} \sum_{i\sigma} z_\sigma e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i} n_{i\sigma}$$

also:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \Delta} = -\frac{1}{2} \sum_{i\sigma} z_\sigma e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i} \langle n_{i\sigma} \rangle = -\frac{1}{2} \sum_i e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i} m_i = -\frac{1}{2} \sum_i m = -\frac{L}{2U} \Delta$$

andererseits:

$$\begin{aligned} -\frac{L}{2U} \Delta &= \frac{\partial \Omega}{\partial \Delta} = (-T) 2 \sum_{\mathbf{k}r} \frac{\exp(-\beta(\eta_r(\mathbf{k}) - \mu))}{1 + \exp(-\beta(\eta_r(\mathbf{k}) - \mu))} (-\beta) \frac{\partial \eta_r(\mathbf{k})}{\partial \Delta} \\ &= 2 \sum_{\mathbf{k}r} \frac{1}{\exp(\beta(\eta_r(\mathbf{k}) - \mu)) + 1} r \frac{1}{2} \frac{2\Delta}{2\sqrt{(\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) - \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}))^2 + \Delta^2}} \end{aligned}$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta}{\sqrt{(\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) - \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}))^2 + \Delta^2}} (f(\eta_+(\mathbf{k}) - \mu) - f(\eta_-(\mathbf{k}) - \mu))$$

Bestimmungsgleichung für Δ bei festem n :

$$1 = U \frac{2}{L} \sum_{\mathbf{k}}^{\text{mBZ}} \frac{1}{\sqrt{(\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) - \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}))^2 + \Delta^2}} (f(\eta_-(\mathbf{k}) - \mu) - f(\eta_+(\mathbf{k}) - \mu))$$

die triviale Lösung $\Delta = 0$ ist ausgenommen

$$1 = U \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}}^{\text{BZ}} \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}))^2 + \Delta^2}} (f(\eta_-(\mathbf{k}) - \mu) - f(\eta_+(\mathbf{k}) - \mu))$$

... wegen $\eta_r(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}) = \eta_r(\mathbf{k})$

Auswertung der Bestimmungsgleichung für teilchen-loch-symmetrisches Modell:

$$t' = 0 \rightarrow \varepsilon(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}) = -\varepsilon(\mathbf{k}) \quad (\text{"perfect nesting"})$$

$$n = 1 \rightarrow \mu = U/2 \quad (\text{Halbfüllung})$$

- "perfect nesting"-Bedingung \rightarrow Instabilität für schwache ($U \rightarrow 0$) WW
- $U = 0$: für $t' = 0$, $n = 1$ ist die Fermi-Fläche identisch mit Rand der mBZ
- gegenüberliegende Teile verlaufen parallel, verbunden durch den "nesting vector" \mathbf{Q}
- anomal großer Phasenraum für Streuprozesse $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}$ mit verschwindend kleiner Anregungsenergie
- also durch \mathbf{Q} charakterisierte Instabilität
- durch \mathbf{Q} charakterisierte Ordnung

damit gilt:

$$1 = U \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}}^{\text{BZ}} \frac{1}{\sqrt{4\varepsilon(\mathbf{k})^2 + \Delta^2}} (f(\eta_-(\mathbf{k}) - \mu) - f(\eta_+(\mathbf{k}) - \mu))$$

und

$$f(\eta_-(\mathbf{k}) - \mu) - f(\eta_+(\mathbf{k}) - \mu) = \frac{1}{e^x e^{-y} + 1} - \frac{1}{e^x e^y + 1} = \frac{\sinh y}{\cosh x + \cosh y}$$

$$\text{mit } x = \beta \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q})}{2} - \mu \right) = \beta \left(\frac{U n}{2} - \mu \right) = 1$$

und $y = \beta \frac{1}{2} \sqrt{(\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) - \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k} \oplus \mathbf{Q}))^2 + \Delta^2} = \beta \frac{1}{2} \sqrt{4\varepsilon(\mathbf{k})^2 + \Delta^2}$

freie Zustandsdichte: $\rho_0(z) = \frac{1}{L} \sum_k^{\text{BZ}} \delta(z - \varepsilon(\mathbf{k}))$

$$1 = \frac{U}{2} \int dz \frac{\rho_0(z)}{\sqrt{z^2 + \Delta^2/4}} \frac{\sinh \beta \sqrt{z^2 + \Delta^2/4}}{1 + \cosh \beta \sqrt{z^2 + \Delta^2/4}}$$

$T = 0, \beta = \infty$:

$$1 = \frac{U}{2} \int dz \frac{\rho_0(z)}{\sqrt{z^2 + \Delta^2/4}}$$

symmetrische Zustandsdichte: $\rho_0(-z) = \rho_0(z)$:

$$1 = U \int_0^\infty dz \frac{\rho_0(z)}{\sqrt{z^2 + \Delta^2/4}}$$

Diskussion:

- $\Delta \rightarrow 0$: Integral divergent bei $z = 0$
- $\Delta = 0$ nur durch $U = 0$ realisierbar
- antiferromagnetische Phase für alle $U > 0$
- Integral von Infrarot-Divergenz dominiert \rightarrow für kleine Δ , d.h. kleine U , kann $\rho_0(z) = 1/W = \text{const.}$ gesetzt werden

also:

$$1 = U \frac{1}{W} \int_0^{W/2} dz \frac{1}{\sqrt{z^2 + \Delta^2/4}}$$

$$1 = \frac{U}{W} \ln(z + \sqrt{z^2 + \Delta^2/4}) \Big|_0^{W/2}$$

$$1 = \frac{U}{W} \left(\ln(W/2 + \sqrt{W^2/4 + \Delta^2/4}) - \ln \Delta/2 \right) \approx -\frac{U}{W} \ln \Delta/2$$

für $\Delta \rightarrow 0$, also:

$$\Delta \propto e^{-1/U}$$

oder:

$$\boxed{m \propto \frac{1}{U} e^{-1/U}}$$

die Untergittermagnetisierung ist nicht analytisch für $U = 0$:

Diskussion:

- weitere Rechnung liefert $T_N \propto e^{-1/U}$, Néel-Temperatur
- $U \rightarrow 0$, hier HF exakt \rightarrow AF
- $U \rightarrow \infty$: Abbildung auf Heisenberg-Modell mit $J < 0 \rightarrow$ AF
- plausibel: Hubbard-Modell für $n = 1$ und U beliebig \rightarrow AF
- Slater-AF erfordert "perfect nesting", also $t' = 0$
 $t' \neq 0$ oder nicht bipartites Gitter \rightarrow kritisches U , AF für $U > U_c > 0$