

5 Einfache Modelle für magnetische Systeme

Auch Festkörper haben Eigenschaften, die wesentlich von der Temperatur abhängen können. Prominentes Beispiel ist die Magnetisierung von Ferromagnetischen Materialien, die oberhalb einer kritischen Temperatur verschwinden kann.

Im einfachen Bild von elementaren Dipolen, die im geordneten Zustand eine makroskopische Magnetisierung hervorrufen können, kann das Verschwinden von Magnetisierung oberhalb einer kritischen Temperatur als durch thermische Fluktuationen herbeigeführte Unordnung verstanden werden. Der Übergang zwischen geordnetem magnetisiertem und ungeordnetem entmagnetisiertem Zustand kann als Phasenübergang verstanden werden (auch wenn der Magnet als Festkörper im kristallinen Zustand verbleibt). Im Folgenden werden wir uns diesen Phänomenen in einfachen Modellen nähern

5.1 Magnetisierung eines Paramagneten

Wir beginnen mit einem paramagnetischen Material bei dem die Wechselwirkung zwischen den elementaren Dipolen vernachlässigt werden kann. Die Dipole ergeben sich aus den magnetischen Momenten $\vec{\mu}$ der Atome oder Moleküle des Materials. Im Folgenden verwenden wir aus der Quantenmechanik,

das magnetische Momente mit Drehimpulsen (auch auf Operatormebene) verknüpft sind,

$$\hat{\vec{\mu}} = \frac{g}{\hbar} \frac{e\hbar}{2mc} \hat{\vec{J}} \equiv \frac{g \mu_0}{\hbar} \hat{\vec{J}} \quad (5.1)$$

wobei $\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc}$ das Bohrsche Magneton bezeichnet und g der dimensionslose gyromagnetische Faktor (Landé-Faktor) ist.

Die Wechselwirkung jedes Dipols mit einem äußeren \vec{B} -Feld wird durch den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\vec{B} \cdot \hat{\vec{\mu}} \quad (5.2)$$

beschrieben. Aus der Quantenmechanik wissen wir, dass diese die Eigenwerte (sei $\vec{B} = B \hat{e}_z$)

$$E_m = -g \mu_0 B m, \quad m = -J, -J+1, \dots, J-1, J$$

besitzt, wobei J die Drehimpulsquantenzahl, d.h. Eigenwert von $\hat{J}^2 \rightarrow \hbar^2 J(J+1)$, ist, die halbganzzahlige Werte annehmen kann. (5.3)

Da zwischen den Dipolen keine Wechselwirkung besteht, faktorisiert die kanonische Zustandssumme in die Zustandssummen der einzelnen Dipole:

$$Z_c = Z_1^N \quad \left(\text{bzw. } \frac{1}{N!} Z_1^N \right) \quad (5.3)$$

für ununterscheidbare
Dipole

Die Ein-Dipol-Zustadssumme lautet

$$Z_1 = \sum_{m=-J}^J e^{-\beta E_m} = \sum_{m=-J}^J e^{\beta g \mu_0 B m} =: \sum_{m=-J}^J e^{q m}, \quad (5.4)$$

wobei wir wieder das Verhältnis der relevanten Energieskalen

$$q = \beta g \mu_0 B = \frac{g \mu_0 B}{k_B T}, \quad (5.5)$$

das heißt der magnetischen und der thermischen Energie eingeführt haben.

Die Zustadssumme (5.4) lässt sich elementar auswerten, vgl. Übungen. Wir erhalten

$$Z_1 = \frac{\sinh [q (J + \frac{1}{2})]}{\sinh (q/2)} \quad (5.6)$$

Aus Z_1 können wir das mittlere magnetische Moment eines Atoms / Moleküls in Richtung des Magnetfelds berechnen,

$$\langle \mu_z \rangle = \frac{\sum_m g \mu_0 m e^{q m}}{Z_1} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_1}{\partial B} \quad (5.7)$$

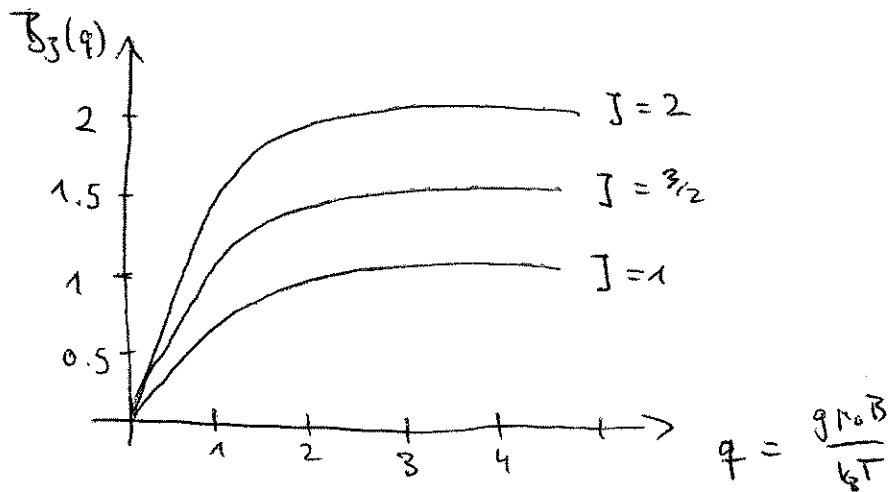
$$\equiv M,$$

dies wir auch als Magnetisierung M bezeichnen. Wir erhalten

$$M = g \mu_0 B_J(q) \quad (5.8)$$

mit der Brillouin-Funktion

$$B_J(q) = (J + \frac{1}{2}) \coth (q (J + \frac{1}{2})) - \frac{1}{2} \coth \frac{q}{2} \quad (5.9)$$



Im Fall $q \ll 1$ (kleine Magnetfelder / hohe Temperaturen)

verhält sich die Brillouin-Funktion wie

$$B_J(q) \approx \frac{q}{3} J(J+1), \quad q \ll 1 \quad (5.10)$$

d.h. die Magnetisierung steigt linear mit dem äußeren Magnetfeld

an, $M \sim B$.

(5.11)

Für $q \gg 1$ (große Magnetfelder / kleine Temperaturen) gilt

$$B_J(q) \approx J, \quad q \gg 1, \quad (5.12)$$

so dass die Magnetisierung gegen einen Maximalen Wert

strebt

$$M \approx g \mu_0 J, \quad (5.13)$$

d.h. alle Dipole sind maximal entlang des Magnetfelds

ausgerichtet.

Von Interesse ist ebenso die magnetische Suszeptibilität χ_m ,

definiert als Proportionalitätsfaktor zwischen Magnetisierung

und Magnetfeld,

$$M = \chi_m B. \quad (5.14)$$

In den entsprechenden Limites finden wir

$$\chi_m \approx \frac{g^2 \mu_0}{3 k_B T} J(J+1), \quad g \ll 1 \quad (5.15)$$

$$\chi_m \approx g \mu_0 \frac{J}{B} \rightarrow 0, \quad g \gg 1$$

Das hier diskutierte paramagnetische Modell zeigt offensichtlich keinen Phasenübergang zu einem Permanentmagneten, wie wir ihn von ferromagnetischen Materialien kennen. Dafür ist eine hinreichend starke Wechselwirkung der Dipole notwendig.

5.2 Das eindimensionale Ising-Modell

Das Ising-Modell ist ein einfaches (und zugleich wegweisendes) Modell für ferromagnetische Eigenschaften. Das von Ernst Ising vorgeschlagene und in einer Dimension gelöste Modell (Promotion 1924) beschreibt klassische Dipol-Freiheitsgrade, die entlang einer Achse die Werte $\sigma_i = \pm 1$ annehmen können. Die N Freiheitsgrade mit $i = 1, \dots, N$ seien der Einfachheit halber entlang eines Kreises angeordnet (um löstige, irrelevante Randeffekte

zu vermeiden), bzw. entlang einer Linie mit periodischen Randbedingungen. Wie beim Paramagneten gibt es eine Wechselwirkung mit einem äußeren Magnetfeld vom Typ

$$H_B = -b \sum_{k=1}^N \sigma_k \quad (5.16)$$

wobei b proportional zur Feldstärke B ist und alle weiteren Faktoren und Konstanten, vgl. (5.2), (5.3), subsummiert.

Desweiteren seien benachbarte Dipole mit einer Wechselwirkungsstärke J aneinander gekoppelt. Die Ising-Hamilton-Funktion lautet:

$$H(\{\sigma_i\}) = -J \sum_{k=1}^N \sigma_k \sigma_{k+1} - b \sum_{k=1}^N \sigma_k \quad (5.17)$$

Die beiden Kopplungskonstanten J und b tragen die Dimension einer Energie.

Die kanonische Zustandssumme lautet

$$\begin{aligned} Z_c &= \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left(\beta \left(J \sum_{k=1}^N \sigma_k \sigma_{k+1} + b \sum_{k=1}^N \sigma_k \right) \right) \\ &= \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{k=1}^N \exp \left(\beta J \sigma_k \sigma_{k+1} + \beta \frac{b}{2} (\sigma_k + \sigma_{k+1}) \right), \quad (5.18) \end{aligned}$$

wobei $\sum_{\{\sigma_i\}}$ die Summe über alle möglichen Konfigurationen, d.h. Verteilungen von ± 1 auf allen Plätzen i , bezeichnet.

Die Werte, die jedes einzelne Faktor in (5.18) annehmen kann, können wir in einer 2×2 Matrix anordnen:

$$T_{\sigma_n \sigma_{n+1}} := \begin{matrix} + & - \\ + & - \\ - & + \end{matrix} \begin{pmatrix} e^{B(J+b)} & e^{-BJ} \\ e^{-BJ} & e^{B(J-b)} \end{pmatrix}. \quad (5.19)$$

Dies ist die Transformatrix T . Das Produkt von (5.18) wird somit einschließlich der Summe $\sum_{\sigma_i:3}$ zu einem Matrixprodukt:

$$\begin{aligned} Z_c &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} T_{\sigma_1 \sigma_2} T_{\sigma_2 \sigma_3} \dots T_{\sigma_N \sigma_{N+1}} \\ & \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\equiv \sigma_1} \\ &= T_N T^N \quad (5.19) \end{aligned}$$

und mit Hilfe der periodischen Randbedingungen zu einer Spur.

Die Transformatrix in (5.19) ist reell und symmetrisch, kann also diagonalisiert werden.

$$T \rightarrow \begin{pmatrix} T_+ & 0 \\ 0 & T_- \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

Die Spur (5.19) ist invariant unter Diagonalisierung, d.h.

$$\underline{Z_c} = \text{Tr} \begin{pmatrix} T_+ & 0 \\ 0 & T_- \end{pmatrix}^N = \text{Tr} \begin{pmatrix} T_+^N & 0 \\ 0 & T_-^N \end{pmatrix} = \underline{T_+^N + T_-^N} \quad (5.21)$$

Explizite Diagonalisierung von (5.19) ergibt

$$T_{\pm} = e^{\beta J} \left[\cosh \beta b \pm \sqrt{\sinh^2 \beta b + e^{-4\beta J}} \right] \quad (5.22)$$

Wegen $0 < \tau_- < \tau_+$ dominiert τ_+ den thermodynamischen Limes,

$$Z_c = \tau_+^N + \tau_-^N = \tau_+^N \left(1 + \underbrace{\left(\frac{\tau_-}{\tau_+} \right)^N}_{\substack{0 < \frac{\tau_-}{\tau_+} < 1 \\ \rightarrow 0 \text{ für } N \rightarrow \infty}} \right)$$

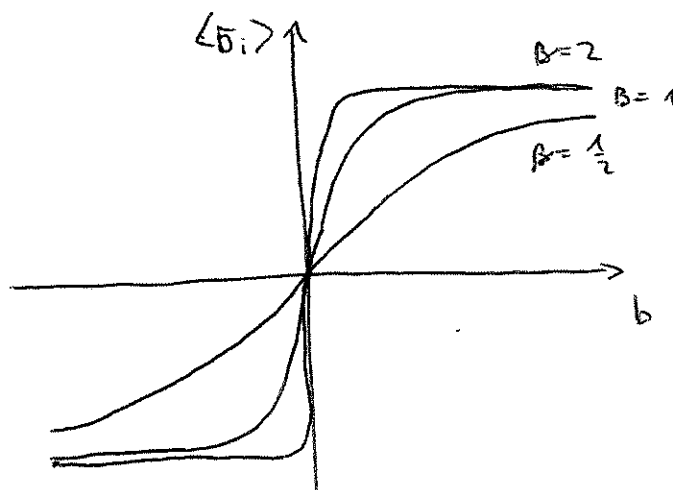
$$\rightarrow \tau_+^N \text{ für } N \rightarrow \infty. \quad (5.23)$$

Damit erhalten wir die freie Energie pro Dipol

$$\begin{aligned} \underline{f} = \frac{F}{N} &= -\frac{1}{N} k_B T \ln Z_c \stackrel{N \rightarrow \infty}{=} -k_B T \ln \tau_+ \\ &= -J - k_B T \ln \left[\cosh \beta b + \sqrt{\sinh^2 \beta b + e^{-4\beta J}} \right], \quad (5.24) \end{aligned}$$

woraus ähnlich wie in (5.7) das mittlere magnetische Moment durch Ableitung folgt:

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{N} \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_c}{\partial b} = - \frac{\partial f}{\partial b} = \frac{\sinh \beta b}{\sqrt{\sinh^2 \beta b + e^{-4\beta J}}} \quad (5.25)$$



Für endliche Temperaturen verhält sich das Modell zunächst ähnlich wie der Paramagnet: mit abnehmendem Magnetfeld fällt die Magnetisierung auf Null. Ising verwarf daher das Modell zunächst, da es den erhofften ferromagnetischen Phasenübergang nicht zeigt. Genau genommen zeigt es den Phasenübergang bei $T_c = 0$, d.h. der Temperaturnullpunkt entspricht der kritischen Temperatur, denn

$$\lim_{b \rightarrow 0^+} \lim_{T \rightarrow 0} \langle \sigma_i \rangle = +1 \quad (5.26)$$

$$\lim_{b \rightarrow 0^-} \lim_{T \rightarrow 0} \langle \sigma_i \rangle = -1$$

d.h. wir finden den für einen Phasenübergang erwarteten Sprung in der Magnetisierung in Abhängigkeit von der "Vorgeschichte" (Hysteresis).

1944 gelang es L. Onsager das Ising-Modell analytisch in zwei Dimensionen zu lösen, und zu zeigen, dass der Phasenübergang tatsächlich bei endlichen Temperaturen auftritt.

Dies gilt auch (aller Evidenz nach) in drei Dimensionen, auch wenn eine analytische Lösung noch nicht gelungen ist. Das dreidimensionale Ising-Modell dient bis heute als wichtigstes Testmodell für viele Näherungsverfahren der statistischen Physik und ist nach wie vor Gegenstand aktueller Forschung.

5.3 Das Curie-Weiss-Modell

Das Curie-Weiss-Modell ist eine scheinbar leicht veränderte Form des 1D-Ising-Modells, wobei statt der "Nächste-Nachbar"-Wechselwirkung die Wechselwirkung eines Dipols "im Bad" aller Dipole berücksichtigt wird. Die Hamilton-Funktion eines Dipols lautet also:

$$H_i = -J \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_i \sigma_j - b \sigma_i \quad (5.27)$$

bzw. die gesamte Hamilton-Funktion des Curie-Weiss-Modells ist

$$H(\{\sigma\}) = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j - b \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (5.28)$$

wobei der Faktor $\frac{1}{2}$ die wechselseitige Doppelzählung in der Summe entfernt. Somit wechselwirkt ein Dipol nicht lediglich lokal sondern instantan mit allen Dipolen des Systems.

Die kanonische Zustandssumme lautet

$$\begin{aligned} Z_C &= \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[\beta \left(\frac{J}{2N} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j + b \sum_{i=1}^N \sigma_i \right) \right] \\ &= \sum_i \sigma_i \sum_j \sigma_j \\ &= \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^2 \end{aligned} \quad (5.29)$$

Der Exponent lässt sich mit Hilfe der Formel

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mu e^{-A\mu^2 + B\mu} = \sqrt{\frac{\pi}{A}} e^{\frac{B^2}{4A}} \quad (5.30)$$

in den Dipol-Variablen linearisieren, wenn wir

$$y = \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad \frac{B^2}{4A} = \frac{\beta J}{2N} \quad (5.31)$$

wählen. Durch Reparametrisierungen der Hilfs-Integrationsvariable μ sind verschiedene Wahlen von A und B möglich. Nützlich ist folgende Wahl:

$$B = \beta J, \quad A = \frac{N\beta J}{2}. \quad (5.32)$$

Damit nimmt die Zustandssumme folgende Form an:

$$Z_c = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu e^{-\frac{N\beta J}{2} \mu^2} \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta(J\mu + b) \sum_{i=1}^N \sigma_i}. \quad (5.33)$$

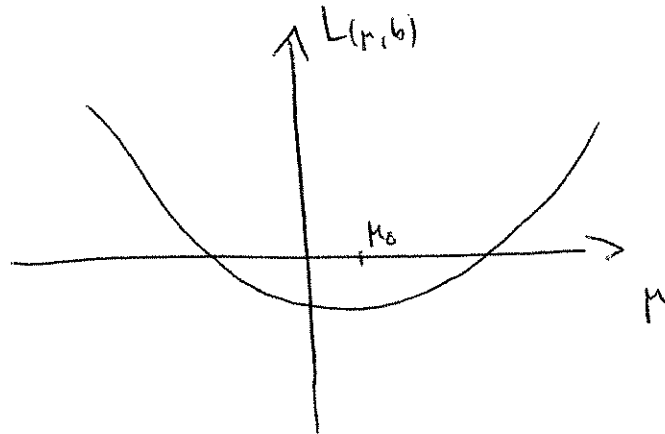
Die Dipole sind somit entkoppelt. Die Summe über die Konfigurationen lässt sich ausführen:

$$\begin{aligned} \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta(J\mu + b) \sum_{i=1}^N \sigma_i} &= \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=1}^N e^{\beta(J\mu + b) \sigma_i} \\ &= \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \sum_{\sigma_2 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} e^{\beta(J\mu + b) \sigma_1} e^{\beta(J\mu + b) \sigma_2} \dots e^{\beta(J\mu + b) \sigma_N} \\ &= (2 \cosh(\beta(J\mu + b)))^N \\ &= e^{N \cdot \ln(2 \cosh(\beta(J\mu + b)))} \end{aligned} \quad (5.34)$$

$$\Rightarrow Z_c = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu e^{-\beta N L(\mu, b)} \quad (5.35)$$

mit der Landau-Funktion

$$L(\mu, b) = \frac{J}{2} \mu^2 - \frac{1}{\beta} \ln \left[2 \cosh(\beta(J\mu + b)) \right] \quad (5.36)$$



Es bleibt noch, das Hilfsintegral über μ auszuführen. Im Limes großer $N \rightarrow \infty$ ist zu erwarten, dass das Integral lediglich Beiträge in der Nähe des Minimums μ_0 der Landau-Funktion erhält; d.h. wir werten das μ -Integral in Sattelpunktnähe aus. Taylor-Entwicklung um μ_0 herum liefert:

$$L(\mu, b) = \underbrace{L(\mu_0, b)}_{=: L_0} + \frac{1}{2} \underbrace{\frac{\partial^2 L(\mu_0, b)}{\partial \mu^2}}_{=: L_2} (\mu - \mu_0)^2 + \dots \quad (5.37)$$

Die Bestimmungsgleichung für das Minimum μ_0 erhalten wir aus

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \frac{\partial L(\mu = \mu_0)}{\partial \mu} = J\mu_0 - J \tanh[\beta(J\mu_0 + b)] \\ \Rightarrow \quad \mu_0 &= \underline{\underline{\tanh[\beta(J\mu_0 + b)]}}. \end{aligned} \quad (5.38)$$

Diese transzendente Gleichung definiert μ_0 implizit.

Für die 2. Ableitung ergibt sich an $\mu = \mu_0$ unter Verwendung von (5.38):

$$L_2 = \frac{\partial^2 L}{\partial \mu^2}(\mu = \mu_0, b) = J(1 - \beta J(1 - \mu_0^2)). \quad (5.39)$$

Die Zustandssumme (5.35) in Sattelpunktnäherung lautet somit

$$\begin{aligned} \underline{Z_c} &= \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} e^{-\beta N L_0} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu e^{-\beta N L_2 \frac{(\mu - \mu_0)^2}{2}} \\ &= \sqrt{\frac{J}{L_2}} e^{-\beta N L_0} \end{aligned} \quad (5.40)$$

Im Limes $N \rightarrow \infty$ trägt nur der Exponent relevant zur

freien Energie pro Freiheitsgrad bei:

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} -k_B T \frac{\ln Z_c}{N} = L_0 = L(\mu_0, b) \quad (5.41)$$

Analog zu (5.25) können wir hiermit das mittlere magnetische Moment pro Freiheitsgrad berechnen:

$$\begin{aligned} \underline{\langle \sigma_i \rangle_{EM}}(\beta, b) &= - \frac{\partial f}{\partial b} = - \frac{\partial L(\mu_0, b)}{\partial b} \stackrel{(5.38)}{=} \tanh[\beta(J\mu_0 + b)] \\ &\stackrel{(5.38)}{=} \underline{\mu_0}, \end{aligned} \quad (5.42)$$

was genau dem Minimum der Landau-Funktion entspricht.

Die Landau-Funktion kann somit als "Potential" für die mittlere Magnetisierung pro Freiheitsgrad verstanden werden.

Die magnetische Suszeptibilität ergibt sich Ableitung nach b :

$$\chi_m = \frac{\partial M}{\partial b} = \frac{\partial \mu_0}{\partial b} = \frac{\beta(1-m^2)}{1-(1-m^2)\beta J} \quad (5.43)$$

wobei (5.42) mehrfache zu verwenden ist.

Betrachten wir diese Resultate nun im Grenzfall kleiner Magnetfelder, $b \rightarrow 0^+$

$$\stackrel{(5.42)}{\Rightarrow} \mu_0 = \tanh \beta J \mu_0 \quad (5.44)$$

Die Größe $\beta J = \frac{J}{k_B T}$ beschreibt das Verhältnis von Wechselwirkungsenergie J zu thermischer Energie. Bei hohen Temperaturen $k_B T > J$ hat (5.44) lediglich die

$$\text{Lösung} \quad \underline{\mu_0 = 0} \quad \text{für} \quad \underline{k_B T > J} \quad (5.45)$$

Die Suszeptibilität wird somit ($\mu_0 = m = 0$)

$$\chi_m = \frac{\beta}{1 - \beta J} \quad \text{für} \quad k_B T > J \quad (5.46)$$

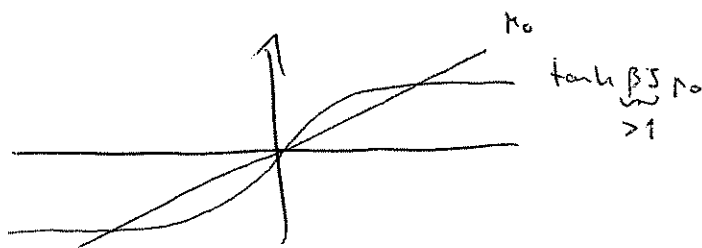
Sie divergiert für $k_B T \rightarrow J$. Diese "kritische" Temperatur

$$T_c = \frac{J}{k_B} \quad (5.47)$$

heißt auch Curie-Temperatur. Oberhalb von $T > T_c$ zeigt das System keine Magnetisierung für $b \rightarrow 0^+$.

Für $T < T_c$, d.h. $k_B T < J$, hat (5.44) insgesamt

3 Lösungen:



$m_0 = 0$ ist zwar nach wie vor Lösung von (5.44), jedoch gilt nach (5.39) dann

$$\begin{aligned} L_2 &= \frac{\partial^2 L(m=m_0)}{\partial m^2} = \left[1 - \beta J (1 - m_0^2) \right] \Big|_{m_0=0} \\ &= \left[1 - \beta J \right] < 0, \end{aligned} \quad (5.48)$$

so dass $m_0 = 0$ kein Minimum der freien Energie mehr ist. Ein solches Minimum benötigt also $m_0^2 > 0$.

Nahel, aber unterhalb der Curie-Temperatur T_c , kann (5.44) näherungsweise gelöst werden. Dazu entwickeln wir den tanh:

$$m_0 \approx m_0 \frac{T_c}{T} - \frac{m_0^3}{3} \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \quad (5.49)$$

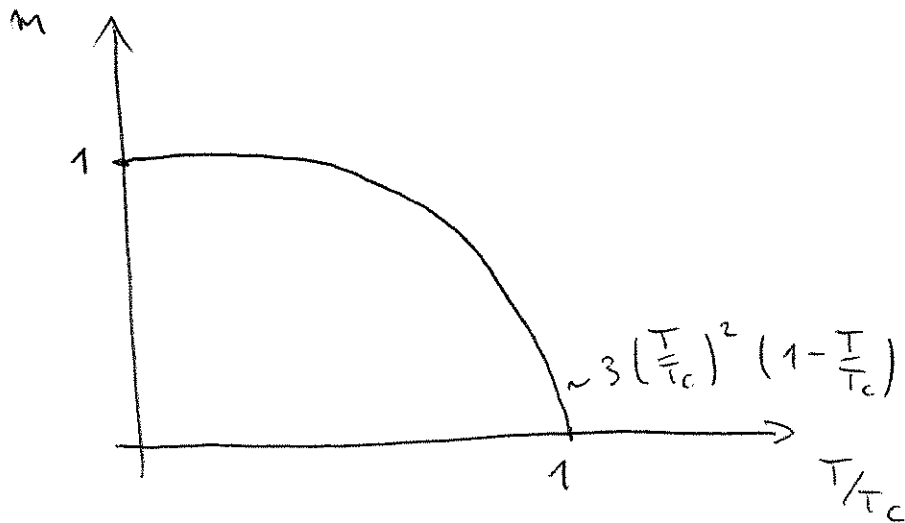
Für $m_0 \neq 0$
 \Rightarrow

$$\underline{m_0^2 = m^2} \approx \underline{3 \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)}$$

Für hohe Temperaturen $\beta J \rightarrow \infty$ wird (5.44) zwangsgemäß durch

$$m_0^2 = m^2 \rightarrow 1 \quad (5.50)$$

gelöst.



Für $T < T_c$ finden wir also eine endliche Magnetisierung auch für verschwindendes Magnetfeld. Dies charakterisiert einen Ferromagneten. Mit zunehmender Temperatur wird die Magnetisierung kleiner und fällt mit $T \rightarrow T_c$ "senkrecht" auf Null ab. Oberhalb von $T > T_c$ verhält sich das System paramagnetisch. Das Curie-Weiss-Modell beschreibt somit einen Phasenübergang zwischen einer ferromagnetischen und einer paramagnetischen Phase.

Nahel $T \approx T_c$ können wir auch die Suszeptibilität berechnen:

$$\chi_m \underset{(5.49)}{\overset{(5.43)}{\approx}} \frac{1}{2k_B T_c} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{-1}. \quad (5.51)$$

Diese divergiert nahe $T \sim T_c$, d.h. kleine Änderungen des äußeren Magnetfelds können große Änderungen der Magnetisierung bewirken.