

Kapitel 6

Magnetismus

6.1 Einleitung

Magnetismus ist eines der grundlegenden Phänomene der Festkörperphysik. Magnetische Effekte sind u.a. für Ferro- und Antiferromagnetismus verantwortlich. Sie spielen eine wichtige Rolle bei den Schweren Fermionen und den Hochtemperatur-Supraleitern.

Die allermeisten magnetischen Systeme können nicht durch einfache Modelle schwach wechselwirkender Elektronen beschrieben werden, die Elektron-Elektron Abstoßung spielt im Magnetismus eine wichtige Rolle.

6.1.1 Dipol-Dipol-Wechselwirkung

Wir schätzen zunächst die magnetostatische Energie

$$U = \frac{1}{r^3} \left[\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2 - 3(\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{n})(\mathbf{m}_2 \cdot \mathbf{n}) \right]$$

von zwei magnetischen Dipolen \mathbf{m}_1 und \mathbf{m}_2 ab, wobei $r\mathbf{n}$ der Verbindungsvektor ist. Größenordnungs-mässig gilt:

$$U_{dipole-dipole} \approx \frac{m_1 m_2}{r^3} .$$

Mit

$$m_1 \sim m_2 \sim g\mu_B \sim \frac{e\hbar}{m} ,$$

und $r \approx 2 \text{ \AA}$, $a_0 \approx \hbar^2/(me^2)$, erhalten wir

$$U \sim \frac{(g\mu_B)^2}{r^3} \sim \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \left(\frac{a_0}{r} \right)^3 \frac{e^2}{a_0} \sim 10^{-4} \text{ eV} ! ,$$

also ungefähr eine Grad Kelvin!

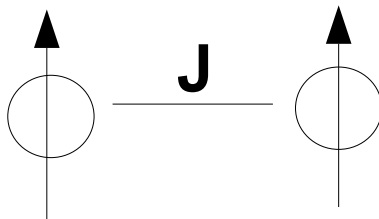


Abbildung 6.1: Sowohl die Bildung lokaler magnetischer Momente wie auch die Austauschwechselwirkung (\mathbf{J}) zwischen ihnen geht auf Coulomb-Korrelations-Effekte zurück.

6.1.2 Freie magnetische Momente

Zeeman-Aufspaltung

Wir betrachten nun nicht-wechselwirkende Elektronen mit einem magnetischem Moment

$$\approx \mu_B(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}), \quad (6.1)$$

wie sie typischerweise in ionischen Zuständen auftreten. In einem äusseren magnetischen Feld B ändert sich die Energie der Momente um die Zeeman-Energie

$$\Delta E \sim \mu_B(L + 2S)B \sim \mu_B B, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \sim 5.8 \times 10^{-5} \frac{eV}{T}.$$

Große Magnetische Felder haben eine Feldstärke von $\sim 10T$, die Zeeman-Energie beträgt also höchstens

$$\Delta E \sim 10^{-3} \text{ eV} \quad \text{oder} \quad \sim k_B(10^0 \text{ K}) \quad (6.2)$$

Dieses ist eine sehr kleine Energie, oberhalb von

$$k_B T > \mu_B B \quad (6.3)$$

verschwindet das magnetische Moment von Bandelektronen aufgrund der thermischen Fluktuation.

Curie-Weiss-Gesetz

Die Suszeptibilität misst die Variation des induzierten magnetischen Momentes bei einem angelegten äusseren magnetischen Feld. Für freie Spin-1/2 Ionen finden wir mit $g \approx 2$

$$\langle m \rangle = g\mu_B \frac{1}{2} \frac{(e^{-\beta \frac{1}{2} g \mu_B B} - e^{\beta \frac{1}{2} g \mu_B B})}{(e^{-\beta \frac{1}{2} g \mu_B B} + e^{\beta \frac{1}{2} g \mu_B B})} \quad (6.4)$$

$$\simeq g \frac{\mu_B}{2} \tanh(\beta \mu_B B) \approx \mu_B \frac{\mu_B B}{k_B T} \quad (g \sim 2)$$

$$\chi = \frac{\partial \langle m \rangle}{\partial B} \approx \frac{\mu_B^2}{k_B T} \quad (6.5)$$

das Curie-Weiss-Gesetz $\sim 1/T$, welches auch für alle anderen magnetischen Systeme asymptotisch bei hohen Temperaturen gilt. Die typische Temperaturskala ist wieder $10^0 K$!

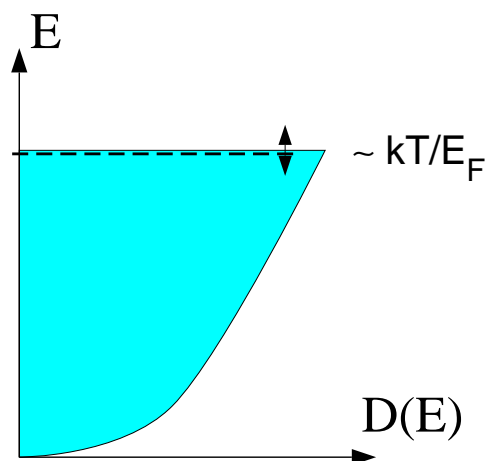


Abbildung 6.2: In einem Metall tragen nur die Elektronen in der Nähe der Fermikante zur Suszeptibilität bei: $\chi \sim \frac{kT}{E_F} \frac{\mu_B^2}{k_B T} \sim \mu_B^2 D(E_F)$.

6.1.3 Das freie Fermi Gas

Als Wiederholung berechnen wir nun die $T = 0$ Suszeptibilität eines freien Fermi Gases mit dem Hamiltonian

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad \xi_{\mathbf{k}, \sigma} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \mu + \sigma \frac{g\mu_B}{2} B, \quad \sigma = \pm 1$$

und der Zustandsdichte

$$D(E) = \frac{1}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2m^3 E}$$

pro Spin (Abschnitt 3.7). Das magnetische Feld entspricht daher effektiv einem Spin-abhängigem chemischen Potential $\mu_\sigma = \mu - \sigma g\mu_B B/2$ und wir erhalten

$$\langle m \rangle = \frac{g\mu_B}{2} D(E_F) (\mu_+ - \mu_-) = \frac{g^2 \mu_B^2}{2} D(E_F) B,$$

und somit

$$\chi = \frac{\partial \langle m \rangle}{\partial B} = 2\mu_B^2 D(E_F)$$

für die Suszeptibilität des freien Elektronengases.

Eisen und Nickel

Nun wissen wir aber, dass es Eisen und Nickel gibt, und andere Ferromagnete, welche bei tausend Kelvin magnetisch ordnen. Die Curie-Temperatur von Eisen ist $T_c = 1043$ K. Wie kommen diese hohen magnetischen Energien zustande? Da Eisen und Nickel Metalle sind, ist diese Frage noch dringender, denn bei Metallen tragen, wie eben berechnet, nur ein kleiner Teil aller Elektronen, die an der Fermikante, zum elektronischem Verhalten bei.

Diamagnetismus

Weiterhin ist zu bemerken, dass ein äusseres Magnetfeld in Metallen, aufgrund der Lenz'schen

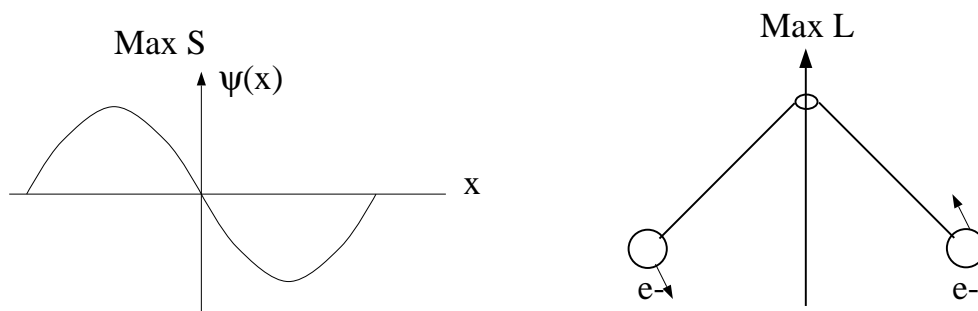


Abbildung 6.3: Hund'sche-Regel: Maximales S und L , beides um die intra-atomare Coulomb-Energie zu minimieren.

Regel, diamagnetischen Ströme induziert. Diese Ströme erzeugen ihrerseits ein magnetisches Moment, welches dem äusseren Magnetfeld entgegensteht. Die Suszeptibilität kann dadurch negativ werden (Band-Diamagnetismus). Darüber hinaus können auch Ionen mit gefüllten Schalen, durch die induzierten atomaren Ströme (Lamor-Diamagnetismus), diamagnetisch sein. Wir werden hier nicht weiter auf diese beiden Phänomene eingehen.

6.2 Coulomb-Korrelationen

6.2.1 Bildung des magnetischen Momentes

Die Relevanz der intra-atomaren Coulomb-Abstossung nimmt mit abnehmendem Radius der atomaren Wellenfunktionen der Valenzbänder zu. Sie ist für $3d$ - und $4f$ -Elektronen in Übergangsmetallverbindungen sehr wichtig. Eine Konsequenz sind die beiden Hund'schen Regeln.

- Erste Hund'sche Regel

Die erste Hund'sche Regel besagt, dass der totale Spin S maximal sein soll, der Spin der Valenz-Elektronen also parallel sein soll. Damit wird die Spin-Wellenfunktion symmetrisch. Die antisymmetrische Orstwellenfunktion hat dann Knoten und die Elektronen sind im Mittel weiter voneinander entfernt, was die Coulomb-Abstossung minimiert.

- Zweite Hund'sche Regel

Nach der zweiten Hund'schen Regel ist der Bahndrehimpuls L maximal. Anschaulich werden dann die Elektronen wie bei einer Zentrifuge nach aussen 'geschleudert', damit ist ihr Abstand wiederum im Durchschnitt vergrössert. Quantenmechanisch entspricht dies dem Term $\sim L(L+1)/r^2$ in der radialen Schrödinger-Gleichung.

Die atomaren Korrelationen implizieren also ein möglichst grosses atomares magnetisches Moment:

$$\approx \mu_B(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) .$$

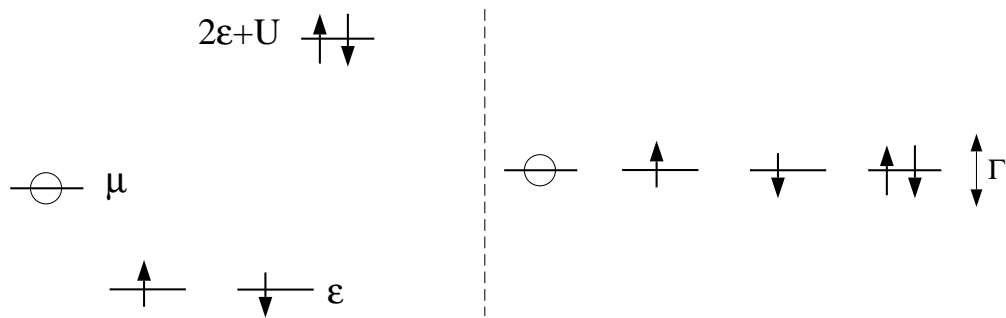


Abbildung 6.4: Ein lokales Moment wird gebildet, wenn die Bandbreite Γ der kinetischen Bewegung viel kleiner als die inter-orbitale Coulomb-Abstoßung U ist.

Elektronische Bänder

Die Hund'schen Regeln gelten für isolierte Atome. In einem Festkörper überlappen jedoch die atomaren Wellenfunktionen und es werden Bänder gebildet. Die kinetische Energie wirkt also der Entstehung von lokalen magnetischen Momenten entgegen.

Sei die typische Bandbreite der elektronischen Bänder an der Fermikante Γ . In einem einfachen Modell (Hubbard-Atom) mit einem relevanten Orbital an der Fermikante haben die einfach-besetzten Zustände jeweils die Energie ε , und der doppelt besetzte Zustand $2\varepsilon + U$.

Falls die Energiedifferenz

$$(2\varepsilon + U) - \varepsilon \gg \Gamma$$

ist, dann wird sich ein lokales Spin-1/2 Moment ausbilden.

6.2.2 Magnetische Korrelationen

Korrelationslänge

I.a. werden Ionen mit magnetischen Momenten in einem Festkörper mehr oder weniger stark wechselwirken. Damit werden wir uns noch ausführlich beschäftigen. Diese Wechselwirkung wird bei Ferromagneten auch oberhalb der Curie-Temperatur dazu führen, dass benachbarte Elektronen tendenziell in die selbe Richtung zeigen. Die dazugehörige charakteristische Länge nennt man die Korrelationslänge ξ . Sie spielt bei der Theorie der Phasenübergänge eine entscheidende Rolle.

Magnetische Korrelationen

Betrachten wir nochmals die Suszeptibilität χ und die typische Energie E

$$\chi \approx \frac{(m\mu_B)^2}{k_B T} \quad E \approx \frac{(m\mu_B B)^2}{k_B T}$$

eines isolierten magnetischen Momentes $m\mu_B$ in einem äusseren Feld. Wir hatten gesehen, dass $E \approx 10$ K für ein einzelnes Moment ist.

Betrachten wir nun die Anzahl $N_c = \frac{4\pi\xi^3}{3a^3}$ korrelierter Momente als eine Einheit, dann erhöht sich die charakteristische magnetische Energie dramatisch. Sei z.B. $\frac{\xi}{a} = 3$, so dass $N_c \sim 10^2$, dann erhöht sich E um einen Faktor $\sim 10^4$!

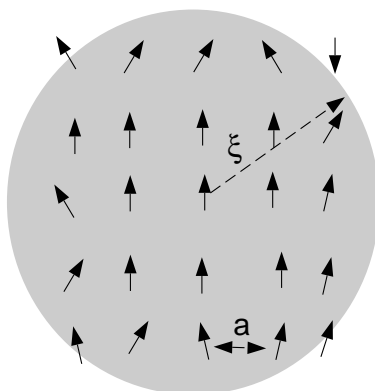


Abbildung 6.5: Die Korrelationslänge ξ charakterisiert den Durchmesser eines kleinen Volumens innerhalb dessen die magnetischen Momente tendenziell parallel ausgerichtet sind.

Austausch-Hamiltonian

Die Wechselwirkung zwischen den Elektronen ist also relevant. Für zwei Spin-1/2 Momente (vgl. die Behandlung vom Helium-Atom und vom H_2 -Molekül in de QMII) lässt sich der Austausch-Hamiltonian folgendermassen schreiben:

$$H = J \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 , \quad (6.6)$$

wobei $J = E_t - E_s$ die Austausch-Aufspaltung zwischen der Energie E_t des Triplets und der Energie E_s des Singletts ist:

$$\left\{ \begin{array}{l} |\uparrow \uparrow \rangle \\ (|\uparrow \uparrow \rangle + |\downarrow \uparrow \rangle)/\sqrt{2} \\ |\downarrow \downarrow \rangle \end{array} \right\} \quad E_t = \frac{J}{4} \quad (6.7)$$

$$\left(|\uparrow \downarrow \rangle - |\downarrow \uparrow \rangle \right) / \sqrt{2} \quad E_s = -\frac{3J}{4} \quad (6.8)$$

6.2.3 Das Austauschintegral zwischen lokalisierten Spins

Am Beispiel des Wasserstoffmoleküls wiederholen wir kurz die Berechnung des Austauschintegrals J . Die beiden Kerne seien A und B, die Elektronen 1 und 2.

Der Hamiltonian ist:

$$H = H_1 + H_2 + H_{12} \quad (6.9)$$

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r_{1A}} - \frac{e^2}{r_{1B}} \quad (6.10)$$

$$H_{12} = \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{R_{AB}} . \quad (6.11)$$

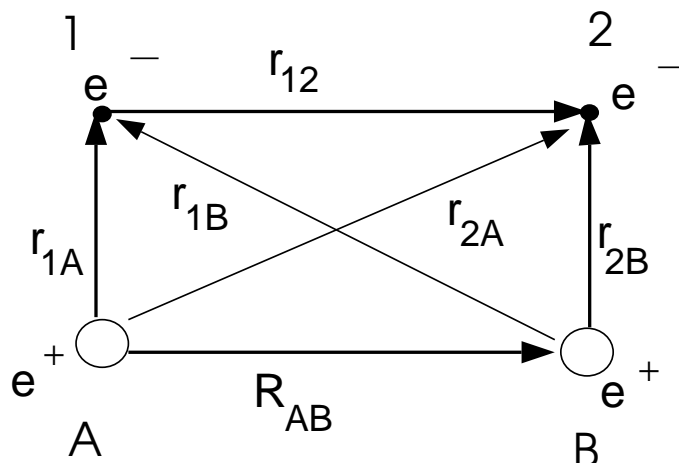


Abbildung 6.6: Geometrie des Wasserstoffmoleküls, die Elektronen sind 1 und 2, die Ionen A und B.

Molekül-Wellenfunktionen

Bezeichnen wir mit $\phi_{A/B}(1/2)$ die jeweiligen 1s-Wellenfunktionen, dann ist die nicht-wechselwirkende 2-Teilchen Wellenfunktion ψ_{12} gleich

$$\begin{aligned}\psi_{12} &= [\phi_A(1) + \phi_B(1)] [\phi_A(2) + \phi_B(2)] \otimes |Spins\rangle \\ &= [\phi_A(1)\phi_A(2) + \phi_B(1)\phi_B(2) + \phi_A(1)\phi_B(2) + \phi_A(2)\phi_B(1)] \otimes |Spins\rangle\end{aligned}\quad (6.12)$$

Da e^2/r_{12} stark ist, werden die Zustände in (6.12) mit zwei Elektronen pro Ion stark unterdrückt und können vernachlässigt werden (Heitler-London Näherung):

$$\psi_{12} = \frac{1}{2} [\phi_A(1)\phi_B(2) \pm \phi_B(1)\phi_A(2)] \otimes \begin{cases} \text{Singlett} \\ \text{Triplett} \end{cases}. \quad (6.13)$$

Die respektiven Energien sind durch $E = \langle \psi_{12} | H | \psi_{12} \rangle / \langle \psi_{12} | \psi_{12} \rangle$ gegeben. Man erhält:

$$E = \frac{\langle \psi_{12} | H | \psi_{12} \rangle}{\langle \psi_{12} | \psi_{12} \rangle} = 2E_I + \frac{e^2}{R_{AB}} + \frac{C \pm A}{1 \pm S}, \quad (6.14)$$

wobei

$$E_I = \int d^2r_1 \phi_A^*(1) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{r_{1A}} \right\} \phi_A(1) < 0 \quad (6.15)$$

die Einteilchen-Energie ist,

$$C = e^2 \int d^3r_1 d^3r_2 \left\{ \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{2A}} - \frac{1}{r_{1B}} \right\} |\phi_A(1)|^2 |\phi_B(2)|^2 \quad (6.16)$$

das Coulomb-Integral (Hartree-Term),

$$A = e^2 \int d^3r_1 d^3r_2 \left\{ \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{2A}} - \frac{1}{r_{1B}} \right\} \phi_A^*(1) \phi_A(2) \phi_B(1) \phi_B^*(2) \quad (6.17)$$

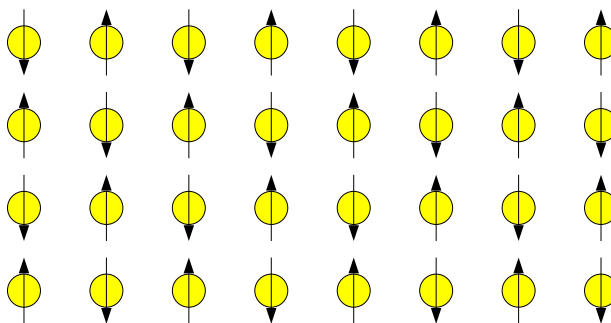


Abbildung 6.7: Antiferromagnetische Anordnung (Néel) von klassischen Spins.

das Austausch-Integral und

$$S = \int d^3r_1 d^3r_2 \phi_A^*(1) \phi_A(2) \phi_B(1) \phi_B^*(2) \quad (0 < S < 1) \quad (6.18)$$

das Überlapp-Matrixelement. Alle diese Integrale sind reel: $E_I, C, A, S \in \text{Re}$.

Heisenberg-Modell

Das Austausch-Integral J berechnet sich somit zu

$$\begin{aligned} J &= E_t - E_s = \left\{ 2E_I + \frac{e^2}{R_{AB}} + \frac{C - A}{1 - S} \right\} - \left\{ 2E_I + \frac{e^2}{R_{AB}} + \frac{C + A}{1 + S} \right\} \\ &= \frac{C - A}{1 - S} - \frac{C + A}{1 + S} \\ &= 2 \frac{SC - A}{1 - S^2} > 0, \end{aligned} \quad (6.19)$$

da $S \ll 1$ und $A < 0$ ist. Der effektive Spin-Spin Hamiltonian für zwei Ionen

$$H = 2J \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \quad (J > 0) \quad (6.20)$$

favorisiert antiparallele Spins (Antiferromagnetismus), siehe die Fig. (6.7) für eine Illustration. In der Tat sind die allermeisten magnetischen Isolatoren auch antiferromagnetisch. Sie können dann in direkter Verallgemeinerung von (6.20) mit dem antiferromagnetischen Heisenberg-Modell

$$H = 2J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (J > 0) \quad (6.21)$$

beschrieben werden.

6.2.4 Austausch-Wechselwirkung für delokalisierte Spins

Der Austauschmechanismus favorisiert Antiferromagnetismus. Der z.B. in Eisen und Nickel beobachtete metallische Ferromagnetismus muss daher andere physikalische Gründe haben. Es sind dies das Austauschloch aufgrund des Fermi-Prinzips und wieder die Coulomb-Abstoßung.

Zwei Elektronen

Wir betrachten zunächst die Paar-Wellenfunktion von zwei Elektronen mit zwei verschiedenen Wellenzahlen k_1 und k_2 in einem Volumen V ,

$$\begin{aligned}\psi_{ij} &= \frac{1}{\sqrt{2V}} \left\{ e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j} \pm e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_j} e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_i} \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2V}} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j} \left\{ 1 \pm e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \right\}\end{aligned}\quad (6.22)$$

wobei wir den Spin-Anteil der Wellenfunktion (Singlett/Triplett) unterdrückt haben. Die Wahrscheinlichkeit die Elektronen in den jeweiligen Volumina d^3r_i und d^3r_j zu finden ist

$$|\psi_{ij}|^2 d^3r_i d^3r_j = \frac{1}{V^2} \left\{ 1 \pm \cos [(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)] \right\} d^3r_i d^3r_j . \quad (6.23)$$

Gemäß dem Pauli-Prinzip verschwindet die Paaramplitude für $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j$ im Triplett-Zustand. Für $\mathbf{r}_i \approx \mathbf{r}_j$ ist die Paaramplitude reduziert, man spricht vom Austausch-Loch. Wie bei der ersten Hund'schen-Regel favorisiert die Elektron-Elektron-Abstoßung daher den Triplett Zustand, bei welchem die Spins parallel (ferromagnetisch) ausgerichtet sind.

Austausch-Loch im Fermi-See

Um den Durchmesser des Austausch-Loches in einem Metall zu bestimmen, müssen wir (6.23) über den Fermi-See mitteln:

$$P_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}) d^3r = n_{\uparrow} d^3r \underbrace{\left(1 - \cos [(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot \mathbf{r}] \right)}_{\text{Fermi-See Mittelung}}, \quad (6.24)$$

mit der Elektron-Dichte

$$n_{\uparrow} = \frac{1}{2}n = \frac{1}{2} \frac{\# \text{ Elektronen}}{\text{Volumen}} . \quad (6.25)$$

Dabei ist nun \mathbf{r} die relative Distanz. Die Berechnung ergibt:

$$\begin{aligned}\rho_{ex}(r) &= \frac{en}{2} \overline{\left(1 - \cos [(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot \mathbf{r}] \right)} \\ &= \frac{en}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{\left(\frac{4\pi}{3} k_F^3 \right)^2} \int_0^{k_F} d^3k_i d^3k_j \frac{1}{2} \left(e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot \mathbf{r}} + e^{-i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot \mathbf{r}} \right) \right\} \\ &= \frac{en}{2} \left\{ 1 - \left(\frac{4\pi}{3} k_F^3 \right)^{-2} \int_0^{k_F} d^3k_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \int_0^{k_F} d^3k_j e^{-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}} \right\} \\ &= \frac{en}{2} \left\{ 1 - 9 \frac{(\sin k_F r - k_F r \cos k_F r)^2}{(k_F r)^6} \right\} .\end{aligned}\quad (6.26)$$

Dieses Resultat gilt für parallele Spins. Für antiparallele Spins gibt es keine Austausch-Korrelationen im Ortsraum. Die effektive Gesamt-Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion ist also

$$\rho_{eff}(r) = en \left\{ 1 - \frac{9 (\sin k_F r - k_F r \cos k_F r)^2}{(k_F r)^6} \right\} . \quad (6.27)$$

Das Austausch-Loch hat also einen kleinen Radius von $\approx 1/k_F \sim a$.

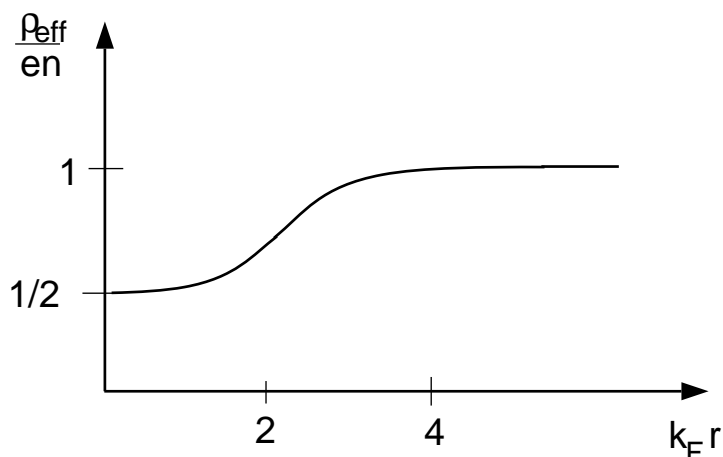


Abbildung 6.8: Die Elektron-Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion als Funktion des Abstandes in einem Metall.

6.3 Stoner-Model für Ferromagneten

Die Fourier-Transformierte des kurz-reichweitigen Austausch-Potentials (6.27) ist im wesentlichen strukturlos, kann also gut durch eine Konstante genähert werden (Stoner-Näherung). Die Up/Down-Teilchendichten führen also zu einer Erniedrigung der Einteilchen Energien für die Up/Down-Teilchen, mit

$$E_{\uparrow}(k) = E(k) - \frac{IN_{\uparrow}}{N}; \quad I \sim 1 \text{ eV} \quad (6.28)$$

und

$$E_{\downarrow}(k) = E(k) - \frac{IN_{\downarrow}}{N}, \quad (6.29)$$

wobei $I > 0$ der Stoner-Parameter ist. Er quantiziert die Energie des Austausch-Loches. Ohne Austausch wäre die Energie grösser, durch den Austausch findet also eine Energieabsenkung statt. Die relative Spin-Besetzungszahl R und Dichte des magnetischen Moments M sind

$$R = \frac{(N_{\uparrow} - N_{\downarrow})}{N}, \quad M = \mu_B \left(\frac{N}{V} \right) R. \quad (6.30)$$

$R \neq 0$ impliziert Ferromagnetismus. Wir können die Einteilchen-Energien also auch als

$$E_{\sigma}(k) = E(k) - \frac{I(N_{\uparrow} + N_{\downarrow})}{2N} - \frac{\sigma IR}{2}, \quad (\sigma = \pm) \quad (6.31)$$

$$\equiv \tilde{E}(k) - \frac{\sigma IR}{2} \quad (6.32)$$

schreiben, mit der effektiven Einteilchen-Energie $\tilde{E}(k) = E(k) - I/2$.

Selbstkonsistente Lösung

Das Fermi-Niveau E_F ist unabhängig von der Richtung der Spins der Elektronen, damit

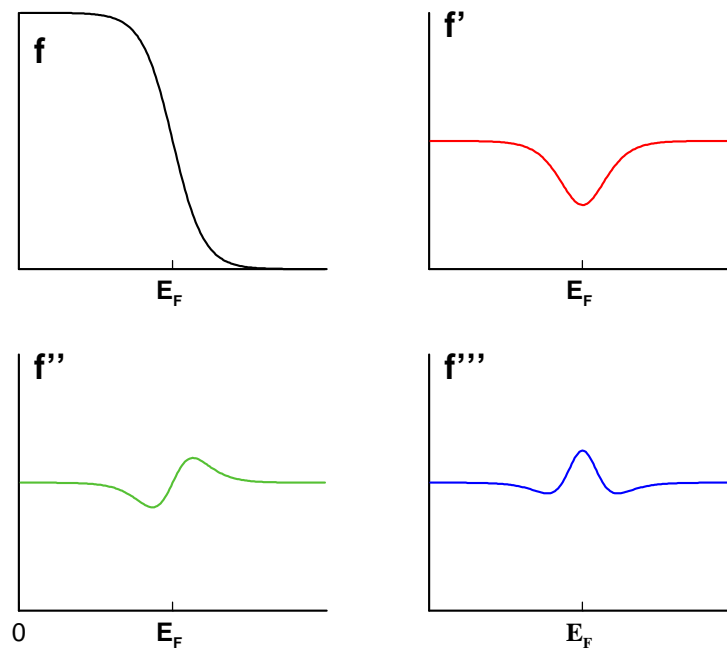


Abbildung 6.9: Die Fermi-Dirac-Funktion $f = \left(e^{\beta(E-E_F)} + 1 \right)^{-1}$ und ihre Ableitungen.

ist

$$R = \frac{1}{N} \sum_k \left\{ \frac{1}{\exp \left\{ (\tilde{E}(k) - IR/2 - E_F)/k_B T \right\} + 1} - \frac{1}{\exp \left\{ (\tilde{E}(k) + IR/2 - E_F)/k_B T \right\} + 1} \right\} \quad (6.33)$$

Für kleine R können wir die Fermi-Dirac-Verteilung f um das Femi-Niveau $\tilde{E}(k) - E_F$ entwickeln,

$$f(x-a) - f(x+a) = -2af' - \frac{2}{3!}a^3 f''' , \quad (6.34)$$

mit $x = \beta(\tilde{E}(k) - E_F)$ und $a = \beta IR/2$. Bei tiefen Temperaturen können wir den Wert der Ableitungen am Femi-Niveau $\tilde{E}(k) = E_F$ nehmen, mit $f' < 0$ und $f''' > 0$. Wir erhalten mit

$$R = -2 \frac{IR}{2} \frac{1}{N} \sum_k \left. \frac{\partial f}{\partial \tilde{E}(k)} \right|_{E_F} - \frac{2}{6} \left(\frac{IR}{2} \right)^3 \frac{1}{N} \sum_k \left. \frac{\partial^3 f}{\partial \tilde{E}^3(k)} \right|_{E_F} \quad (6.35)$$

eine quadratische Gleichung in R :

$$-1 - \frac{I}{N} \sum_k \left. \frac{\partial f}{\partial E(k)} \right|_{E_F} = \frac{1}{24} I^3 R^2 \frac{1}{N} \sum_k \left. \frac{\partial^3 f}{\partial E^3(k)} \right|_{E_F} , \quad (6.36)$$

welche ein reelle Lösung hat, falls

$$- \frac{I}{N} \sum_k \left. \frac{\partial f}{\partial E(k)} \right|_{E_F} > 1 . \quad (6.37)$$

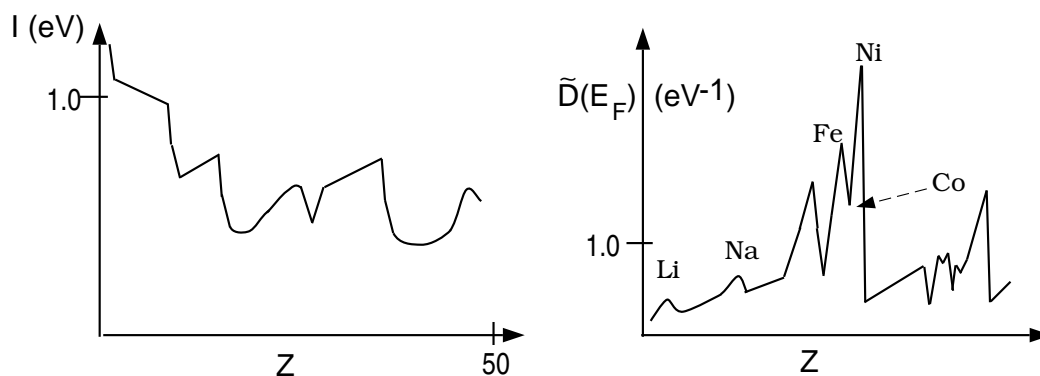


Abbildung 6.10: Zum Stoner-Kriterium: Das Austausch-Integral I und die Zustandsdichte an der Fermi Kante $\tilde{D}(E_F)$.

Für sehr hohe Temperaturen hat (6.37) keine Lösung, da für $T \rightarrow \infty$ die Ableitung der Fermifunktion gegen Null geht. Für sehr hohe Temperaturen sind alle Substanzen Paramagnete.

Stoner-Kriterium

Im Limes $T \rightarrow 0$ gilt $\left. \frac{\partial f}{\partial E(k)} \right|_{E_F} \rightarrow -\delta(\tilde{E} - E_F)$ und die linke Seite von (6.37) wird zu

$$-\frac{1}{N} \sum_k \frac{\partial f}{\partial \tilde{E}_k} = \int d\tilde{E} \frac{V}{N} D(\tilde{E}) \delta(\tilde{E} - E_F) = \frac{V}{N} D(E_F) = \tilde{D}(E_F), \quad (6.38)$$

wobei $D(E)$ die Zustandsdichte pro Spin ist (Achtung, häufig wird auch die Spin-integrierte Zustandsdichte verwendet). Die Bedingung für $T = 0$ Ferromagnetismus ist also

$$\boxed{I \tilde{D}(E_F) > 1}$$

das Stoner-Kriterium.

Experimentell zeigt sich, dass I für 3d-Übergangsmetalle nicht stark von der Kernladungszahl abhängt. Daher sind nur Metalle wie Fe, Co, & Ni mit sehr grossen Zustandsdichten an der Fermikante $\tilde{D}(E_F)$ Ferromagnete.

6.3.1 Erhöhung der Suszeptibilität χ

Auch im paramagnetischen Zustand, egal ob das System bei tiefen Temperaturen ordnet, führt der Stoner-Mechanismus zu einer Erhöhung der Suszeptibilität.

In einem äusseren magnetischen Feld sind die effektiven Einteilchen-Energien mit $gS = 1$

$$E_\sigma(k) = E(k) - \frac{IN_\sigma}{N} - \mu_B \sigma B. \quad (6.39)$$

Im paramagnetischen Zustand können wir den kubischen Term in R auf der rechten Seite von (6.35) vernachlässigen und erhalten somit

$$\begin{aligned} R &= -\frac{1}{N} \sum_k \frac{\partial f}{\partial \tilde{E}_k} (IR + 2\mu_B B) \\ &= \tilde{D}(E_F) (IR + 2\mu_B B) \end{aligned} \quad (6.40)$$

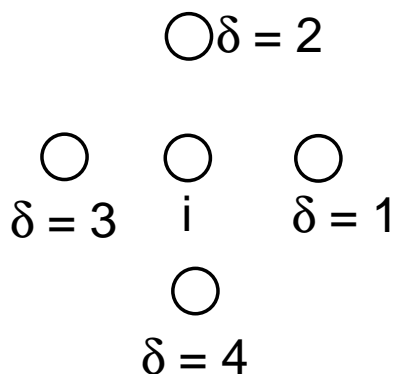


Abbildung 6.11: Terme des Heisenberg Hamiltonians $H = -\sum_{i\delta} J_{i\delta} S_i \cdot S_{i\delta} - g\mu_B B_0 \sum_i S_i$. Dabei ist i der Gitterindex und δ die $Z = 4$ Nachbarn des Gitterplatzes i .

oder, mit $M = \mu_B \frac{N}{V} R$,

$$M = 2\mu_B^2 \frac{N}{V} \frac{\tilde{D}(E_F)}{1 - I\tilde{D}(E_F)} B \quad (6.41)$$

beziehungsweise

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{\chi_0}{1 - I\tilde{D}(E_F)}, \quad (6.42)$$

mit der freien Suszeptibilität

$$\chi_0 = 2\mu_B^2 \frac{N}{V} \tilde{D}(E_F) = 2\mu_B^2 D(E_F). \quad (6.43)$$

Die Coulomb-Wechselwirkung kann also via I zu einer dramatischen Erhöhung der Suszeptibilität führen. Es ist kein Zufall, dass in (6.42) die Suszeptibilität für $I\tilde{D}(E_F) \rightarrow 1$ divergiert. Dies ist genau die Definition eines ferromagnetischen Phasenüberganges zweiter Ordnung.

6.4 Molekularfeld-Theorie

Die Stoner-Theorie ist ein Beispiel für eine Molekularfeld-Theorie. Die Wechselwirkung zwischen den konstituierenden Elementen wird durch eine effektive Dichte-Dichte-Wechselwirkung beschrieben. Den Stoner-Parameter I nennt man in diesem Zusammenhang den Kopplungsparameter. Hier betrachten wir die Molekularfeldtheorie von Gittermodellen.

6.4.1 Ferromagnetismus lokalisierter Elektronen

Auch wenn Ferromagnete mit lokalisierten Momenten eher eine Ausnahme sind, ein Beispiel ist CeSi_{2-x} , with $x > 0.2$, betrachten wir zunächst Ferromagnete auf einem Gitter

mit

$$H = \sum_{i\delta} J_{i\delta} S_i \cdot S_{i\delta} - g\mu_B B_0 \sum_i S_i . \quad (6.44)$$

Der Heisenberg-Hamiltonian (6.44) kann nur für eindimensionale Gitter mit Hilfe des Bethe-Ansatzes exakt gelöst werden.

Molekularfeld-Näherung

Wir nähern den Heisenberg-Hamiltonian als

$$H = \sum_i \left(\sum_{\delta} J_{i\delta} S_{i\delta} - g\mu_B B_0 \right) S_i \approx g\mu_B \sum_i B_{eff} S_i \quad (6.45)$$

und bezeichnen mit

$$B_{eff} = \frac{1}{g\mu_B} \left\langle \sum_{\delta} J_{i\delta} S_{i\delta} \right\rangle - B_0$$

das effektive Feld, welches der Spin S_i am Gitterplatz i fühlt.

Fall: Nächste-Nachbar-Wechselwirkung

Mit $\langle \sum_{\delta} J_{i\delta} S_{i\delta} \rangle$ bezeichnet man das interne (Molekular-) Feld, generiert durch die Nachbarplätze von i und die Näherung

$$\sum_{\delta} J_{i\delta} S_{i\delta} \rightarrow \left\langle \sum_{\delta} J_{i\delta} S_{i\delta} \right\rangle$$

als die *Molekularfeld-Näherung*.

Wir betrachten nun $J_{i\delta} \equiv J$ und bezeichnen mit Z die Anzahl nächster Nachbarn pro Gitterplatz:

$$B_{eff} = \frac{J \sum_{i\delta} \langle S_{i\delta} \rangle - g\mu_B B_0}{g\mu_B} = \frac{JZ}{g\mu_B} \langle S \rangle - B_0 \quad (6.46)$$

$$= \frac{V}{Ng^2\mu_B^2} ZJM - B_0 = B_{MF} - B_0 , \quad (6.47)$$

mit

$$M = g\mu_B \frac{N}{V} \langle S \rangle ; \quad Z = \#nn . \quad (6.48)$$

Der Heisenberg-Hamiltonian (6.45) ist in dieser Näherung äquivalent zu einem System von unabhängigen Spins in einem effektiven Magnetfeld B_{eff} .

Selbstkonsistente Lösung

Die Wahrscheinlichkeit für einen Spin i nach oben/unten ($\sigma = \pm 1$) zu zeigen ist

$$P_{\sigma} = \frac{e^{-\beta(\sigma g\mu_B B_{eff}/2)}}{e^{-\beta(g\mu_B B_{eff}/2)} + e^{-\beta(-g\mu_B B_{eff}/2)}} , \quad \sigma = \pm 1 . \quad (6.49)$$

Damit erhalten wir eine Selbstkonsistenz-Gleichung für die Magnetisierung:

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{2} g\mu_B \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{V} = -\frac{1}{2} g\mu_B \frac{N}{V} \tanh \left(\frac{\beta}{2} g\mu_B B_{eff} \right) \\ &= M_s \tanh \left(-\beta \frac{ZJV}{2g\mu_B N} M + \beta \frac{B_0}{2} g\mu_B \right) , \end{aligned}$$

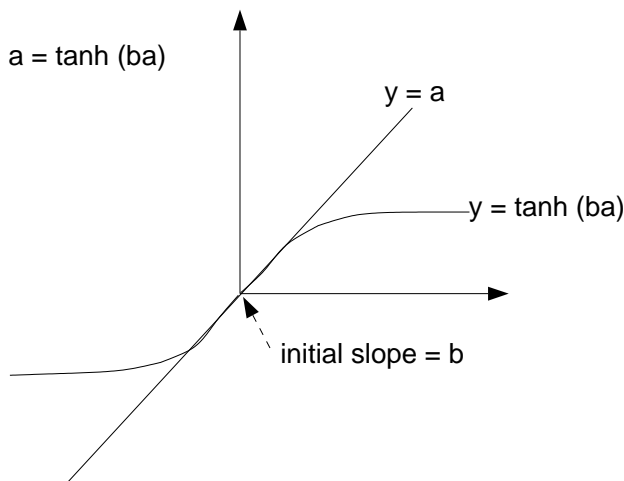


Abbildung 6.12: Die Gleichung der Form $a = \tanh(ba)$ hat eine nicht-triviale Lösung (d.h. $a \neq 0$) für $b > 1$.

d.h.

$$M = M_s \tanh \left(-\frac{\beta Z J M}{4 M_s} + \frac{\beta g \mu_B B_0}{2} \right), \quad (6.50)$$

wobei wir die Sättigungs-Magnetisierung

$$M_s = \frac{N g \mu_B}{V} \quad (6.51)$$

eingeführt haben.

Fall: Kein äusseres magnetisches Feld

Für $B_0 = 0$ finden wir schließlich

$$\boxed{\frac{M}{M_s} = \tanh \left(\frac{T_c}{T} \frac{M}{M_s} \right)} \quad T_c = \frac{Z|J|}{4k_B}. \quad (6.52)$$

Dabei hat T_c die Bedeutung der Übergangstemperatur (Curie-Temperatur) denn nur für $T < T_c$ und $J < 0$ (Ferromagnetismus) hat (6.52) eine Lösung $M > 0$.

Für $T \rightarrow 0$ geht die rechte Seite von (6.52) gegen eins $M(T=0) = M_s$.

Skalen-Verhalten

Wir betrachten (6.52) für kleine Werte des Ordnungsparameters M und benutzen die Taylor-Entwicklung $\tanh(x) = x - x^3/3 + \dots$. Damit wird (6.52) zu

$$1 = \frac{T_c}{T} - \frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{T} \right)^3 \left(\frac{M}{M_s} \right)^2, \quad (6.53)$$

$$\frac{M(T)}{M_s} \simeq \sqrt{3} \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \sqrt{1 - T/T_c} \sim \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{1/2}$$

Wir stellen fest:

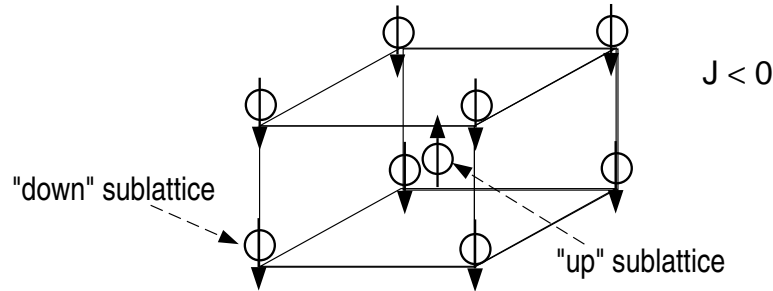


Abbildung 6.13: Antiferromagnetischer Zustand (der Néel Zustand) auf einem bcc-Gitter, zusammengesetzt aus zwei inter-penetrierenden einfach-kubischen Gittern.

- Es handelt sich um einen Phasenübergang zweiter Ordnung, da $M(T)$ kontinuierlich gegen null geht, für $T \rightarrow T_C$.
- Es gibt ein Skalenverhalten $M(T) \sim (1 - T/T_C)^\beta$ mit einem kritischen Exponenten $\beta = 1/2$. Der exakte kritische Exponent ist jedoch verschieden vom Molekularfeld-Wert $\beta = 1/2$.
- Man kann zeigen, dass die Molekularfeld-Näherung um so besser ist, je grösser die Anzahl nächster Nachbarn ist. $Z = 2, 4, 6$ in einer, zwei und drei Dimensionen.

Curie-Weiss-Gesetz

Wir linearisieren (6.50) für $T > T_c$ in $\beta = 1/(k_B T)$ und betrachten die Magnetisierung M welches das äussere Magnetfeld B_0 induziert. Wir erhalten mit

$$\frac{M}{M_s} \left(1 - \frac{T_C}{T}\right) = \frac{1}{2} \beta g \mu B_0$$

das Curie-Weiss-Gesetz

$$\chi = \frac{g\mu}{2k_B} \frac{M_s}{T - T_C} \quad M_s = \frac{N}{V} \frac{g\mu_B}{2} \quad (6.54)$$

für die Suszeptibilität $\chi = \partial M / \partial B_0$. Experimentell misst man $\chi(T)$ und trägt $1/\chi(T)$ auf. Ein positiver Interzept deutet dann auf ferromagnetische Korrelationen hin.

6.4.2 Molekularfeld-Theorie für Antiferromagnete

Antiferromagnetische Kopplungen $J > 0$ sind in Übergangsmetalloxiden, z.B. bei Oxiden von Fe, Co, Ni und Cu, sehr häufig. Zur Illustration betrachten wir ein raumzentriertes kubisches Gitter mit zwei inter-penetrierenden einfach-kubischen Gittern und $Z = 8$.

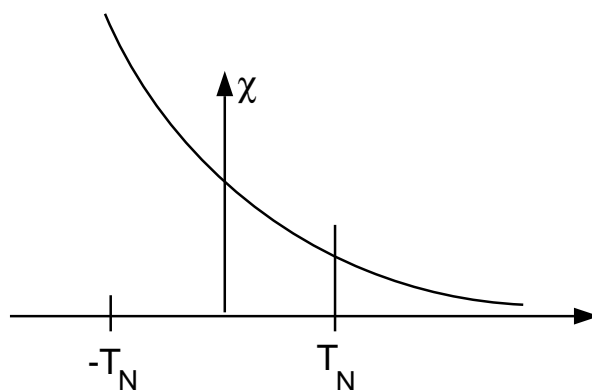


Abbildung 6.14: Sketch von $\chi = \text{Const}/(T + T_N)$, gültig nur für $T > T_N$. Die Suszeptibilität divergiert am Übergang nicht, im Gegensatz zum Ferromagneten, das ein homogenes äusseres Magnetfeld nicht an den Ordnungsparameter $M^+ - M^-$ koppelt.

Die Molekularfeldtheorie funktioniert wie beim Ferromagneten, nur dass man jetzt zwei Magnetisierungen unterscheiden muss, M^+ und M^- für die beiden separaten Untergitter:

$$M^+ = \frac{1}{2}g\mu_B \frac{N^+}{V} \tanh \left\{ \frac{g\mu_B}{2kT} \frac{(-V)}{N^-g^2\mu_B^2} ZJM^- \right\} \quad (6.55)$$

$$M^- = (+ \leftrightarrow -) \dots \quad (6.56)$$

Die Anzahl der Gitterplätze ist gleich, $N^+ = N^-$, es gilt somit $M^+ = -M^-$, aus Symmetriegründen:

$$M^+ = \frac{1}{2}g\mu_B \frac{N^+}{V} \tanh \left\{ \frac{VZJM^+}{2kTN^+g\mu_B} \right\},$$

welche nur für $J > 0$ (und genügend kleinen Temperaturen) eine nicht-triviale Lösung hat. Mit

$$M_s^+ = -M_s^- = \frac{1}{2}g\mu_B \frac{N^+}{V} \quad (6.57)$$

erhalten wir wieder

$$\frac{M^+}{M_s^+} = \tanh \left\{ \frac{T_N}{T} \frac{M^+}{M_s^+} \right\}, \quad (6.58)$$

mit der Néel-Temperatur $T_N = ZJ/(4k_B)$

Magnetische Suszeptibilität für $T > T_N$

Ein kleines Magnetfeld B_0 beeinflusst die Untergitter-Magnetisierungen:

$$\begin{aligned} M^+ + \Delta M^+ &\simeq \frac{1}{2}g\mu_B \frac{N^+}{V} \tanh \left\{ \frac{g\mu_B}{2kT} \left[B_0 - \frac{VZJ}{N^-g^2\mu_B^2} (M^- + \Delta M^-) \right] \right\} \\ M^- + \Delta M^- &\simeq (+ \leftrightarrow -) \dots \end{aligned} \quad (6.59)$$

Wir verwenden nun $\frac{d}{dx} \tanh(x) = 1/\cosh^2(x)$ und finden

$$\Delta M = \Delta M^+ + \Delta M^- = \frac{1}{2}g\mu_B \frac{N^+}{V} \frac{g\mu_B}{2kT} \frac{2}{\cosh^2(x)} \left[B_0 - \frac{VZJ}{2N^-g^2\mu_B^2} \Delta M \right],$$

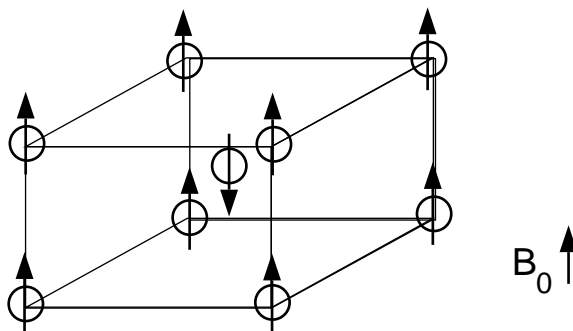


Abbildung 6.15: Ein schwaches Feld parallel zur Untergitter-Magnetisierung ändert für $T \ll T_N$ die Ausrichtung der magnetischen Momente nur geringfügig.

also

$$\Delta M = \frac{g^2 \mu_B^2 N^+ / V}{2kT \cosh^2(x)} \left[B_0 - \frac{2k_B V T_N}{N^- g^2 \mu_B^2} \Delta M \right], \quad T_N = \frac{ZJ}{4k_B}, \quad (6.60)$$

mit $x = \frac{T_N M^+}{T M_s^+}$. In der paramagnetischen Phase $T > T_N$ überhalb des Néel-Überganges existiert keine langreichweitige Ordnung: $M^+ = 0$, $N^- = N/2 = N^+$, $x = 0$ und $\cosh(0) = 1$. Daher finden wir

$$\Delta M = \frac{g^2 \mu_B^2 N}{4V k_B T} \left[B_0 - \frac{4k_B T_N V}{N g^2 \mu_B^2} \Delta M \right] = \frac{g^2 \mu_B^2 N}{4V k_B T} B_0 - \frac{T_N}{T} \Delta M, \quad (6.61)$$

bzw.

$$T \Delta M = \frac{g^2 \mu_B^2 N}{4V k_B} B_0 - \Delta M T_N, \quad \Delta M = \frac{g^2 \mu_B^2 N}{4V k_B (T + T_N)} B_0$$

und wir erhalten

$$\chi(T) = \frac{g^2 \mu_B^2 N}{4V k_B (T + T_N)}. \quad (6.62)$$

Misst man $\chi(T)$ für einen Antiferromagneten, dann deutet ein negativer Interzept von $1/\chi(T)$ auf antiferromagnetische Korrelationen hin.

Longitudinale Suszeptibilität für $T < T_N$

Unterhalb des Phasenüberganges hängt es davon ab, ob B_0 parallel oder senkrecht (longitudinal oder transversal) zur Ausrichtung der spontanen Magnetisierung angelegt wird. Für ein longitudinales Feld können wir näherungsweise $M^+(T) \approx M_s^+$ und damit $x = \frac{T_N M^+}{T M_s^+} \approx \frac{T_N}{T}$ in Eq. 6.60 setzen:

$$\chi_{\parallel} \simeq \frac{g^2 \mu_B^2 N}{4V k_B} \frac{1}{T \cosh^2\left(\frac{T_N}{T}\right) + T_N}. \quad (6.63)$$

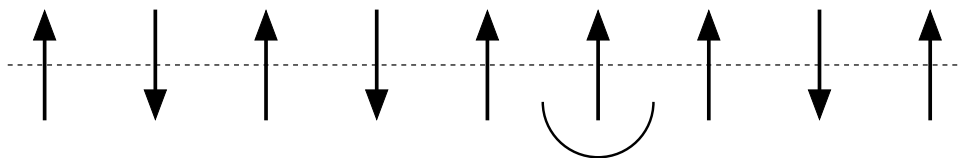


Abbildung 6.16: Eine lokale Spin-Anregung (Spin-Flip) in einem antiferromagnetischen System hat die Energie $ZJ/2$.

Für $T \ll T_N$ erhalten wir einen exponentiellen Abfall

$$\chi_{\parallel}(T) \simeq \frac{g^2 \mu_B^2 N}{16V k_B T} e^{-2\frac{T_N}{T}}, \quad (6.64)$$

mit der Energielücke von

$$2k_B T_N = \frac{Z}{2} J = Z \left(\frac{1}{4} - \frac{-1}{4} \right) J$$

des Ising-Modells.

Transversale Suszeptibilität für $T < T_N$

Wir betrachten nun für $T = 0$ den Fall, wenn B_0 senkrecht zur Magnetisierungs-Achse angelegt wird. Das Feld wird eine Rotation aller Spins um einen kleinen Winkel α bewirken. Der Rotationswinkel bestimmt sich aus der Minimierung der Gesamt-Energie ($J > 0$)

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= -\frac{1}{2} g \mu_B B_0 \sin \alpha - \frac{1}{8} Z J \cos(2\alpha) \\ &\sim -\frac{1}{2} g \mu_B B_0 \alpha - \frac{1}{8} Z J \left(1 - \frac{1}{2} (2\alpha)^2 \right). \end{aligned}$$

Im Gleichgewicht ist

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = 0 = \frac{1}{2} g \mu_B B_0 - \frac{1}{2} Z J \alpha \quad \implies \quad \alpha = \frac{g \mu_B B_0}{Z J}. \quad (6.65)$$

Die induzierte Magnetisierung parallel zum angelegten Feld ist

$$\Delta M \simeq \frac{g \mu_B}{2} \frac{N}{V} \alpha = \frac{g^2 \mu_B^2 N B_0}{2 Z J V} \quad (6.66)$$

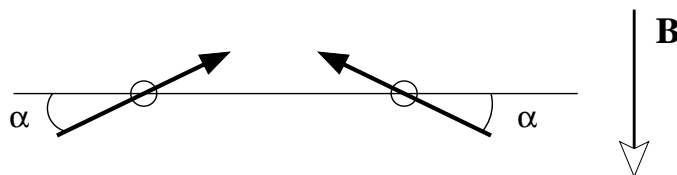


Abbildung 6.17: Für $T \ll T_N$ wird ein schwaches transversales Magnetfeld in einem Antiferromagneten eine partielle Rotation der Untergitter-Magnetisierungen bewirken.

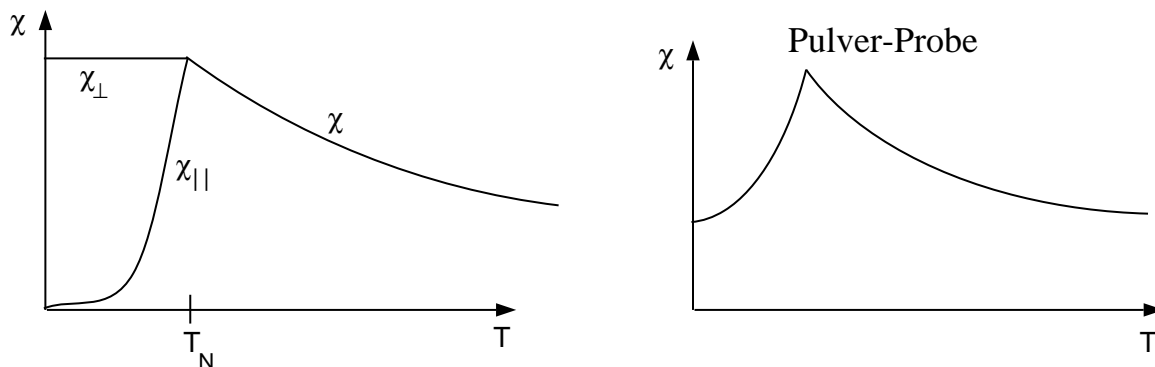


Abbildung 6.18: Unterhalb der Néel-Temperatur zeigen die transversale Suszeptibilität $\chi_{\perp}(T)$ und die longitudinale Suszeptibilität $\chi_{\parallel}(T)$ deutlich verschiedene Temperatur-Verhalten. In einer Pulverprobe misst man dementsprechend eine gemittelte Suszeptibilität.

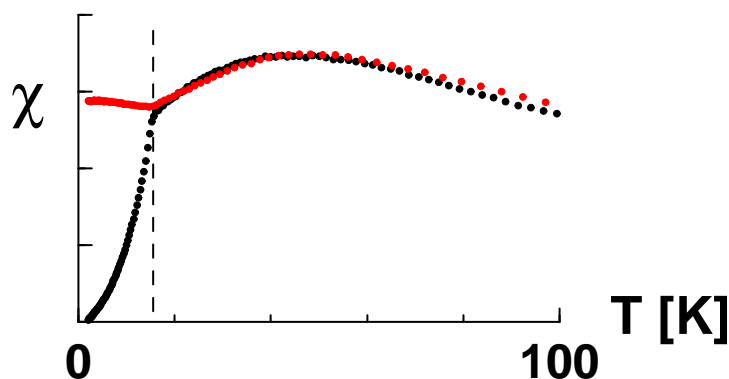


Abbildung 6.19: Gemessene Suszeptibilität des antiferromagnetischen Edelsteins Dioptase (“Der Stein der Venus”), $\text{Cu}_6\text{Si}_6\text{O}_{18} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$.

und die transversale Suszeptibilität damit

$$\chi_{\perp} = \frac{g^2 \mu_B^2 N}{2Z |J| V} \equiv \chi(T = T_N), \quad (6.67)$$

was genau mit der paramagnetischen Suszeptibilität $\chi(T = T_N)$ übereinstimmt, siehe (6.62). Die transversale Suszeptibilität ist also für $T < T_N$ konstant.

6.5 Spinwellen

Die bisher besprochene Molekularfeld-Näherung ist nicht in der Lage, niederenergetische Prozesse korrekt zu beschreiben. Die elementaren Spin-Flips $S^{\alpha} \rightarrow -S^{\alpha}$ sind aufgrund der transversalen Spin-Spin-Wechselwirkung keine elementaren Anregungen.

6.5.1 Ferromagnetische Spinwellen

Wir werden die Beschreibung der elementaren Anregungen, der Spinwellen (Magnonen) am Beispiel des ferromagnetischen Heisenberg-Modells,

$$H = J \sum_{i\delta} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+\delta} \quad (6.68)$$

eingeführen ($J < 0$). Wir unterscheiden jetzt explizit zwischen dem Spin-Vektor-Operator $\vec{S}_i = \hat{x}S_i^x + \hat{y}S_i^y + \hat{z}S_i^z$ und den einzelnen kartesischen Komponenten.

Spin-Operatoren

Wir betrachten die Spin-1/2 Zustände $|\alpha\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $|\beta\rangle = |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, so dass

$$S^z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.69)$$

und

$$S^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S^y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad S^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.70)$$

$$[S^\alpha, S^\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S^\gamma. \quad (6.71)$$

Auf- und Absteige-Operatoren

Sehr nützlich sind die Aufsteige-Operatoren S^+ und die Absteige-Operatoren S^- ,

$$S^+ = S^x + iS^y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad [S^z, S^\pm] = \pm S^{\pm} \quad (6.72)$$

$$S^- = S^x - iS^y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad [S^z, S^\pm] = 0 \quad (6.73)$$

$$S^+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad S^- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0. \quad (6.74)$$

Wir können den Heisenberg-Hamiltonian dann auch als

$$H = J \sum_{i\delta} \left\{ S_i^z S_{i+\delta}^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+\delta}^- + S_i^- S_{i+\delta}^+) \right\} \quad (6.75)$$

schreiben.

Grundzustand

Im Grundzustand sind wegen $J < 0$ alle Spins parallel ausgerichtet, o.B.d.A.

$$|0\rangle = \prod_i |\alpha\rangle_i = \prod_i |\uparrow\rangle_i. \quad (6.76)$$

$|0\rangle$ ist ein Eigenzustand von H , da

$$S_i^+ S_{i+\delta}^- |0\rangle = 0, \quad S_i^z S_{i+\delta}^z |0\rangle = \frac{1}{4} |0\rangle, \quad (6.77)$$

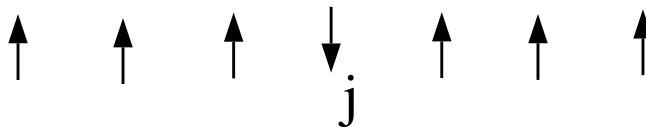


Abbildung 6.20: Eine lokale Spin-Anregung (Spin-Flip) in einem ferromagnetischen System ist kein Eigenzustand des Heisenberg-Hamiltonians.

und somit

$$H |0\rangle = -\frac{1}{4}|J|ZN |0\rangle \equiv E_0 |0\rangle , \quad (6.78)$$

wobei N die Anzahl der Spins ist und Z die Anzahl nächster Nachbarn.

Ein-Magnon-Zustand

Wir betrachten zunächst die lokale Spin-Anregung

$$|\downarrow_j\rangle = S_j^- \Pi_n |\alpha\rangle_n . \quad (6.79)$$

Dieser Zustand ist kein Eigenzustand aufgrund der Terme $S_j^+ S_{j+\delta}^-$ im Hamilton-Operator. Wären diese Terme nicht vorhanden, dann würde man vom Ising-Modell sprechen. Diese Terme propagieren den Spin-Flip zu nächste-Nachbarn-Plätze.

Ein Ein-Magnon-Eigenzustand des ferromagnetischen Heisenberg-Modells ist dagegen der ebenen-Wellen-Zustand

$$|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} |\downarrow_j\rangle . \quad (6.80)$$

aus geflippten Spins:

$$H |\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} \left\{ -\frac{1}{4}Z|J|N |\downarrow_j\rangle + \frac{2}{2}Z|J| |\downarrow_j\rangle - \frac{1}{2}|J| \sum_\delta (|\downarrow_{j+\delta}\rangle + |\downarrow_{j-\delta}\rangle) \right\} .$$

Wir schreiben die letzten beiden Terme als

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} |\downarrow_{j+\delta}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_\delta)} |\downarrow_m\rangle , \quad (6.81)$$

mit

$$\mathbf{r}_{j+\delta} = \mathbf{r}_j + \mathbf{r}_\delta = \mathbf{r}_m . \quad (6.82)$$

Wir erhalten

$$H |\mathbf{k}\rangle = \left\{ -\frac{1}{4}Z|J|N + Z|J| - \frac{1}{2}|J| \sum_\delta (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_\delta} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_\delta}) \right\} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} |\downarrow_j\rangle . \quad (6.83)$$

Also ist $|\mathbf{k}\rangle$ ein Eigenzustand von H mit der Anregungsenergie

$$E_k = E_0 + |J|Z \left\{ 1 - \frac{1}{Z} \sum_\delta \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\delta \right\} . \quad (6.84)$$

Das Ein-Magnonen-Spektrum E_k hat keine Energielücke, $E_{k \rightarrow 0} = 0$. Dieses ist ein Spezialfall des Goldstone-Theorems, nach welchem alle Systeme mit einer gebrochenen kontinuierlichen Symmetrie lückenlose Anregungen haben, die Goldstone-Moden.

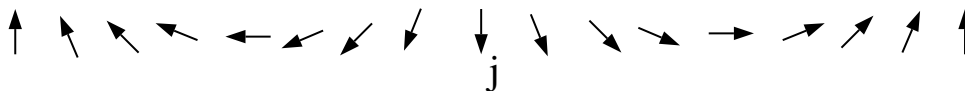


Abbildung 6.21: Eine Spinwelle wird durch die Ausbreitung eines Spin-Flips über eine grössere Region erzeugt.

S^z	3/2	1/2	-1/2	-3/2
n	0	1	2	3

Tabelle 6.1: Korrespondenz zwischen S^z und der Anzahl von Spinwellen-Anregungen pro Gitterplatz für $S = 3/2$.

6.5.2 Quantisierung ferromagnetischer Spinwellen

Betrachten wir nun ein ferromagnetisches Spin- S Heisenberg-Modell. Im Grundzustand zeigen alle Spin in eine Richtung, z.B. $|+S\rangle$. Analog zu (6.79) können wir eine Spinwelle $|\mathbf{k}\rangle$ definieren, mit

$$S^z |\mathbf{k}\rangle = (SN - 1) |\mathbf{k}\rangle, \quad S^z |0\rangle = SN |0\rangle. \quad (6.85)$$

Ein Zustand mit zwei Spinwellen hat $S^z = (SN - 2)$, etc. Da Spin-Operatoren auf verschiedenen Gitterplätzen vertauschen, werden wir nun Bose-Operatoren a^\dagger und a für die Spinwellen einführen.

Holstein-Primakoff-Transformation

Wir betrachten die folgende unitäre Transformation:

$$\boxed{\begin{aligned} S_i^z &= S - a_i^\dagger a_i \equiv S - n_i \\ S_i^+ &\propto \sqrt{2S - n_i} a_i \\ S_i^- &\propto a_i^\dagger \sqrt{2S - n_i} \end{aligned}}, \quad (6.86)$$

die sog. Holstein-Primakoff-Transformation. Dabei erfüllen die a_i^\dagger und a_i die Vertauschungs-Relationen für Bosonen:

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{i,j} \quad (6.87)$$

$$a_i |n\rangle = \sqrt{n_i} |n-1\rangle \quad (6.88)$$

$$a_i^\dagger |n\rangle = \sqrt{n_i+1} |n+1\rangle \quad (6.89)$$

Die Transformation (6.86) ist kanonisch, falls die Spin-Vertauschungs-Relationen

$$[S_i^+, S_i^-] = 2S_i^z, \quad [S_i^-, S_i^z] = 2S_i^-, \quad [S_i^+, S_i^z] = -2S_i^+ \quad (6.90)$$

erhalten bleiben. Wir betrachten z.B.

$$[S^+, S^-] |n\rangle = S^+ S^- |n\rangle - S^- S^+ |n\rangle$$

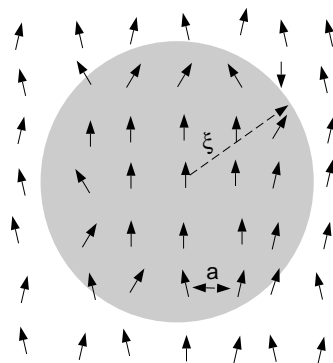


Abbildung 6.22: Spin-Fluktuationen reduzieren die Korrelationslänge ξ in der paramagnetischen Phase und das mittlere Moment $M(T)$ in der geordneten Phase.

$$\begin{aligned}
&= \sqrt{2S - a^\dagger a} (aa^\dagger) \sqrt{2S - a^\dagger a} |n\rangle - a^\dagger (2S - a^\dagger a) a |n\rangle \\
&= (2S - n)(n + 1) |n\rangle - n(2S - (n - 1)) |n\rangle \\
&= (2Sn + 2S - n^2 - n - 2Sn + n^2 - n) |n\rangle \\
&= 2(S - n) |n\rangle \equiv 2S_i^z |n\rangle .
\end{aligned} \tag{6.91}$$

Analog lässt sich nachweisen, dass auch die anderen Vertauschungs-Relationen (6.90) durch die Holstein-Primakoff-Transformation erhalten bleiben, insbesondere ist immer $n \leq 2S$.

Fourier-Transformation

Die Fourier-Transformation der neuen Bose-Operatoren,

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_k^\dagger; \quad a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_k, \tag{6.92}$$

erfüllen auch die Bose-Vertauschungs-Relationen

$$[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'}; \quad [a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger] = [a_k, a_{k'}] = 0, \tag{6.93}$$

da die Fourier-Transformation unitär ist.

1/S-Entwicklung

Die Wurzel-Ausdrücke in der Holstein-Primakoff-Darstellung (6.86) sind schwierig zu handhaben. Wir betrachten daher den Fall grosser Spin S und entwickeln

$$\begin{aligned}
S_i^+ &= \sqrt{2S - n_i} a_i \simeq \sqrt{2S} \left(1 - \frac{n_i}{4S}\right) a_i \\
&= \left\{ \sqrt{\frac{2S}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k}} - \frac{1}{\sqrt{8SN^3}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}} e^{i(\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{q}} \right\}
\end{aligned} \tag{6.94}$$

Diese Entwicklung ist für $n_i \ll 2S$ gültig, also bei tiefen Temperaturen, wenn die Anzahl der thermisch aktivierten Spin-Anregungen klein ist, oder wenn S sehr gross ist, also im klassischen Limes.

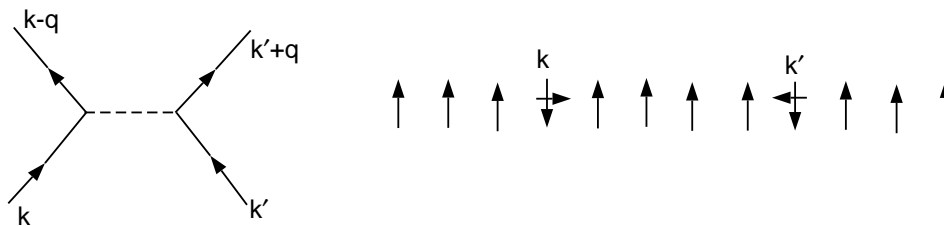


Abbildung 6.23: Der Term quartisch in den Bose-Operatoren, die nächste $1/S$ Korrektur zu (6.99), führt zu einer Streuung zwischen den Spinwellen und einer endlichen Lebenszeit.

Mit (6.94) wird die Holstein-Primakoff Darstellung (6.86) zu

$$S_i^+ \simeq \sqrt{\frac{2S}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k}} \quad (6.95)$$

$$S_i^- \simeq \sqrt{\frac{2S}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (6.96)$$

$$S_i^z = S - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'}, \quad (6.97)$$

und der Heisenberg-Hamiltonian

$$H = J \sum_{i\delta} \left\{ S_i^z S_{i+\delta}^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+\delta}^- + S_i^- S_{i+\delta}^+) \right\} \quad (6.98)$$

wird näherungsweise zu

$$\begin{aligned} H &\simeq -N|J|ZS^2 + 2|J|ZS \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \\ &\quad - 2|J|ZS \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{Z} \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_\delta} \right) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + O(a_{\mathbf{k}}^4) \\ &= E_0 + 2|J|ZS \sum_{\mathbf{k}} (1 - \gamma_{\mathbf{k}}) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + O(a_{\mathbf{k}}^4), \end{aligned} \quad (6.99)$$

mit $\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{Z} \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_\delta}$. Physikalisch ist (6.99) eine Summe von harmonischen Oszillatoren mit einer Restwechselwirkung $O(a_{\mathbf{k}}^4)$. Man spricht daher auch von Magnonen mit der Dispersionrelation

$$\boxed{\hbar\omega_{\mathbf{k}} = 2|J|ZS(1 - \gamma_{\mathbf{k}})}$$

6.5.3 Tief-Temperatur-Verhalten von Ferromagneten

Für kleine Temperaturen sollte im Limes $S \rightarrow \infty$ die Spinwellen-Näherung (6.99) dominieren. Wir berechnen die innere Energie

$$\langle E \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}} - 1} \approx \sum_{\mathbf{k}} \frac{2|J|ZSk^2}{e^{\beta 2|J|ZSk^2} - 1}. \quad (6.100)$$

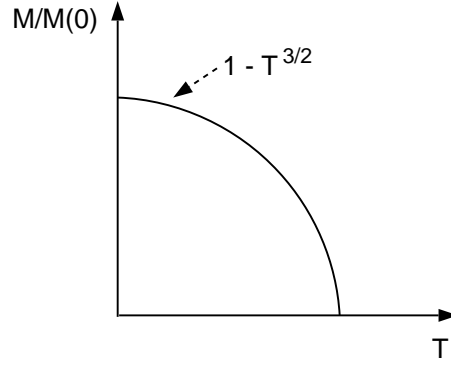


Abbildung 6.24: Die führende Reduktion des ferromagnetischen Momentes bei niedrigen Temperaturen wird mit der Spinwellen-Theorie korrekt zu $\sim T^{3/2}$ berechnet.

Für niedrige Temperaturen wird die innere Energie durch den Beitrag kleiner k dominiert, da $\hbar\omega_k = 2|J|ZS(1 - \gamma_k) \approx 2|J|Sk^2$ lückenlos ist, wegen

$$\gamma_k = \frac{2}{Z}(\cos k_x + \cos k_y + \dots) = 1 - \frac{k^2}{Z}. \quad (6.101)$$

Mit $d^3k \sim k^2 dk$ und $\alpha = 2|J|S$ ist die innere Energie

$$\langle E \rangle \sim \int_0^\infty \frac{k^4 dk}{e^{\beta\alpha k^2} - 1}. \quad (6.102)$$

Zusammen mit der Variablentransformation

$$x = \beta\alpha k^2 \quad k = \left(\frac{x}{\beta\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} \quad dk = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\beta\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} x^{-\frac{1}{2}} dx, \quad (6.103)$$

erhalten wir die Tieftemperatur-Entwicklung

$$\langle E \rangle \sim \beta^{-2} \beta^{-1/2} \int_0^\infty dx \frac{x^{3/2}}{e^x - 1} \sim T^{5/2}, \quad \boxed{C_V \sim T^{3/2}}, \quad (6.104)$$

wobei wir $C_v = \partial E / \partial T$ verwendet haben. Das gefundene Potenzgesetz $\sim T^{3/2}$ der spezifische Wärme c_V ist im Einklang mit dem Experiment.

Tieftemperatur-Verhalten der Magnetisierung

Jede einzelne Spinwelle entspricht einem Spin-Flip, die Anzahl thermisch aktivierter Magnonen ist damit äquivalent zur Reduktion

$$M(0) - M(T) = \left\langle \sum_k n_k \right\rangle \frac{g\mu_B}{V} \quad (6.105)$$

des ferromagnetischen Momentes. Eine zur Berechnung der inneren Energie analoge Rechnung ergibt

$$M(T) - M(0) \sim - \int \frac{k^2 dk}{e^{\beta\alpha k^2} - 1} \sim T^{\frac{3}{2}}, \quad (6.106)$$

also eine wesentlich stärkere Abnahme des geordneten Momentes als nach der Vorhersage $1 - 2e^{-\frac{2T_c}{T}}$ der Molekularfeld-Theorie, im Einklang mit dem Experiment.

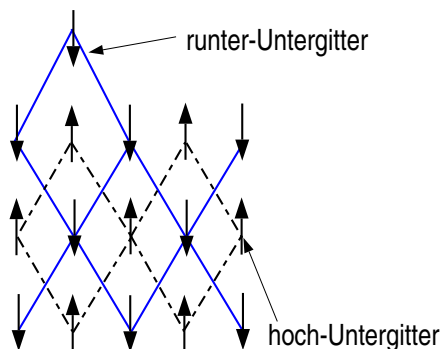


Abbildung 6.25: Darstellung einer antiferromagnetischen Anordnung von Spins durch zwei sich gegenseitig durchdringender Untergitter.

6.5.4 Antiferromagnetische Spinwellen

Im Gegensatz zum Ferromagneten ist der Grundzustand des antiferromagnetischen Heisenberg-Zustandes nicht explizit bekannt (Ausnahme: Eine Dimension, Bethe-Ansatz-Lösung). Wir müssen also zunächst mit Hilfe der Spinwellen-Theorie einen genäherten Grundzustand berechnen.

Wir unterteilen das Gitter in ein “hoch”- und ein “runter”-Untergitter und führen auf jedem Untergitter separat eine Holstein-Primakoff-Transformation durch:

$$\begin{array}{ll}
 \text{“hoch”-Untergitter} & \text{“runter”-Untergitter} \\
 S_i^z = S - n_i & S_i^z = -S + n_i \\
 S_i^+ = (S_i^-)^+ = \sqrt{2S} f_i(S) a_i & S_i^+ = (S_i^-)^+ = \sqrt{2S} a_i^\dagger f_i(S) ,
 \end{array} \quad (6.107)$$

mit der Abkürzung

$$f_i(S) = \sqrt{1 - \frac{n_i}{2S}}; \quad n_i = a_i^\dagger a_i . \quad (6.108)$$

Die Transformation (6.107) ist innerhalb des erlaubten Bereichs

$$0 \leq n_i \leq 2S \quad \iff \quad -S \leq S_z \leq S . \quad (6.109)$$

kanonisch (exakt).

Spinwellen-Näherung

Der Heisenberg-Hamiltonian

$$H = J \sum_{i\delta} \left\{ S_i^z S_{i+\delta}^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+\delta}^- + S_i^- S_{i+\delta}^+) \right\} , \quad (6.110)$$

mit $J > 0$, wird mittels (6.107) zu

$$\begin{aligned}
 H &= -JS^2NZ - J \sum_{i\delta} a_i^\dagger a_i a_{i+\delta}^\dagger a_{i+\delta} \\
 &+ JS \sum_{i\delta} \left\{ a_i^\dagger a_i + a_{i+\delta}^\dagger a_{i+\delta} + f_i(S) a_i f_{i+\delta}(S) a_{i+\delta} + a_i^\dagger f_i(S) a_{i+\delta}^\dagger f_{i+\delta}(S) \right\} .
 \end{aligned} \quad (6.111)$$

Mit der $1/S$ -Entwicklung

$$f_i(S) = \sqrt{1 - \frac{n_i}{2S}} = 1 - \frac{n_i}{4S} - \frac{n_i^2}{32S^2} - \dots \quad (6.112)$$

erhalten wird bis auf $\mathcal{O}(a^2)$

$$H \simeq -JS^2NZ + JS \sum_{i\delta} \left\{ a_i^\dagger a_i + a_{i+\delta}^\dagger a_{i+\delta} + a_i a_{i+\delta} + a_i^\dagger a_{i+\delta}^\dagger \right\} \quad (6.113)$$

Bogoliubov-Transformation

(6.113) ist quadratisch in den Bose-Operatoren und kann daher im Fourier-Raum

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ik \cdot r_i} a_k \quad (6.114)$$

mit Hilfe der Bogoliubov-Transformation

$$\begin{aligned} a_k &= \alpha_k \cosh u_k - \alpha_{-k}^\dagger \sinh u_k \\ a_k^\dagger &= \alpha_k^\dagger \cosh u_k - \alpha_{-k} \sinh u_k \end{aligned} \quad (6.115)$$

diagonalisiert werden. Diese Transformation ist unitär, die α_k also Bose-Operatoren mit

$$\begin{aligned} 1 &= [a_k, a_{k'}^\dagger] = [\alpha_k C_k - \alpha_{-k}^\dagger S_k, \alpha_{k'}^\dagger C_{k'} - \alpha_{-k'} S_{k'}] \\ &= \left\{ C_k^2 [\alpha_k, \alpha_k^\dagger] + S_k^2 [\alpha_{-k}^\dagger, \alpha_{-k}] \right\} \delta_{kk'} \\ &= \left\{ C_k^2 - S_k^2 \right\} \delta_{kk'} = \delta_{kk'} \end{aligned} \quad (6.116)$$

wobei wir mit C_k und S_k Abkürzungen für $\cosh u_k$ und $\sinh u_k$ benutzt haben.

Die Parameter u_k sind im Prinzip noch zu bestimmen, im Vorausgriff auf das Ergebnis setzen wir

$$\tanh 2u_k = \gamma_k; \quad \gamma_k = \frac{1}{Z} \sum_\delta e^{ik \cdot R_\delta} . \quad (6.117)$$

Setzen wir (6.115) in (6.113) ein, dann fallen wegen (6.117) die nicht-diagonalen Terme weg und man erhält

$$H = -JNZS(S+1) + \sum_k \hbar\omega_k \left(\alpha_k^\dagger \alpha_k + \frac{1}{2} \right) + O(a^4) , \quad (6.118)$$

mit der Dispersionsrelation $\hbar\omega_k = 2JSZ\sqrt{1 - \gamma_k^2}$.

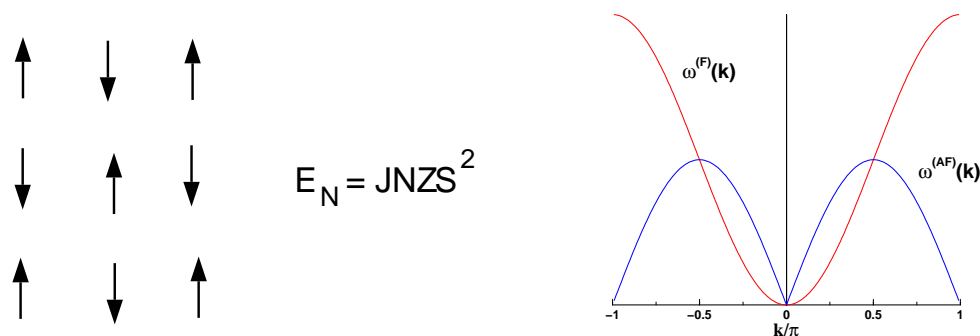


Abbildung 6.26:

Links: Der Néel ist nicht der Grundzustand des antiferromagnetischen Heisenberg-Modells, aufgrund der Nullpunkt-Fluktuationen.

Rechts: Vergleich der Magnonen-Dispersionsrelationen für Ferro- und Antiferromagnete.

Herleitung

Ein typischer Term von (6.113), proportional zu $\sim JSZ$, ist im Fourier-Raum, mit $C_k = C_{-k}$ und $S_k = S_{-k}$,

$$\begin{aligned}
 a_k^\dagger a_k + a_{-k}^\dagger a_{-k} + \gamma_k (a_k a_{-k} + a_{-k}^\dagger a_k^\dagger) &= \\
 &= (\alpha_k^\dagger C_k - \alpha_{-k} S_k) (\alpha_k C_k - \alpha_{-k}^\dagger S_k) + (\alpha_{-k}^\dagger C_k - \alpha_k S_k) (\alpha_{-k} C_k - \alpha_k^\dagger S_k) \\
 &+ \gamma_k (\alpha_k C_k - \alpha_{-k}^\dagger S_k) (\alpha_{-k} C_k - \alpha_k^\dagger S_k) + \gamma_k (\alpha_{-k}^\dagger C_k - \alpha_k S_k) (\alpha_k^\dagger C_k - \alpha_{-k} S_k) \\
 &= (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}) (C_k^2 + S_k^2 - 2\gamma_k S_k C_k) + 2 (S_k^2 - \gamma_k S_k C_k) \\
 &+ (\alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger + \alpha_{-k} \alpha_k) (-2C_k S_k + \gamma_k (C_k^2 + S_k^2)) \\
 &= (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k} + 1) (C_k^2 + S_k^2 - 2\gamma_k S_k C_k) - \underbrace{[C_k^2 - S_k^2]}_{\equiv 1},
 \end{aligned}$$

denn wegen $\cosh(2x) = \cosh^2(x) + \sinh^2(x)$ und $\sinh(2x) = 2 \cosh(x) \sinh(x)$ ist zusammen mit (6.117) $(-2C_k S_k + \gamma_k (C_k^2 + S_k^2)) = 0$. Für die Dispersionsrelation finden wir

$$\begin{aligned}
 (C_k^2 + S_k^2 - 2\gamma_k S_k C_k) &= \cosh(2u_k) - \gamma_k \sinh(2u_k) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{1 - \tanh^2(2u_k)}} - \gamma_k \frac{\tanh(2u_k)}{\sqrt{1 - \tanh^2(2u_k)}} = \sqrt{1 - \gamma_k^2},
 \end{aligned}$$

q.e.d.

Spinwellen-Geschwindigkeit

Nach (6.101) ist $\gamma_k^2 \approx 1 - 2k^2/Z$ und somit

$$\hbar\omega_k \approx (2^{3/2} JS\sqrt{Z}) k \equiv C k,$$

mit der Spinwellen-Geschwindigkeit $C = 2^{3/2} JS\sqrt{Z}$.

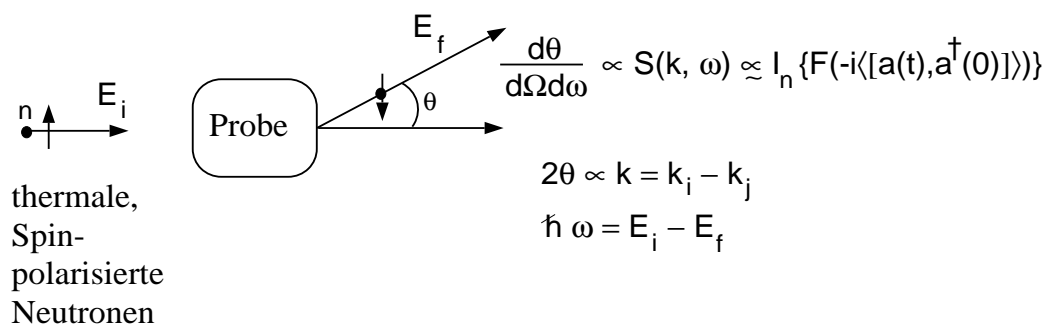


Abbildung 6.27: Polarisierte Neutronen sind sehr gut geeignet, um das magnetische Anregungsspektrum auszumessen.

Wegen der linearen Dispersionsrelation haben antiferromagnetische Magnonen auch das gleiche Potenzverhalten in der spezifischen Wärme wie die Phononen:

$$C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \sim T^3, \quad (6.119)$$

wie man leicht nachrechnen kann, analog zu (6.104).

Der Grundzustand in Spinwellen-Näherung

Im Grundzustand $|0\rangle$ gibt es keine Magnonen ($\alpha_k |0\rangle = 0, \forall k$) da $\omega_k \geq 0$. Die Grundzustandsenergie ist damit

$$E_0 = -JNZS(S+1) + JSZ \sum_k \sqrt{1 - \gamma_k^2}. \quad (6.120)$$

Ein Wegfall der Terme $\sim S_i^+ S_j^-$ im Hamiltonian würde $\gamma_k \rightarrow 0$ entsprechen, die Grundzustandsenergie $E_0 = -JNZS^2$ ($J > 0$) wäre dann die des Néel-Zustandes.

Reduktion des magnetischen Momentes

Wie beim Ferromagneten ist der Erwartungswert

$$\begin{aligned} M(0) - M &= \frac{1}{V} \sum_k \langle 0 | a_k^\dagger a_k | 0 \rangle = \frac{1}{V} \sum_k \langle 0 | (\alpha_k^\dagger C_k - \alpha_{-k} S_k) (\alpha_k C_k - \alpha_{-k}^\dagger S_k) | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{V} \sum_k S_k^2 = \frac{1}{2V} \sum_k (C_k^2 + S_k^2 + S_k^2 - C_k^2) \\ &= \frac{1}{V} \sum_k \left\{ \frac{1}{\sqrt{1 - \tanh^2(2u_k)}} - 1 \right\} = \frac{1}{V} \sum_k \left\{ \frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_k^2}} - 1 \right\} \end{aligned}$$

gleich der Reduktion des magnetischen Momentes bei $T = 0$ im geordneten Zustand, relativ zum Néel-Zustand.

Mermin-Wagner-Theorem

Wir betrachten nun das letzte Integral für d -Dimensionen, $d = 1, 2, 3$. Mit

$$\gamma_k^2 \approx 1 - 2k^2/Z, \quad \sqrt{1 - \gamma_k^2} \sim k$$

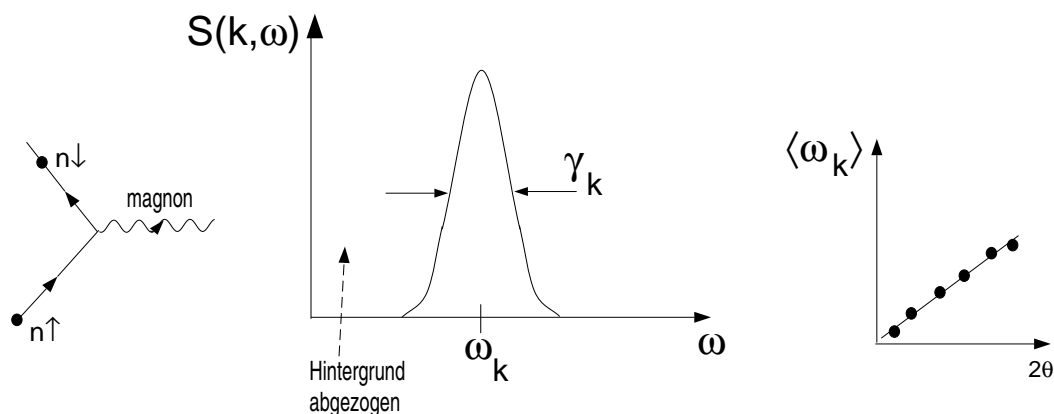


Abbildung 6.28: Sketch des magnetischen Strukturfaktors wie er mittels eines Neutronen-Streuxperiments gemessen werden kann.

erhalten wir

$$M(0) - M \sim \int \frac{k^{d-1} dk}{k}.$$

Dieses Integral divergiert in einer Dimension, $d = 1$. Die Spinwellentheorie sagt also vorher, dass Quanten-Fluktuationen den antiferromagnetisch geordneten Zustand in einer Dimension zerstört. Diese Vorhersage ist richtig. Dehnt man diese Überlegungen auch auf $T > 0$ aus, so findet man, dass für alle $T > 0$ der antiferromagnetische Zustand in $d = 2$ zerstört wird (Mermin-Wagner-Theorem).

Neutronen-Streuung

Die beste experimentelle Methode, um magnetische Anregungen auszumessen ist die inelastische Neutronenstreuung. Wenn ein Spin-polarisierter Strahl verwendet wird, dann können direkt die magnetische Anregungen von etwaigen Phononen etc. getrennt werden.

Spinwellen-Lebenszeit

Im allgemeinen wird der dynamische Strukturfaktor $S(k, \omega)$, welcher mit der Neutronenstreuung gemessen wird, eine endliche Breite Γ haben, zum Einen wegen der endlichen experimentellen Auflösung, zum anderen wegen der endlichen Lebenszeit δt der Magnonen:

$$\gamma_k \delta t \sim \hbar; \quad \delta t \sim \frac{1}{\gamma_k}. \quad (6.121)$$

In der quadratischen Approximation (6.113) ist jedoch die Lebensdauer einer Mode $\hbar\omega_k$ unendlich groß. Die höheren Terme in H , von $O(a^4)$ und höher, führen jedoch zu Streuprozessen zwischen den Magnonen und einer endlichen Lebensdauer.

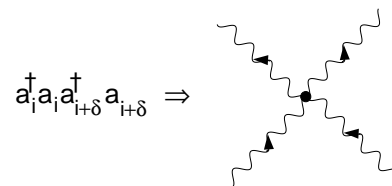


Abbildung 6.29: Ein vier-Magnonen-Vertex.