35 Weiss-sche Molekularfeld-Näherung

35 Weiss Molecular Field Approximation

35.a Weiss-sche Näherung

35.a Weiss Approximation

In dieser Näherung wird angenommen: Jedes magnetische Moment ($S = 1/2$)

In this approximation it is assumed that each magnetic moment ($S = 1/2$)

$$m = \pm\mu_{\rm B} \tag{35.1}$$

spürt ein effektives Magnetfeld (mittleres Feld, Molekularfeld)

senses an effective magnetic field (mean field, molecular field)

$$H_{\rm eff} = H + WM. \tag{35.2}$$

Dabei ist H das äußere Feld, WM ein inneres Feld auf Grund der Wechselwirkung (tatsächlich kurzreichweitig), M ist die Magnetisierung, W der Weiss-sche Faktor. Damit ergeben sich für ein magnetisches Moment die Energie-Niveaus

Here H is the external field, WM an internal field due to the interaction (actually short-range), M is the magnetization, W the Weiss factor. Then one obtains for the energy-levels

$$\epsilon_\pm = \mp\mu_{\rm B} H_{\rm eff} \tag{35.3}$$

und das mittlere magnetische Moment

for the magnetic moment and the averaged magnetic moment

$$\langle m\rangle = \mu_{\rm B}\frac{{\rm e}^{\beta\mu_{\rm B}H_{\rm eff}} - {\rm e}^{-\beta\mu_{\rm B}H_{\rm eff}}}{{\rm e}^{\beta\mu_{\rm B}H_{\rm eff}} + {\rm e}^{-\beta\mu_{\rm B}H_{\rm eff}}} = \mu_{\rm B}\tanh(\beta\mu_{\rm B}H_{\rm eff}) \tag{35.4}$$

und damit die Gleichung für die Magnetisierung (magnetisches Moment pro Volumen)

and thus the equation for the magnetization (magnetic moment per volume)

$$M = \frac{N}{V}\langle m\rangle = \frac{N}{V}\mu_{\rm B}\tanh(\beta\mu_{\rm B}(H + WM)). \tag{35.5}$$

35.b Ising-Modell

35.b Ising Model

Tatsächlich hat man es mit einer kurzreichweitigen Wechselwirkung zu tun, z.B. auf Grund des Überlapps der Elektronenwellenfunktionen

In reality the interaction is short range, e.g. due to the overlapp of the electronic wave-functions

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\sum_{r,r'} I_{r,r'}\frac{m_r m_{r'}}{\mu_{\rm B}^2} - H\sum_r m_r \tag{35.6}$$

Mit den Ising-Spins

With the Ising-spins

$$\frac{m_r}{\mu_{\rm B}} = S_r = \pm 1 \tag{35.7}$$

folgt das Ising-Modell

one obtains the Ising model

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\sum_{r,r'} I_{r,r'} S_r S_{r'} - H\mu_{\rm B}\sum_r S_r. \tag{35.8}$$

35.c Unendlich langreichweitige Wechselwirkung

Ersetzt man die Wechselwirkung durch eine unendlich langreichweitige, $I_{r,r'} = I/N$ gleich für alle Paare m_r, $m_{r'}$ (nur bei Division durch die Anzahl der Spins N ergibt sich ein vernünftiger Limes für $N \to \infty$), so folgt

35.c Infinitely long-ranged interaction

If one replaces the interaction by an infinitely long-ranged one, where $I_{r,r'} = I/N$ is equal for all pairs m_r, $m_{r'}$ (only division by the number N of spins yields a reasonable limit for $N \to \infty$), then one obtains

$$\hat{H} = -\frac{I}{2N}\sum_{r,r'} S_r S_{r'} = -\frac{I}{2N\mu_B^2}\sum_{r,r'} m_r m_{r'} = -\frac{IV^2}{2N\mu_B^2}M^2 \tag{35.9}$$

mit dem magnetischen Moment $M = \sum_r m_r/V$. Mit äußerem Feld H lautet der Hamilton-Operator $\hat{H}$

with the magnetic moment $M = \sum_r m_r/V$. With an external field H the Hamiltonian $\hat{H}$ reads

$$\hat{H} = -I\frac{V^2}{2N\mu_B^2}M^2 - HMV \tag{35.10}$$

Wie groß ist die freie Energie $F(M,T)$ ohne äußeres Feld? Daraus ergibt sich die Zustandssumme

What is the free energy $F(M,T)$ without external field? From this one obtains the partition function

$$Y = \sum_M \mathrm{e}^{-\beta F(M,T)+\beta HMV} \tag{35.11}$$

Die Magnetisierung erhält man dann durch Aufsuchen des Maximums

Then the magnetization is obtained from the maximum

$$\frac{\partial(F - HMV)}{\partial M} = 0, \tag{35.12}$$

woraus

from which one obtains

$$H = \frac{1}{V}\frac{\partial F}{\partial M} \tag{35.13}$$

folgt. Wir müssen nun F berechnen,

We have now to calculate F,

$$F(M,T) = E(M) - TS(M), \quad E(M) = -\frac{IV^2}{2N\mu_B^2}M^2. \tag{35.14}$$

Es bleibt die Entropie zu bestimmen. Dazu müssen wir bestimmen, wieviele Spin-Konfigurationen zu einer bestimmten Magnetisierung führen. Falls N_+ Spins nach oben und N_- Spins nach unten ausgerichtet sind, erhält man

There remains the determination of the entropy. Thus we have to determine how many spin configurations yield a given magnetization. If N_+ spins are up and N_- spins are down, then one obtains

$$N = N_+ + N_-, \quad MV = \mu_B(N_+ - N_-), \tag{35.15}$$

daher

and thus

$$N_\pm = \frac{1}{2}(N \pm \frac{MV}{\mu_B}) \tag{35.16}$$

Daraus ergibt sich die Entropie

From this we obtain the entropy

$$S = k_B \ln W = k_B \ln \frac{N!}{N_+!N_-!} = k_B \ln \left(\frac{N}{N_+}\right)^{N_+}\left(\frac{N}{N_-}\right)^{N_-}, \tag{35.17}$$

also

therefore

$$S(M) = -k_\mathrm{B}\left(\frac{N+\frac{MV}{\mu_\mathrm{B}}}{2}\right)\ln\left(\frac{1+\frac{MV}{N\mu_\mathrm{B}}}{2}\right) - k_\mathrm{B}\left(\frac{N-\frac{MV}{\mu_\mathrm{B}}}{2}\right)\ln\left(\frac{1-\frac{MV}{N\mu_\mathrm{B}}}{2}\right) \tag{35.18}$$

Aus $H - \frac{1}{V}\frac{\partial F}{\partial M} = 0$ folgt dann

From $H - \frac{1}{V}\frac{\partial F}{\partial M} = 0$ we obtain

$$H_\mathrm{eff} = H + \underbrace{\frac{IV}{N\mu_\mathrm{B}^2}}_{W} M = \frac{k_\mathrm{B}T}{2\mu_\mathrm{B}}\ln\frac{1+\frac{MV}{N\mu_\mathrm{B}}}{1-\frac{MV}{N\mu_\mathrm{B}}} \tag{35.19}$$

woraus dann

from which one obtains

$$M = \frac{N}{V}\mu_\mathrm{B}\tanh(\beta\mu_\mathrm{B}(H+WM)), \tag{35.20}$$

also die Weiss-sche Näherung folgt.

and thus the Weiss approximation follows.

35.d Kritisches Verhalten

Wir betrachten nun das kritische Verhalten, das heißt das Verhalten in der Nähe der Curie-Temperatur. An diesem Punkt $T = T_\mathrm{c}$, $H = 0$, verschwindet die spontane Magnetisierung. In seiner Umgebung ist die Magnetisierung klein. Wir entwickeln daher nach Potenzen von M

35.d Critical Behavior

We consider now the critical behavior, that is the behavior in the vicinity of the Curie-temperature. At this point $T = T_\mathrm{c}$, $H = 0$, the spontaneous magnetization vanishes. In its vicinity the magnetization is small. Thus we expand in powers of the magnetization

$$E = -\frac{1}{2}WVM^2, \tag{35.21}$$

$$S = k_\mathrm{B}N\ln 2 - \frac{k_\mathrm{B}N}{2}[(1+x)\ln(1+x) + (1-x)\ln(1-x)], \tag{35.22}$$

$$x = \frac{MV}{N\mu_\mathrm{B}} = \frac{M}{n\mu_\mathrm{B}}, \quad n = \frac{N}{V}, \tag{35.23}$$

$$S = k_\mathrm{B}N\ln 2 - k_\mathrm{B}N(\frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{12} + ...) \tag{35.24}$$

und erhalten daraus die freie Energie

and thus obtain the free energy

$$F = -k_\mathrm{B}TN\ln 2 + VM^2\left(-\frac{1}{2}W + \frac{k_\mathrm{B}T}{2n\mu_\mathrm{B}^2}\right) + VM^4\frac{k_\mathrm{B}T}{12n^3\mu_\mathrm{B}^4} + ... \tag{35.25}$$

mit $n = N/V$. Für Temperaturen $T > T_\mathrm{c}$ mit $k_\mathrm{B}T_\mathrm{c} = n\mu_\mathrm{B}^2 W$ liegt das Minimum der freien Energie bei $M = 0$. Dies ist die paramagnetische Phase. Wir können nun

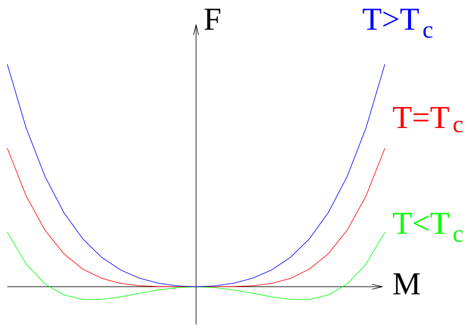
with $n = N/V$. For temperatures $T > T_\mathrm{c}$ mit $k_\mathrm{B}T_\mathrm{c} = n\mu_\mathrm{B}^2 W$ the minimum of the free energy is at $M = 0$. This is the paramagnetic phase. We may now write

$$F = F_0(T) + \frac{1}{2}a(T)VM^2 + \frac{1}{4}b(T)VM^4 + ..., \quad a(T) = a_0\cdot(T - T_\mathrm{c}), \quad b(T) \approx b(T_\mathrm{c}) = b_0 \tag{35.26}$$

schreiben.

Skizze der freien Energie

Sketch of the free energy



Wir erhalten die Zustandsgleichung aus $\frac{\partial F}{\partial M} = HV$

We obtain the equation of state from $\frac{\partial F}{\partial M} = HV$

$$a(T)M + b_0 M^3 = H \tag{35.27}$$

Dies ergibt ($H = 0$, $T < T_\mathrm{c}$) die spontane Magnetisierung

This yields ($H = 0$, $T < T_\mathrm{c}$) the spontaneous magnetization

$$M = \pm\sqrt{-\frac{a(T)}{b(T)}} \approx \sqrt{\frac{a_0}{b_0}(T_\mathrm{c} - T)} \tag{35.28}$$

Durch Ableiten der Zustandsgleichung nach dem Feld H erhalten wir die Suszeptibilität

Taking the derivative of the equation of state with respect to the field H we obtain the susceptibility

$$(a(T) + 3b(T)M^2)\underbrace{\frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}H}}_{\chi_T} = 1 \tag{35.29}$$

also

and thus

$$\chi_T = \frac{1}{a(T) + 3b(T)M^2}. \tag{35.30}$$

Bei verschwindendem äußeren Feld $H = 0$ folgt dann

At vanishing external field $H = 0$ one obtains

$$\chi(T) = \begin{cases} \frac{1}{a_0(T-T_\mathrm{c})}, & T > T_\mathrm{c}, \\ \frac{1}{a(T)-3a(T)} = \frac{1}{2a_0(T_\mathrm{c}-T)}, & T < T_\mathrm{c}. \end{cases} \tag{35.31}$$

Für $T = T_\mathrm{c}, H \neq 0$ erhält man dagegen

For $T = T_\mathrm{c}, H \neq 0$ one obtains

$$H = b_0 M^3, \quad M = \left(\frac{H}{b_0}\right)^{1/3}. \tag{35.32}$$

Die Suszeptibilität wächst dann bei Annäherung an den kritischen Punkt an wie

As one approaches the critical point the susceptibility increases like

$$\chi = \frac{1}{3b_0 M^2} = \frac{1}{3b_0}\left(\frac{H}{b_0}\right)^{-2/3}. \tag{35.33}$$

Die spezifische Wärme bei $H = 0$ ergibt sich schließlich zu

Finally for the specific heat at $H = 0$ one obtains

$$C_{H=0} = T\left.\frac{\partial S}{\partial T}\right|_{H=0} = T\left.\frac{\partial S}{\partial M^2}\frac{\partial M^2}{\partial T}\right|_{H=0} = \begin{cases} 0 & T > T_\mathrm{c}, \\ \frac{TVa_0^2}{2b_0} & T < T_\mathrm{c}. \end{cases} \tag{35.34}$$

Man findet also einen Sprung in der spezifischen Wärme.

Thus one finds a jump in the specific heat.