Fakultät für Physik
Prof. Rupert Huber, Prof. Milena Grifoni

WS 15/16

Übungen zu Integrierter Kurs II - Festkörper und Statistische Physik
Blatt 11

Übungsleiter:

Dr. Andrea Donarini (3.1.24, phone 2040) (Theorie, Thu 8:30h - 12h, Phy 2.1.29)
Dr. Christoph Lange (2.0.07, phone 5704) (Experiment, Fr 12:30h - 14:00h, Phy 2.1.29)

Part I: Theory

11.1 Mean field treatment of the Heisenberg model of ionic ferromagnets

Let us consider the Heisenberg Hamiltonian:

$$H = -2\sum_{ij} J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

where $\mathbf{S}_i$ is the spin operator for ion of site i on the lattice and J_{ij} is the strength of the interaction between the magnetic moment of the ions on sites i and j. The interaction is usually short range and, in first approximation we can truncate it so that it is non-zero only for nearest neighbors:

$$J_{ij} = \begin{cases} J_0, & \text{if } i \text{ and } j \text{ are neighbors,} \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

a) Can you guess the orientation of the spin in the equilibrium energy configuration depending on the sign of J_0 ?

b) Write the mean field Hamiltonian for the Heisenberg model using the mean field assumption

$$\langle \mathbf{S}_i \rangle = \langle S_z \rangle \mathbf{e}_z$$

where $\mathbf{e}_z$ is the vector of length 1 in the z direction. Rearrange the result in terms of the average (and uniform) magnetization:

$$\mathbf{m} = \mu_\mathrm{B}\langle S_z \rangle \mathbf{e}_z,$$

where μ_B is the Bohr magneton. Moreover, assume n as the number of neighbors for each lattice site. How does the expression change in presence of an external magnetic field B_ext oriented in the z direction?

c) Calculate the canonical partition function for the mean field Hamiltonian Z_MF in presence of a finite external magnetic field, assuming for simplicity that the ions have spin $S = 1/2$. *Hint:* Z_MF is written as:

$$Z_\mathrm{MF} = \mathrm{Tr}[\mathrm{e}^{-\beta H_\mathrm{MF}}]$$

and the trace is taken over all the possible configurations with fixed number of ions N in the system. Notice that we can use the canonical ensemble since we are dealing with a lattice theory.

d) Write the self-consistency equation for the average magnetic moment $m = |\mathbf{m}|$ in terms of minimization of the free energy. *Hint:* Recall the expression for the free energy $F = -\frac{1}{\beta}\ln Z$.

e) Express the self consistency equation in terms of the normalized magnetization m/μ_B and the parameter $b = nJ_0\beta$. For which values of b is there a ferromagnetic solution (at zero external field)? Can you calculate the critical temperature? Which is the magnetization at zero temperature?

f) Calculate the magnetic susceptibility and the specific heat for the system, both below and above the critical temperature T_c.

g) Solve numerically the self-consistency equation and make a plot of the magnetization as a function of the temperature.

Part II: Experiment

11.1 Landau-Quantisierung (Bonusaufgabe)

Betrachten Sie einen dreidimensionalen Festkörper im Magnetfeld in der Näherung quasi-freier, nicht untereinander wechselwirkender Elektronen mit der effektiven Masse m^*. Das Magnetfeld B_z sei entlang der $z-$Achse ausgerichtet.

(a) Zeigen Sie, dass der Hamilton-Operator des Systems

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left[\hat{p}_x^2 + \hat{p}_z^2 + (\hat{p}_y + eB_z x)^2\right]$$

lautet. Ersetzen Sie dazu den kanonischen Impuls $\hat{P}$ durch den kinetischen Impuls $\hat{p} + e\vec{A}$, und wählen Sie ein geeignetes Vektorpotential $\vec{A}$. (1 Punkt)

(b) Lösen Sie die Schrödingergleichung des Systems, indem Sie einen Separationsansatz benutzen. Hinweis: Überlegen Sie, welche Komponenten des Impulsoperators zeitunabhängig sind und setzen Sie $\Psi(x, y, z) = \psi(y, z) \times \chi(x)$ an. Identifizieren Sie dann die Teile der Gleichung, die den quantenmechanischen harmonischen Oszillator beschreiben (vgl. Literatur). (2 Punkte)

(c) Bestimmen Sie die Zyklotronfrequenz ω und die Energieabhängigkeit der Landau-Niveaus von ihrer Hauptquantenzahl n durch Vergleich mit der Lösung für den harmonischen Oszillator. (1 Punkt)

11.2 Freies Elektronengas im Magnetfeld

Wir betrachten das freie Elektronengas in Natrium mit einer Dichte von $n = 2.54 \times 10^{22}\,\mathrm{cm}^{-3}$ und einem Volumen von $L_x L_y L_z = 1 \times 1 \times 1\,\mathrm{cm}^3$.

(a) Berechnen Sie aus der Anzahl N der Elektronen die Anzahl Z_F der im k-Raum besetzten Zustände, den Radius k_F der Fermi-Kugel und die Anzahl Z_0 der in der Ebene $k_z = 0$ von Elektronen besetzten Zustände. (1 Punkt)

(b) Wir legen nun ein Magnetfeld $B = 1\,\mathrm{T}$ in z-Richtung an. Berechnen Sie die Anzahl der Kreise konstanter Energie $E(n, k_z = 0)$, die sich innerhalb der ursprünglichen Grenzen der Fermi-Kugel befinden, wobei n den Index des Landau-Zylinders beschreibt. Zeigen Sie, dass der Entartungsgrad p eines solchen Kreises durch

$$p = \frac{L_x L_y e B}{2\pi\hbar}$$

gegeben ist und geben Sie den Wert von p für die obengenannte Probe an. Hinweis: Die Zahl der Zustände im k-Raum bleibt beim Anlegen eines Magnetfeldes erhalten. Welchen Radius besitzen die Extremalbahnen im Ortsraum? (1 Punkt)

(c) Bestimmen Sie die Flussdichte B_0, bei welcher der innerste Landau-Zylinder $n = 0$ die ursprüngliche Fermi-Kugel verlässt. Bis zu welchem Wert $|k_z|$ sind die Zustände dieses Landau-Zylinders besetzt? Vergleichen Sie den Wert von B_0 mit technisch realisierbaren Magnetfeldern. (1 Punkt)

(d) Wie groß muss die mittlere Stoßzeit der Elektronen mindestens sein, damit de Haas-van Alphen-Oszillationen bei $B = 1\,\mathrm{T}$ gut messbar sind? (1 Punkt)

11.3 De Haas-van Alphen-Effekt

Die Messung der magnetischen Suszeptibilität $\chi = \mu_0 \partial M/\partial B$ von reinen Metallen zeigt bei tiefen Temperaturen eine oszillierende Abhängigkeit vom angelegten Magnetfeld. Die Oszillationen sind periodisch in $1/B$ und werden als de Haas-van Alphen-Effekt bezeichnet. Mit Hilfe der Beziehung

$$S_k \left(\frac{1}{B_{n+1}} - \frac{1}{B_n} \right) = \frac{2\pi e}{\hbar}$$

erlaubt die Messung des de Haas-van Alphen-Effekts die Bestimmung der Extremalflächen S_k der Fermi-Fläche, welche im k-Raum von Elektronenbahnen senkrecht zur Richtung des magnetischen Feldes umschlossen werden.

(a) Betrachten Sie das Elektronengas von Gold als ein System freier Elektronen mit der Dichte $n = 5.9 \times 10^{22}\,\mathrm{cm}^{-3}$ und schätzen Sie ab, welche Größe für die Extremalfläche der Fermi-Kugel zu erwarten ist. (1 Punkt)

(b) Im Experiment beobachten wir für ein Feld parallel zur [001]-Richtung eines Gold-Einkristalls Oszillationen mit einer Periode von $\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = B_{n+1}^{-1} - B_n^{-1} = 1.95 \times 10^{-5}\,\mathrm{T}^{-1}$. Ist das Magnetfeld dagegen parallel zur [111]-Richtung, so werden zwei sich überlagernde Oszillationen mit den Perioden $2.05 \times 10^{-5}\,\mathrm{T}^{-1}$ und $6 \times 10^{-4}\,\mathrm{T}^{-1}$ beobachtet. Berechnen Sie jeweils die Größe der dazugehörigen Extremalfläche S_k und interpretieren Sie die Ergebnisse anhand der Fermi-Fläche von Gold (siehe Abbildung). (2 Punkte)

(c) Berechnen Sie die Periode $\Delta\left(\frac{1}{B}\right)$ für Natrium im Rahmen eines freien Elektronengasmodells. Welchen Radius besitzen die Extremalbahnen im Ortsraum bei $B = 10\,\mathrm{T}$? (1 Punkt)

Quelle: T.-S. Choy et al., Bull. Am. Phys. Soc. **45**, L36 42 (2000).