

Spontane Symmetriebrechung und das Mermin–Wagner–Theorem

Ausarbeitung des Seminarvortrags im Seminar
„Anwendungen der Statistischen Physik“

Daniel Heißelmann

Technische Universität Braunschweig
Wintersemester 2004 / 2005

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Symmetrie	4
2.1	Symmetrie und Symmetriebrechung in der Physik	4
2.2	Thermodynamische Betrachtung der Symmetriebrechung am Beispiel des Para- und Ferromagneten	4
3	Das Heisenbergmodell	9
3.1	Grundlagen	9
3.2	Grundzustand und Anregung im Heisenberg-Modell	10
3.2.1	Grundzustand des Ferromagneten ($J < 0$)	10
3.2.2	Grundzustand des Antiferromagneten ($J > 0$)	10
3.2.3	Ferromagnet mit Anregung	11
4	Das Mermin–Wagner–Theorem	13
4.1	Der Beweis des Theorems	13
4.1.1	Beweis der Bogoliubov’schen Ungleichung	13
4.1.2	Abschätzung der Magnetisierung	15
4.2	Interpretation der Ungleichungen für $m_{\vec{q}}$	17
5	Zusammenfassung	19
A	Beweis von Gleichung (25)	A
B	Beweis von Gleichung (32)	B

1 Einleitung

Symmetrie und Symmetriebrechung sind in der Physik wichtige Phänomene. Zu ihrer Beschreibung gibt es eine Vielzahl von statistischen Modellen.

In dieser Ausarbeitung zum Seminarvortrag mit dem Thema „Spontane Symmetriebrechung und das Mermin–Wagner–Theorem“ soll zunächst der Begriff der Symmetrie näher erläutert werden. Anschließend wird mit dem HEISENBERG–Modell eines der statistischen Modelle zur physikalischen Beschreibung der Symmetrie und ihrer Brechung vorgestellt, um daraus das MERMIN–WAGNER–Theorem

„In einer und zwei Dimensionen gibt es keine spontane Brechung einer kontinuierlichen Symmetrie bei $T > 0$.“

abzuleiten. Der Beweis des Theorems ist an die Literatur [2], [3] und [6] gehalten.

2 Symmetrie

Der Begriff *Symmetrie* entstammt der griechischen Sprache und bedeutet dort so viel wie „Ebenmaß“. In unserem heutigen Sprachschatz verwendet man den Begriff der Symmetrie jedoch zumeist für die harmonische Anordnung mehrerer Teile zueinander. Das heißt also, dass die natürliche Intuition des Menschen große Symmetrie mit großer Ordnung assoziiert.

2.1 Symmetrie und Symmetriebrechung in der Physik

In der Physik wird große Symmetrie anders als oben beschrieben, nicht mit erhöhter Ordnung verbunden. Ein System wird physikalisch durch den zugehörigen Hamiltonoperator \mathcal{H} beschrieben. Es gilt dann als symmetrisch, wenn der Hamiltonoperator des Systems invariant bezüglich einer unitären Transformation U

$$\mathcal{H} = U^T \mathcal{H} U \quad (1)$$

ist, d.h. er ändert sich nicht, obwohl eine Transformation auf ihn angewendet wurde.

Eine solche Symmetrie gilt dann als explizit gebrochen, wenn für den Hamiltonoperator des Systems gilt, dass:

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H} - B \cdot Q, \quad (2)$$

wobei $B = \langle \tilde{B} \rangle$ ein systemspezifischer *Ordnungsparameter* und Q eine äußere Kraft ist. Der Hamiltonoperator ist nicht mehr invariant bezüglich der kontinuierlichen Transformation.

Das Maß für die Symmetriebrechung ist der Ordnungsparameter. Die Symmetrie ist spontan gebrochen, wenn

$$B = \lim_{Q \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \neq 0 \quad (3)$$

also, wenn der Ordnungsparameter von Null verschieden ist, obwohl die äußere Kraft Q verschwindet.

2.2 Thermodynamische Betrachtung der Symmetriebrechung am Beispiel des Para- und Ferromagneten

Das Phänomen der Symmetriebrechung folgt einfachen thermodynamischen Überlegungen. Durch die Brechung der Symmetrie und den Übergang in eine geordnete Phase wird die Energie des Systems verringert. Das wird deutlich,

wenn man die *freie Energie* F des Systems betrachtet [1].

$$F = U - TS \quad (4)$$

Man muss zwischen zwei Fällen unterscheiden. Wenn die Temperatur T klein wird, sieht man leicht aus Gleichung (4), dass der einzige Weg die freie Energie weiter zu vermindern, die Verringerung der inneren Energie U ist. Diese ist minimal, wenn sich das System im Grundzustand befindet. Da aber der Grundzustand zumeist ein geordneter Zustand ist, wie man am Beispiel des Ferromagneten (vgl. Abb. 2.2) sehen kann, wird die Symmetrie des Systems zugunsten einer größeren Ordnung gebrochen. Es findet also ein *Phasenübergang* von einer ungeordneten in eine geordnete Phase statt. Die Temperatur ist die ausschlaggebende Größe dieses Phasenübergangs.

Anders verhält sich das System, wenn die Temperatur groß wird. Dann kann man an Gleichung (4) sehen, dass der Term $-TS$ klein wird, also die freie Energie des Systems durch die hohe Temperatur und eine aus der Thermodynamik bekannte Erhöhung der Entropie S minimiert wird. Die innere Energie U spielt hier keine entscheidende Rolle, so dass sie nicht auf die Grundzustandsenergie abgesenkt wird und somit auch die Symmetrie des Systems nicht gebrochen wird. Man sieht, dass auch hier die Temperatur entscheidend für das Verhalten des Systems ist.

Das Maß für die Symmetrie eines Systems ist der Ordnungsparameter. Für ihn gilt: Bei unterschreiten einer kritischen Temperatur T_C – der sogenannten *CURIE-Temperatur* – nimmt er einen Wert an, der größer als Null ist. Oberhalb der kritischen Temperatur T_C verschwindet der Ordnungsparameter (vgl. Abb. 3).

$$B \begin{cases} = 0, & \text{falls } T > T_C \\ \neq 0, & \text{falls } T < T_C \end{cases} \quad (5)$$

Eine Veranschaulichung dieses Zusammenhangs am Beispiel des Ferromagneten ist in Abb. 2 zu sehen. Für $T > T_C$ hat die freie Energie an der Stelle, an der der Ordnungsparameter den Wert Null annimmt, ein Minimum. Für $T < T_C$ hat die Funktion der freien Energie in Abb. 2 jedoch zwei Minima an von Null verschiedenen Stellen.

Diese Zusammenhänge kann man sich am Beispiel eines einfachen magnetischen Systems verdeutlichen. Für einen Paramagneten ist der Hamiltonoperator von der Gestalt

$$\mathcal{H} = \sum_{ij} S_i S_j = \sum_{ij} S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z. \quad (6)$$

Er ist invariant bezüglich der Transformation U , die durch Rotation im Spinraum gegeben ist. Das ist offensichtlich, da keine der Richtungen (x,y,z) besonders ausgezeichnet ist.

Der Ordnungsparameter des Systems ist die *Magnetisierung* m , die anliegende äußere Kraft ist ein äußeres Magnetfeld h . Damit ergibt sich für den Hamiltonoperator:

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H} - h \cdot m \quad (7)$$

Ist die Symmetrie in einem solchen System gebrochen, bedeutet das, dass eine Richtung für die Spins besonders ausgezeichnet ist. Diese Richtung ist durch den sogenannten *Direktor* gegeben. Dieser entspricht dem Vektor des Ordnungsparameters \vec{m} .

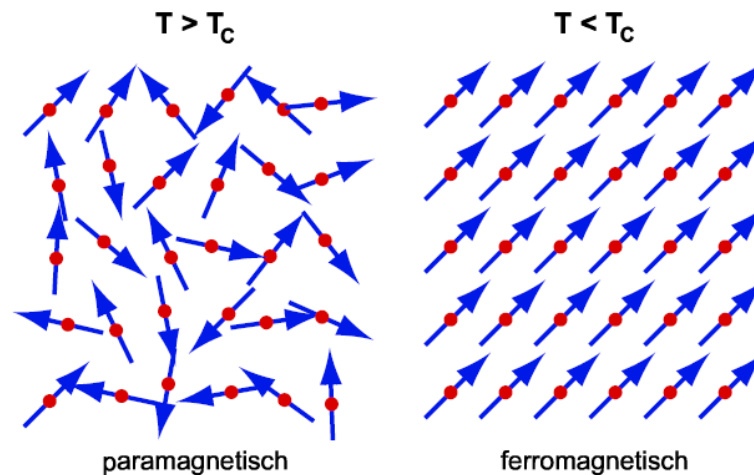


Abbildung 1: Para- und ferromagnetische Phase eines Systems [1]

Unterschreitet die Temperatur T in einem paramagnetischen Festkörper die kritische Temperatur T_C , kann ein Phasenübergang in einen ferromagnetischen Zustand stattfinden. Das System besitzt nun im Gegensatz zum paramagnetischen System, in dem die Spins vollkommen rotationsinvariant sind, eine ausgezeichnete Richtung des magnetischen Moments m . Das System kann jetzt nur noch durch Rotation um 2π oder durch Drehung um eine Achse parallel zu m in sich selbst überführt werden. Die hohe Symmetrie der paramagnetischen Phase, in der es keinerlei bevorzugte Richtung des Moments gab, wurde gebrochen und durch eine Phase größerer Ordnung ersetzt. Für den Ordnungsparameter, also in diesem Fall die Magnetisierung m ,

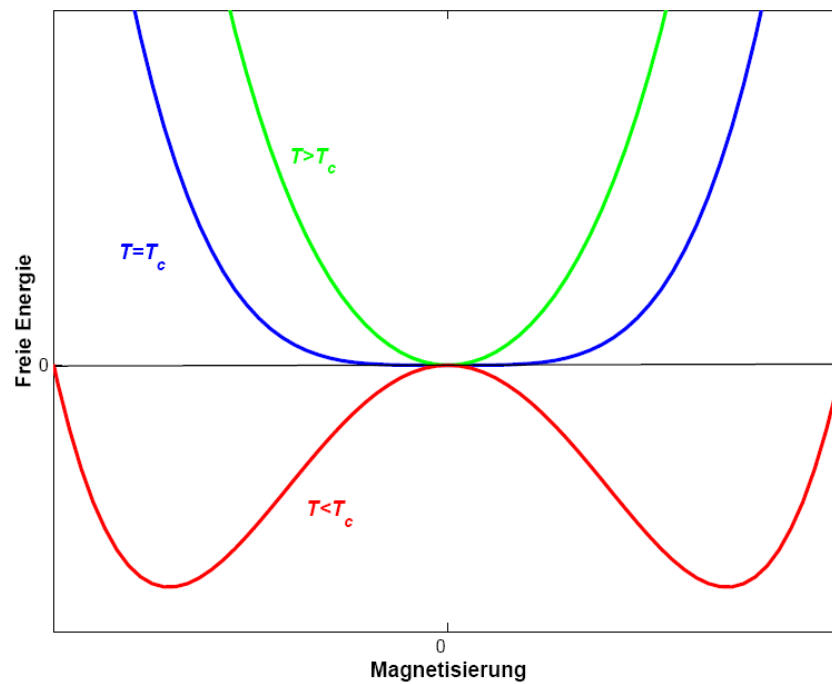


Abbildung 2: Freie Energie für $T > T_C$, $T = T_C$ und $T < T_C$ als Funktion der Magnetisierung [1]

gilt dann:

$$m \begin{cases} = 0, & \text{falls } T > T_C \\ \neq 0, & \text{falls } T < T_C \end{cases} \quad (8)$$

Daraus resultiert der typische Verlauf der Magnetisierung in Abhängigkeit von der Temperatur des Systems (vgl. Abb. 3).

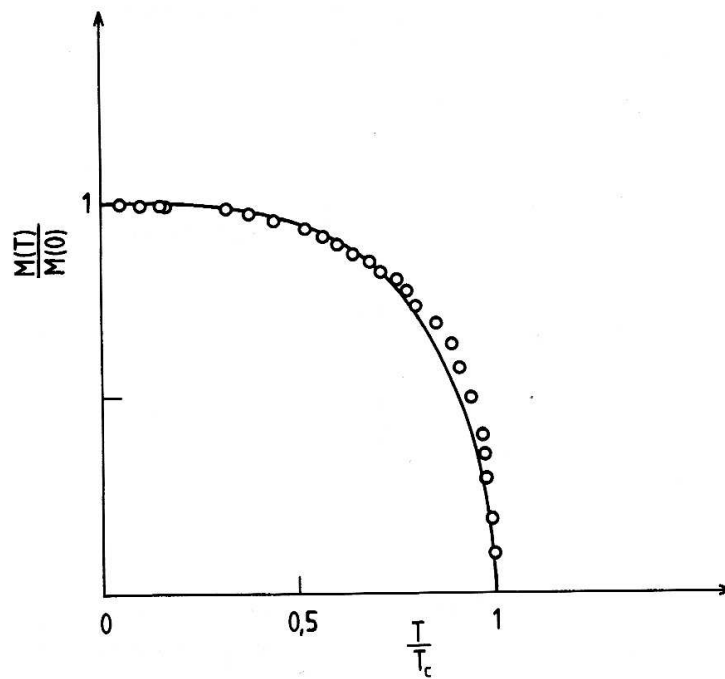


Abbildung 3: Theoretische (Kurve) und experimentell ermittelte (Punkte) Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung von Nickel [4]

3 Das Heisenbergmodell

In Kapitel 4 soll das MERMIN–WAGNER–Theorem für das HEISENBERG–Modell bewiesen werden. Deshalb ist es notwendig, sich vorher mit einigen Grundlagen des HEISENBERG–Modells vertraut zu machen.

3.1 Grundlagen

Man betrachte zwei Spins mit Indices i und j mit einer *Austauschwechselwirkung* J_{ij} im HEISENBERG–Modell. Der Hamiltonoperator lautet dann:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (9)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z, \end{aligned} \quad (10)$$

wobei gilt, dass

$$S^\pm = S^x \pm iS^y. \quad (11)$$

Zunächst soll demonstriert werden, wie die Operatoren S^z , S^+ und S^- auf einen Spin $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ mit $S = \frac{1}{2}$ wirken. Es gilt:

$$S^z |\uparrow\rangle = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle \quad (12)$$

$$S^+ |\uparrow\rangle = 0 \quad S^+ |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \quad (13)$$

$$S^- |\downarrow\rangle = 0 \quad S^- |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \quad (14)$$

Ebenso muss demonstriert werden, wie der Hamiltonoperator auf einen Zustand von mehreren Spins wirkt. Dazu kann man zunächst betrachten, wie der $S_i^z S_j^z$ -Anteil und anschließend wie der $S^\pm S^\pm$ -Anteil wirkt.

(i) $S_i^z S_j^z$ -Anteil: Wenn beispielsweise die z-Komponente an den Stellen $i = 2$ und $j = 3$ auf den Zustand $|\uparrow\uparrow\downarrow\dots\rangle$ wirkt, ergibt sich:

$$S_2^z S_3^z |\uparrow\uparrow\downarrow\dots\rangle = \frac{1}{2} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) |\uparrow\uparrow\downarrow\dots\rangle = -\frac{1}{4} |\uparrow\uparrow\downarrow\dots\rangle. \quad (15)$$

Der Operator S_2^z liefert an der Stelle 2 den Wert $+\frac{1}{2}$ zurück. Der Operator S_3^z liefert wegen des nach unten gerichteten Spins an der Stelle 3 den Wert $-\frac{1}{2}$ zurück, so dass sich ein Gesamtwert von $-\frac{1}{4}$ ergibt. Der Zustand bleibt unverändert $|\uparrow\uparrow\downarrow\dots\rangle$, $S_i^z S_j^z$ ist also diagonal in der gewählten Basis.



Abbildung 4: Ausgerichtete Spins im ferromagnetischen Grundzustand

- (ii) $S_i^- S_j^+$ -Anteil: Wenn S^- an der Stelle $i = 2$ und S^+ an der Stelle $j = 3$ auf den o.g. Zustand $|\uparrow\uparrow\downarrow \dots\rangle$ wirkt, erhält man:

$$S_2^- S_3^+ |\uparrow\uparrow\downarrow \dots\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow \dots\rangle. \quad (16)$$

Der Operator S_2^- klappt den Spin an der Stelle 2 nach unten und der Operator S_3^+ klappt den Spin an der Stelle 3 nach oben. Der Zustand des Systems wird also verändert, $S^- S^+$ bzw. $S^+ S^-$ ist demnach nicht diagonal!

Man spricht beim Umklappen der Spins auch von einem *Spinflip*.

3.2 Grundzustand und Anregung im Heisenberg-Modell

Im Folgenden soll betrachtet werden, wie das HEISENBERG-Modell für den Grundzustand von Ferro- und Antiferromagneten aussieht.

3.2.1 Grundzustand des Ferromagneten ($J < 0$)

Im Grundzustand des Ferromagneten sind alle Spins in die gleiche Richtung ausgerichtet. Die S^z -Operatoren des Hamiltonoperators belassen den Zustand des Systems unverändert. Die Operatoren $S^+ S^-$ und $S^- S^+$ liefern jeweils den Wert Null zurück, da S^+ ja auf einen Spin \uparrow wirkt (vgl. 13).

Der Zustand bleibt somit nach Anwendung von \mathcal{H} unverändert. Das heißt, der Grundzustand des ferromagnetischen Systems ist Eigenzustand des Hamiltonoperators \mathcal{H} , da

$$\mathcal{H} |\uparrow\uparrow\uparrow \dots\rangle = a |\uparrow\uparrow\uparrow \dots\rangle. \quad (17)$$

3.2.2 Grundzustand des Antiferromagneten ($J > 0$)

In der klassischen Ordnung des Antiferromagneten sind die Spins antiparallel ausgerichtet (vgl. Abb. 5(a) oben). Das heißt, dass alle gradzahligen Spins parallel zueinander und alle ungradzahligen Spins parallel zueinander stehen. Diesen Zustand nennt man *NÉEL-Zustand*.

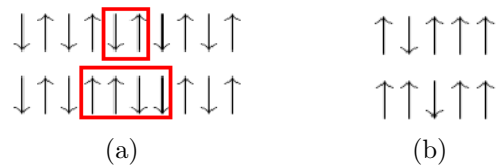


Abbildung 5: Keine Eigenzustände von \mathcal{H} : (a) NÉEL–Zustand und (b) angeregter Ferromagnet

Lässt man nun den Hamiltonoperator auf den Néel–Zustand wirken, belässt $S^z S^z$ den Zustand natürlich unverändert. $S^+ S^-$ beispielsweise klappt zunächst einen Spin nach oben, dann einen nach unten um. Der Zustand wird also verändert (vgl. Abb. 5(a)) und man erkennt, dass der NÉEL–Zustand kein Eigenzustand des Hamiltonoperators \mathcal{H} ist, weil

$$\mathcal{H}|\downarrow\uparrow\downarrow\dots\rangle = a|\uparrow\uparrow\downarrow\dots\rangle \neq a|\downarrow\uparrow\downarrow\dots\rangle. \quad (18)$$

3.2.3 Ferromagnet mit Anregung

Betrachtet man einen durch Umklappen des j -ten Spins angeregten Ferromagneten (vgl. Abb. (5(b))), so sieht man, dass der angeregte Zustand kein Eigenzustand des Hamiltonoperators \mathcal{H} ist. Einen Eigenzustand einer solchen Anregung am Beispiel einer Spinkette aus drei Spins kann man aber durch

$$|\text{Magnon}\rangle = a_1(\vec{k})|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + a_2(\vec{k})|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + a_3(\vec{k})|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \quad (19)$$

ausdrücken. Die $a_i(\vec{k})$ sind dabei die Wahrscheinlichkeiten mit denen der jeweilige Zustand auftritt, wobei \vec{k} ein Wellenvektor ist. Man betrachtet die Anregung also nicht als Umklappen eines einzelnen Spins, sondern kann sie Umklappen eines Spins verteilt auf die gesamte Spinkette interpretieren. Zwei benachbarte Spins sind also bei einer unendlich langen Spinkette infinitesimal gegeneinander verkippt. Ein anschauliches Bild eines solchen Zustands ist eine *Spinwelle*.

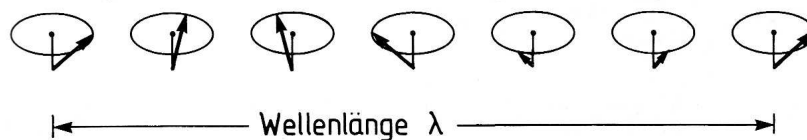


Abbildung 6: Veranschaulichung: Spinwelle [4]

Man spricht in Analogie zu *Phononen* als Quantisierungseinheit der Anregung von Gitterschwingungen im Festkörper von *Magnonen* als Quantisierungseinheit zur magnetischen Anregung. Da der Gesamtspin durch eine des Systems um einen ganzzahligen Wert verändert wird, betrachtet man ein Magnon als Boson.

Wenn der Wellenvektor \vec{k} , und damit auch die Phasendifferenz zwischen zwei Spins, gegen Null strebt, verschwindet auch die Energie die nötig ist, um einen Spin umzuklappen. Das heißt, das System kann bereits mit infinitesimalem Energieaufwand angeregt werden. Solche Anregungen nennt man *Goldstone-Moden*, spricht aber im Teilchenbild auch von *Goldstone-Bosonen*.

4 Das Mermin–Wagner–Theorem

Das Theorem von MERMIN und WAGNER [5] (1966) besagt:

„Im ein- und zweidimensionalen, isotropen Heisenbergmodell gibt es bei endlichen Temperaturen keine spontane Magnetisierung.“ [6]

Mathematisch kann es ausgedrückt werden durch

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \lim_{N \rightarrow \infty} m_{\vec{q}}(h, N) |_{T \neq 0} = 0 \quad (20)$$

Im Folgenden soll das MERMIN–WAGNER–Theorem bewiesen werden. Dazu teilt man das Problem in zwei Teilprobleme auf [2].

(i) Beweis der BOGOLIUBOV’schen Ungleichung

$$\left| \langle [C^\dagger, A^\dagger] \rangle \right|^2 \leq \frac{1}{2T} \langle A^\dagger A + A A^\dagger \rangle \langle [C^\dagger, [\mathcal{H}, C]] \rangle \quad (21)$$

(ii) Abschätzung der Magnetisierung $m_{\vec{q}}$ für das isotrope HEISENBERG–Modell.

Ziel des Beweises ist es, eine Gleichung für die Magnetisierung abzuleiten, um diese weiter zu interpretieren.

4.1 Der Beweis des Theorems

Der Hamiltonoperator \mathcal{H} des quantenmechanischen HEISENBERG–Modells lautet:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - h \vec{S}_{\vec{q}}^z, \quad (22)$$

wobei J_{ij} die in Abschnitt 3 bereits erwähnte Austauschwechselwirkung zweier Spins ist, und durch den Summanden $-h \vec{S}_{\vec{q}}^z$ ein äußeres Magnetfeld in z -Richtung beschrieben wird.

4.1.1 Beweis der Bogoliubov’schen Ungleichung

Man definiere ein Skalarprodukt (A, B) :

$$(A, B) := \frac{1}{Z} \sum'_{n,m} \langle n | A^\dagger | m \rangle \langle m | B | n \rangle \cdot \left(\frac{e^{-E_m/T} - e^{-E_n/T}}{E_n - E_m} \right) \quad (23)$$

Für den Fall $A = B$ gilt dann:

$$(A, A) = \Re\{R_{AA}(0)\} = \chi_{AA} \quad , \quad (24)$$

wobei χ_{AA} die *Suszeptibilität* des Operators A ist.

Mit der Beziehung $\tanh(x) < x$ kann man nun zeigen, dass gilt:

$$0 < \left(\frac{e^{-E_m/T} - e^{-E_n/T}}{E_n - E_m} \right) \leq \frac{1}{2T} \cdot (e^{-E_m/T} + e^{-E_n/T}) \quad (25)$$

Der Beweis dieses Teilproblems wird in Anhang A geführt.

Einsetzen von Gleichung (25) in Gleichung (23) liefert für das Skalarprodukt (A, A) :

$$(A, A) \leq \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \langle n|A^\dagger|m\rangle \langle m|A|n\rangle \cdot (e^{-E_m/T} + e^{-E_n/T}) \quad (26)$$

$$\begin{aligned} &\leq \frac{1}{Z} \sum_{m,n} e^{-E_m/T} \langle n|A^\dagger|m\rangle \langle m|A|n\rangle \\ &+ \frac{1}{Z} \sum_{m,n} e^{-E_n/T} \langle n|A^\dagger|m\rangle \langle m|A|n\rangle \end{aligned} \quad (27)$$

$$\leq \frac{1}{2} \langle A^\dagger A + A A^\dagger \rangle \quad (28)$$

Um den Beweis der BOGOLIUBOV'schen Ungleichung weiterzuführen, macht man sich nun die CAUCHY–SCHWARTZ'sche Ungleichung für Skalarprodukte

$$|(A, B)|^2 \leq (A, A)(B, B) \quad (29)$$

zunutze und erhält durch Einsetzen der Gleichung (28)

$$|(A, B)|^2 \leq \frac{1}{2} \langle A^\dagger A + A A^\dagger \rangle (B, B) \quad (30)$$

Man definiere nun einen Operator B durch

$$B \equiv [C^\dagger, \mathcal{H}] \quad (31)$$

Daraus folgt dann

$$(A, B) = \langle [C^\dagger, A^\dagger] \rangle \quad (32)$$

$$(B, B) = \langle [C^\dagger, [\mathcal{H}, C]] \rangle \quad (33)$$

Der Beweis für dieses Teilproblem wird, um an dieser Stelle die Übersichtlichkeit zu gewährleisten, in Anhang B verlegt. Es ergibt sich somit aus der Gleichung (30) die BOGOLIUBOV'sche Ungleichung.

$$\left| \langle [C^\dagger, A^\dagger] \rangle \right|^2 \leq \frac{1}{2T} \langle A^\dagger A + A A^\dagger \rangle \langle [C^\dagger, [\mathcal{H}, C]] \rangle \quad (34)$$

4.1.2 Abschätzung der Magnetisierung

Man wähle nun

$$C^\dagger = S_{\vec{k}}^x \quad , \text{ sowie } \quad A = S_{-\vec{k}-\vec{q}}^y$$

Setzt man die beiden soeben gewählten Operatoren in die rechte Seite von Gleichung (30) ein, erhält man folgenden Zusammenhang:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \langle A^\dagger A + A A^\dagger \rangle &= \frac{1}{2} \langle S_{\vec{k}+\vec{q}}^y S_{-\vec{k}-\vec{q}}^y + S_{-\vec{k}-\vec{q}}^y S_{\vec{k}+\vec{q}}^y \rangle \\ &= \langle S_{\vec{k}+\vec{q}}^y S_{-\vec{k}-\vec{q}}^y \rangle \\ &= \frac{1}{N} S^{yy} (\vec{k} + \vec{q}) \end{aligned} \quad (35)$$

Außerdem erhält man mit $m_{\vec{q}}(h) = \frac{1}{NZ} \text{Tr} \left[e^{-\mathcal{H}(h)/T} S_{\vec{q}}^z \right] S$ für die linke Seite der BOGOLIUBOV'schen Ungleichung (34)

$$\begin{aligned} \langle [C^\dagger, A^\dagger] \rangle &= \langle [S_{\vec{k}}^x, S_{-\vec{k}-\vec{q}}^y] \rangle \\ &= i \langle S_{\vec{q}}^z \rangle \\ &= i N m_{\vec{q}} \end{aligned} \quad (36)$$

Weiterhin definiere man die Funktion $F(\vec{k})$ als Doppelkommutator aus Gleichung (34).

$$F(\vec{k}) := \frac{1}{N} \langle [S_{-\vec{k}}^x, [\mathcal{H}, S_{\vec{k}}^x]] \rangle \quad (37)$$

Damit wird die BOGOLIUBOV'sche Ungleichung zu

$$m_{\vec{q}}^2 \leq \frac{1}{T} S^{yy} (\vec{k} + \vec{q}) \cdot F(\vec{k}) \quad (38)$$

Die Funktion $F(\vec{k})$ kann durch sukzessives Einsetzen des Hamiltonoperators (22) und Anwendung der Vertauschungsrelation für Spins $[S_i, S_j] = i \varepsilon_{ijk} S_k$ nach oben hin abgeschätzt werden.

$$\begin{aligned} F(\vec{k}) &= h m_{\vec{q}} + i \frac{1}{N} \sum_{ijl} e^{i\vec{k}(x_l - x_i)} J_{jl} \langle [S_i^x, (S_j^z S_l^y - S_j^y S_l^z)] \rangle \\ &= h m_{\vec{q}} + \frac{1}{N} \sum_{jl} J_{jl} \{ \cos(\vec{k}(x_j - x_l)) - 1 \} \langle S_j^y S_l^y + S_j^z S_l^z \rangle \end{aligned} \quad (39)$$

Entwickelt man nun den Kosinus in Gleichung (39) bis zur zweiten Ordnung und bildet den Absolutbetrag, erhält man folgende Abschätzung:

$$F(\vec{k}) \leq h m_{\vec{q}} + \underbrace{\left| \vec{k}^2 \right|}_{\bar{j}} \frac{1}{N} \sum_{jl} |J_{jl}| |x_j - x_l|^2 \left| \langle S_j^y S_l^y + S_j^z S_l^z \rangle \right| \quad (40)$$

Weiter kann man die Abschätzung treffen:

$$\left| \langle S_j^y S_l^y + S_j^z S_l^z \rangle \right| \leq \left| \langle S_j^x S_l^x + S_j^y S_l^y + S_j^z S_l^z \rangle \right| = \left| \langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_l \rangle \right| \quad (41)$$

$$\leq \langle \vec{S}^2 \rangle = S(S+1) \quad (42)$$

$$\leq S(S+1) \quad (43)$$

Mit diesem Ergebnis wird die Doppelkommutatorfunktion $F(\vec{k})$ weiter abgeschätzt.

$$F(\vec{k}) \leq hm_{\vec{q}} + S(S+1) \cdot |\vec{k}|^2 \cdot \bar{J} \quad (44)$$

Die Kombination mit Gleichung (38) liefert dann

$$m_{\vec{q}}^2 \leq \frac{1}{T} S^{yy}(\vec{k} + \vec{q}) \left[hm_{\vec{q}} + S(S+1) \cdot |\vec{k}|^2 \cdot \bar{J} \right] \quad (45)$$

oder auch

$$S^{yy}(\vec{k} + \vec{q}) \geq \frac{Tm_{\vec{q}}^2}{hm_{\vec{q}} + S(S+1)\bar{J}|\vec{k}|^2} \quad (46)$$

Die Summe aller $S^{yy}(\vec{k} + \vec{q})$ ist wie folgt beschränkt:

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} S^{yy}(\vec{k} + \vec{q}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \langle S_{\vec{k}+\vec{q}}^y S_{-\vec{k}-\vec{q}}^y \rangle \quad (47)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \langle \sum_i e^{i(\vec{k}+\vec{q})x_i} S_i^y \cdot \sum_j e^{-i(\vec{k}+\vec{q})x_j} S_j^y \rangle \quad (48)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i,j} \langle e^{i\vec{k}(x_i-x_j)} e^{i\vec{q}(x_i-x_j)} S_i^y S_j^y \rangle \quad (49)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i,j} \langle \delta_{x_i x_j} e^{i\vec{q}(x_i-x_j)} S_i^y S_j^y \rangle \quad (50)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_i \langle (S_i^y)^2 \rangle \quad (51)$$

$$\leq S(S+1) \quad (52)$$

Summiert man also auf beiden Seiten von Gleichung (46), benutzt das gerade gewonnene Ergebnis und geht von der Summe über zum Integral, so ergibt sich

$$S(S+1) \geq \frac{Tm_{\vec{q}}^2}{(2\pi)^d} \int_0^{\bar{k}} \frac{dk k^{d-1}}{hm_{\vec{q}} + S(S+1)\bar{J}|\vec{k}|^2}, \quad (53)$$

wobei der Faktor 2π von der Intergration der Winkelterme der Kugelkoordinaten herrührt, k^{d-1} die Funktionaldeterminante aus der Integration in d -dimensionalen Kugelkoordinaten ist.

Diese Ungleichung liefert ein allgemeines Ergebnis, dass im weiteren für festgelegte Dimensionen d betrachtet wird. Eine Integration des Ausdrucks (53) liefert uns für das eindimensionale HEISENBERG–Modell

$$S(S+1) \geq \frac{Tm_{\vec{q}}^2}{2\pi\sqrt{\bar{J}S(S+1)hm_{\vec{q}}}} \arctan \left[\bar{k}\sqrt{\bar{J}S(S+1)/hm_{\vec{q}}} \right] \quad (54)$$

Der Grenzübergang für $h \rightarrow 0$ liefert dann

$$S(S+1) \geq c \cdot \frac{Tm_{\vec{q}}^{3/2}}{\sqrt{h\bar{J}S(S+1)}} \quad (55)$$

oder

$$m_{\vec{q}} \leq c \cdot \frac{S(S+1)\bar{J}^{1/3}}{T^{2/3}} h^{1/3}, \quad (56)$$

wobei c eine numerische Konstante ist.

Für zwei Dimensionen lässt sich diese Überlegung analog anstellen. Das Ausführen der Integration in Gleichung (53) liefert dann

$$S(S+1) \geq \frac{Tm_{\vec{q}}^2}{4\pi S(S+1)\bar{J}} \ln \left(1 + \frac{\bar{J}S(S+1)\bar{k}^2}{hm_{\vec{q}}} \right) \quad (57)$$

Invertiert man diesen Ausdruck, so ergibt sich

$$m_{\vec{q}} \leq c \cdot \frac{S(S+1)\bar{J}^{1/2}}{T^{1/2}} \frac{1}{\sqrt{|\ln h|}} \quad (58)$$

4.2 Interpretation der Ungleichungen für $m_{\vec{q}}$

Man erhält also für die Magnetisierung die Abschätzung

$$m_{\vec{q}} \leq c \cdot \frac{S(S+1)\bar{J}^{1/3}}{T^{2/3}} h^{1/3}, \quad (59)$$

in einer und

$$m_{\vec{q}} \leq c \cdot \frac{S(S+1)\bar{J}^{1/2}}{T^{1/2}} \frac{1}{\sqrt{|\ln h|}} \quad (60)$$

in zwei Dimensionen.

Aus den Abschätzungen lässt sich leicht sehen, dass für ein verschwindendes äußeres Feld h und $T > 0$ auch die Magnetisierung $m_{\vec{q}}$ verschwindet.

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \lim_{N \rightarrow \infty} m_{\vec{q}} = 0 \quad (61)$$

Das gilt allerdings nur für Temperaturen $T > 0$. Wenn $T = 0$ ist, kann das MERMIN–WAGNER–Theorem zunächst keine Aussage machen.

Ebenso gilt die Aussage des Theorems nur für endliche Werte der Austauschwechselwirkung \bar{J} , also für

$$\bar{J} = \frac{1}{2N} \sum_{ij} |J_{ij}| |\vec{x}_i - \vec{x}_j|^2 < \infty, \quad (62)$$

Das heißt, das Theorem gilt nur für den Fall kurzreichweitiger Wechselwirkung, wie z. B. Nächster–Nachbar–Wechselwirkung. Eine verschwindende Magnetisierung bedeutet aber auch, dass kein spontaner Bruch der Symmetrie erfolgt. Das heißt, es findet kein Phasenübergang in ein und zwei Dimensionen statt.

Diese Erkenntnis gilt, wie das MERMIN–WAGNER–Theorem, nicht nur für das HEISENBERG–Modell, sondern allgemein, da z.B. in einer und zwei Dimensionen die Translationsinvarianz einer Schmelze nicht gebrochen werden kann und somit kein kristalliner Festkörper existiert. Ein Widerspruch zu anderen Modellen – wie beispielsweise dem Isingmodell, das für $d = 2$ einen Phasenübergang besitzt – gibt es nicht, da das Theorem für kontinuierliche Symmetrien gilt, wohingegen das ISINGmodell diskrete Symmetrie behandelt.

5 Zusammenfassung

Der Begriff Symmetrie bedeutet in der Physik die Invarianz des Hamiltonoperators \mathcal{H} bezüglich einer Transformation.

Die Messgröße für die Symmetrie eines Systems ist der Ordnungsparameter. Dieser nimmt den Wert Null an, wenn das System symmetrisch ist. Ist die Symmetrie gebrochen, ist der Wert des Ordnungsparameters von Null verschieden. Ausschlaggebend für einen spontanen Symmetriebruch ist die Temperatur. Bei unterschreiten der kritischen Temperatur (auch: CURIE-Temperatur bei Ferromagneten) T_C wird die Symmetrie zugunsten größerer Ordnung – die eine Minimierung der inneren Energie bedeutet – gebrochen. Bei spontaner Symmetriebrechung handelt es sich um einen Phasenübergang.

Mit dem MERMIN–WAGNER–Theorem konnte gezeigt werden, dass sowohl in einer, als auch in zwei Dimensionen keine spontane Symmetriebrechung stattfinden kann. Dies gilt unabhängig vom verwendeten statistischen Modell (hier: HEISENBERGmodell) für alle kontinuierlichen Symmetrien. Als Beispiel kann man zusätzlich zum Paramagneten mit den geordneten Phasen des Ferro-, bzw. Antiferromagneten auch eine Flüssigkeit mit den geordneten Phasen des kristallinen Festkörpers, sowie dem orientierten Flüssigkristall anführen. Der Ordnungsparameter ist für den kristallinen Festkörper die Dichte ρ_G und für den orientierten Flüssigkristall die Ausrichtung der Molekülachsen S .

ungeordnete Phase	geordnete Phase	Ordnungsparameter B
Paramagnet	Ferromagnet	M
Paramagnet	Antiferromagnet	Untergitter- M
Flüssigkeit	kristalliner Festkörper	ρ_G
Flüssigkeit	orientierter Flüssigkristall	$S = \langle \frac{1}{2} (3 \cos^2 \Theta - 1) \rangle$

Tabelle 1: Systeme mit ihren geordneten und ungeordneten Phasen und dem Ordnungsparameter [1]

A Beweis von Gleichung (25)

Beweisidee: $\tanh(x) < x$ (63)

Man wähle $x = \frac{E_n - E_m}{T}$ (64)

$$\begin{aligned} \Rightarrow & \frac{e^{(E_n - E_m)/T} - e^{-(E_n - E_m)/T}}{e^{(E_n - E_m)/T} + e^{-(E_n - E_m)/T}} < \frac{1}{T}(E_n - E_m) \\ \Leftrightarrow & \frac{e^{E_n/T} \cdot e^{-E_m/T} - e^{-E_n/T} \cdot e^{E_m/T}}{E_n - E_m} < \frac{1}{T} \left(e^{E_n/T} \cdot e^{-E_m/T} + e^{-E_n/T} \cdot e^{E_m/T} \right) \\ \Leftrightarrow & \frac{e^{-2E_m/T} - e^{-2E_n/T}}{E_n - E_m} < \frac{1}{T} \left(e^{-2E_n/T} + e^{-2E_m/T} \right) \end{aligned}$$

Quadratische Ergänzung und Anwendung der 3. Binomischen Formel liefert:

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow & \frac{e^{-E_m/T^2} - e^{-E_n/T^2}}{E_n - E_m} < \frac{1}{T} \left[\left(e^{-E_n/T} + e^{-E_n/T} \right)^2 - 2e^{(E_m - E_n)/T} \right] \\ \Leftrightarrow & \frac{e^{-E_m/T} - e^{-E_n/T}}{E_n - E_m} < \frac{1}{T} \left[\left(e^{-E_n/T} + e^{-E_n/T} \right) - \frac{1}{2} \left(e^{-E_m/T} + e^{-E_n/T} \right) \right] \\ \Leftrightarrow & \frac{e^{-E_m/T} - e^{-E_n/T}}{E_n - E_m} \leq \frac{1}{2T} \left[e^{-E_m/T} + e^{-E_n/T} \right] \end{aligned} \quad (65)$$

B Beweis von Gleichung (32)

$$B \equiv [C^\dagger, \mathcal{H}], \quad (66)$$

$$[C^\dagger, \mathcal{H}] = C^\dagger \mathcal{H} - \mathcal{H} C^\dagger \quad (67)$$

$$\Rightarrow \langle [C^\dagger, \mathcal{H}] \rangle = \langle C^\dagger \mathcal{H} \rangle - \langle \mathcal{H} C^\dagger \rangle \quad (68)$$

$$\begin{aligned} (A, [C^\dagger, \mathcal{H}]) &= \frac{1}{Z} \left(\sum_{m,n} \langle n | A^\dagger | m \rangle \langle m | C^\dagger \mathcal{H} | n \rangle \right. \\ &\quad \left. - \sum_{m,n} \langle n | A^\dagger | m \rangle \langle m | \mathcal{H} C^\dagger | n \rangle \right) \left(\frac{e^{-E_m/T} - e^{-E_n/T}}{E_n - E_m} \right) \\ &= \frac{1}{Z} \left(\sum_{m,n} \langle n | A^\dagger | m \rangle \langle m | C^\dagger | n \rangle E_n \right. \\ &\quad \left. - \sum_{m,n} E_m \langle n | A^\dagger | m \rangle \langle m | C^\dagger | n \rangle \right) \left(\frac{e^{-E_m/T} - e^{-E_n/T}}{E_n - E_m} \right) \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \langle n | A^\dagger | m \rangle \langle m | C^\dagger | n \rangle (e^{-E_m/T} - e^{-E_n/T}) \\ &= \frac{1}{Z} \left(\sum_{m,n} e^{-E_m/T} \langle n | A^\dagger | m \rangle \langle m | C^\dagger | n \rangle \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m,n} e^{-E_n/T} \langle n | A^\dagger | m \rangle \langle m | C^\dagger | n \rangle \right) \\ &= \frac{1}{Z} \left(- \sum_{m,n} e^{-E_m/T} \langle n | C^\dagger | m \rangle \langle m | A^\dagger | n \rangle \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m,n} e^{-E_n/T} \langle n | A^\dagger | m \rangle \langle m | C^\dagger | n \rangle \right) \\ &= \langle C^\dagger A^\dagger \rangle - \langle A^\dagger C^\dagger \rangle \\ &= \langle C^\dagger A^\dagger - A^\dagger C^\dagger \rangle \\ &= \langle [C^\dagger, A^\dagger] \rangle \end{aligned} \quad (69)$$

Der Beweis der Beziehung

$$(B, B) = ([C^\dagger, \mathcal{H}], [C^\dagger, \mathcal{H}]) = \langle [C^\dagger, [\mathcal{H}, C]] \rangle \quad (70)$$

wird analog erbracht.

Literatur

- [1] **Alff**, Lambert: *Vorlesungsskript zur Vorlesung "Grundlagen des Magnetismus"*. München: TU München, Walther–Meissner–Institut, 2004. www.wmi.badw.de/E23/lehre/skript/magnetismus/Kapitel-8.pdf
- [2] **Auerbach**, Assa: *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. New York: Springer–Verlag, 1994.
- [3] **Forster**, Dieter: *Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry, and Correlation Functions*. Reading, Massachusetts: Addison–Wesley Publishing Company, 1990.
- [4] **Ibach**, Harald; **Lüth**, Hans: *Festkörperphysik*. Berlin: Springer–Verlag, 1999.
- [5] **Mermin**, N. D.; **Wagner**, H.: *Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models*. Phys. Rev. Lett. 17: 1133–1136, 1966.
- [6] **Nolting**, Wolfgang: *Quantentheorie des Magnetismus, Teil 2: Modelle*. Stuttgart: Teubner, 1986.