



**Physik der
Kondensierten Materie 2**

Rudolf Gross

SS 2021

Teil 19

Vorlesungsstunde: 11.05.2021-1

• Kooperativer Magnetismus

- Wechselwirkung zwischen magnetischen Momenten führt zu Ordnungsstrukturen
- entscheidende WW: (i) quantenmechanische Austausch-WW (Heisenberg, Dirac: 1926)
 → *Minimierung der Coulomb-WW unter Berücksichtigung von Pauli-Prinzip*
- (ii) Dipol-Dipol-WW ist von Größenordnung 0.1 meV (~ 1K) → spielt meist keine Rolle

• Austauschwechselwirkung zwischen lokalisierten magnetischen Momenten

i. Heisenberg-Modell:

Wechselwirkung kann durch effektiven Hamilton-Operator beschrieben, der nur auf Spin-Funktion wirkt und richtige Energieabsenkung liefert (nur Paar-Wechselwirkungen)

$$\mathcal{H}_A = - \sum_{j \neq i, i > j} \frac{J_A(r_{ij})}{\hbar^2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

$J_A > 0$: ferromagnetische Kopplung
 $J_A < 0$: antiferromagnetische Kopplung

oft ist Summation über z nächste Nachbarn mit gleichem r_{ij} ausreichend:

$$\mathcal{H}_{A,i} = - \frac{J_A}{\hbar^2} \sum_{j=1}^z \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

WW von i -tem Moment mit seinen z nächsten Nachbarn

ii. Hubbard-Modell:

$$\mathcal{H}_{\text{Hubbard}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + \sum_i U n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}$$

Summation über nächste Nachbarn

Spin: $\sigma = \uparrow, \downarrow$

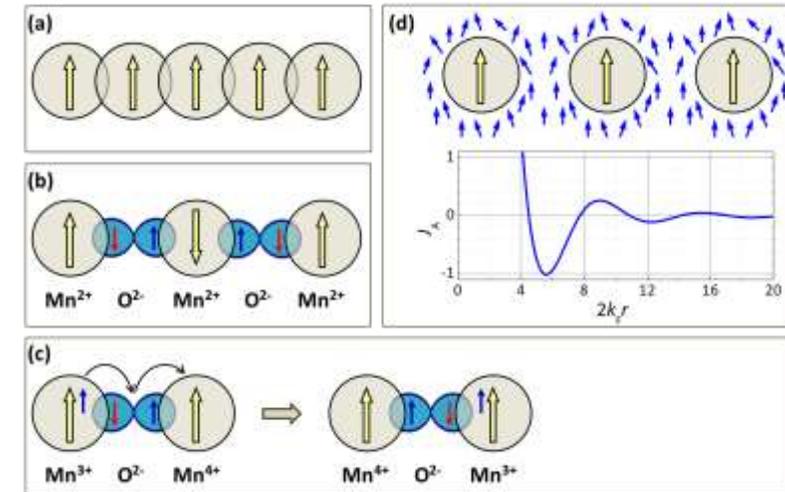
Hüpfen zwischen Nachbarplätzen, Hüpfamplitude t

Coulomb-Energie für Mehrfachbesetzung eines Gitterplatzes

• Austauschwechselwirkung zwischen lokalisierten magnetischen Momenten

Austausch-Wechselwirkungsarten:

- (a) direkte Austausch-WW
- (b) Superaustausch
- (c) Doppelaustausch
- (d) RKKY-Wechselwirkung



• Dzyaloshinskii-Moriya Wechselwirkung

- es gibt Spin-Spin-Wechselwirkungen, die von höherer Ordnung sind oder eine kompliziertere Form haben
- Beispiel: **Dzyaloshinskii-Moriya Wechselwirkung** - tritt nur bei gebrochener Inversionssymmetrie auf, Ursache ist Spin-Bahn-WW

$$\mathcal{H}_{DM} = \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) \quad \text{resultiert in Verkippung von Spins aus kollinearer Anordnung}$$

• Spin-Bahn-Kopplung

klassische Betrachtung: im Ruhesystem des Elektrons erzeugt der um dieses umlaufende Kern mit Ladung Ze einen Kreisstrom I und damit ein Magnetfeld B_{orb}

$$\mathbf{B}_{orb} = \frac{\mu_0 \mu_{\ell}}{2\pi r^3} = \frac{\mu_0 Ze}{4\pi m_e r^3} \boldsymbol{\ell} \quad \Rightarrow \quad \mathcal{H}_{so} = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_{orb} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2 r^3} \boldsymbol{\ell} \cdot \mathbf{s} = \lambda \boldsymbol{\ell} \cdot \mathbf{s} \quad \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \propto Z^3 \Rightarrow E_{so} \propto Z^4$$

• Zeeman-Wechselwirkung

$$\mathcal{H}_{Zeeman} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_{ext}$$

$$(i) \mathcal{H}_{Zeeman} \gg \mathcal{H}_{so}: \mathcal{H}_{Zeeman} = g_L \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B}_{ext} + g_S \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}_{ext}$$

$$(ii) \mathcal{H}_{Zeeman} \ll \mathcal{H}_{so}: \mathcal{H}_{Zeeman} = g_J \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{J} \cdot \mathbf{B}_{ext}$$

Kapitel 12

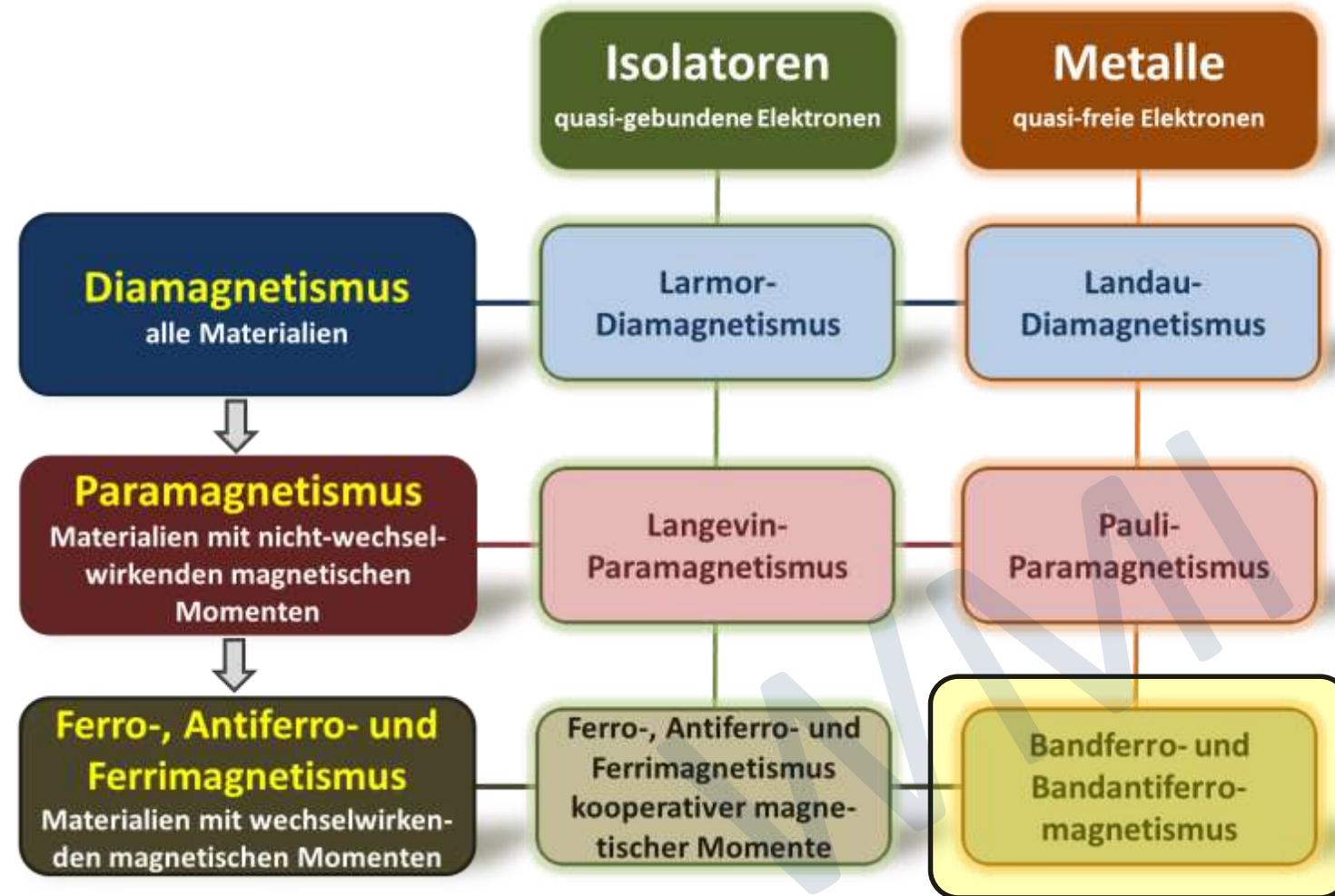
Magnetismus

WMM

12.5.6 Austausch-WW zwischen itineranten Elektronen

- Kooperativer Magnetismus in Systemen mit frei beweglichen Leitungselektronen

- **Heisenberg-Modell:**
berücksichtigt paarweise WW von lokalisierten magnetischen Momenten
→ versagt bei der Beschreibung der kollektiven WW eines Elektrons mit allen anderen Elektronen eines Elektronengases
- **Kollektive Austauschwechselwirkung:**
erlaubt die Beschreibung des **Bandferromagnetismus und Bandantiferromagnetismus** in Metallen (z.B. Co, Fe, Ni)



12.5.6 Austausch-WW zwischen itineranten Elektronen

- Tutorial: Austausch-Wechselwirkung zwischen freien Elektronen

- Paarwellenfunktion von **zwei Elektronen** mit gleichem Spin \rightarrow erfordert antisymmetrische Ortsfunktion

$$\Psi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{2} V} (e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j} - e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_j} e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_i}) = \frac{1}{\sqrt{2} V} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j} (1 - e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)})$$

- Wahrscheinlichkeit, Elektron i in Volumenelement d^3r_i und Elektron j in Volumenelement d^3r_j zu finden:

$$|\Psi_{ij}|^2 d^3r_i d^3r_j = \frac{1}{V^2} [1 - \cos\{(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\}] d^3r_i d^3r_j$$

$$\cos x = \frac{1}{2} (e^{ix} + e^{-ix})$$

$\rightarrow |\Psi_{ij}|^2 d^3r_i d^3r_j = 0$ für $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j$: zwei Elektronen mit gleichem Spin können nicht am selben Ort sein

\rightarrow für ein Spin- \uparrow Elektron können andere Spin- \uparrow Elektronen wegen reduzierter Dichte Coulomb-Potenzial von Ionenrümpfen nicht effektiv abschirmen \rightarrow Erhöhung der Bindungsenergie

- Wahrscheinlichkeit, ein zweites Spin- \uparrow Elektron in Volumenelement d^3r in Entfernung $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ von erstem zu finden

$$P(r) d^3r = n_{\uparrow} \overline{[1 - \cos\{(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\}]} d^3r$$

$\overline{[\dots]}$ = k -gemittelte Wahrscheinlichkeit

\rightarrow Mittelung über gesamte Fermi-Kugel

$n_{\uparrow} = n/2$: Dichte der Spin- \uparrow Elektronen

12.5.6 Austausch-WW zwischen itineranten Elektronen

- effektive Elektronendichte $\rho(r) = eP(r)$, die Spin- \uparrow Elektronen sehen

$$\rho(r) = \frac{en}{2} \overline{[1 - \cos\{(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\}]} = \frac{en}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{\left[\frac{4}{3}\pi k_F^3\right]^2} \int d^3k_i \int d^3k_j \frac{1}{2} (e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} + e^{-i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}) \right\}$$

- Lösen des Integrals ergibt

$$\rho(r) = \frac{en}{2} \left\{ 1 - 9 \frac{(\sin k_F r - k_F r \cos k_F r)^2}{(k_F r)^6} \right\}$$

- addieren der räumlich homogenen Elektronendichte $en/2$ der Spin- \downarrow Elektronen

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

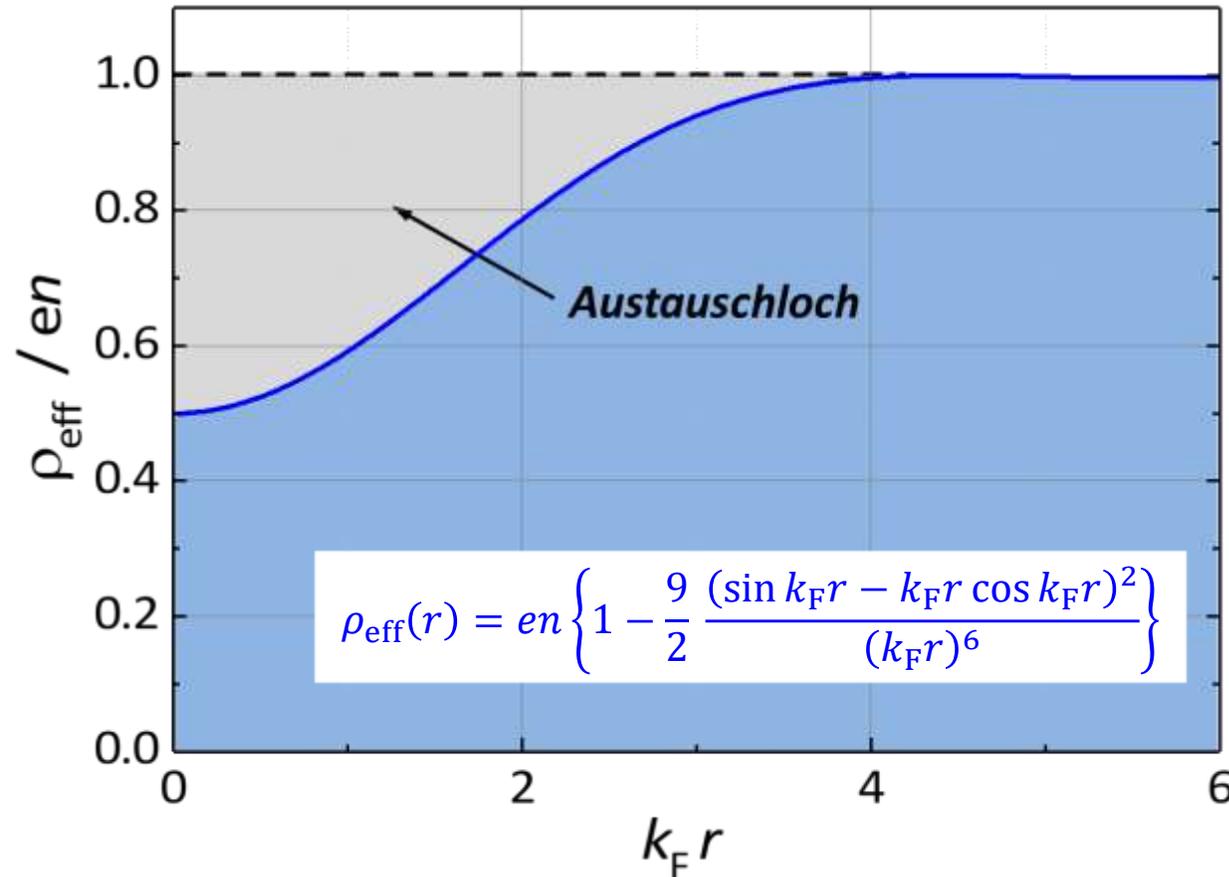
Spin- \downarrow Elektronen

reduzierte Dichte der Spin- \uparrow Elektronen in der unmittelbaren Umgebung eines Spin- \uparrow Elektrons

→ **Austauschloch**

12.5.6 Austausch-WW zwischen itineranten Elektronen

- Austauschloch in freiem Elektronengas



Aufgrund der Austauschwechselwirkung ist die Elektronendichte der Elektronen mit gleicher Spin-Richtung in unmittelbarer Umgebung reduziert.

Jedes Elektron bohrt sich sozusagen ein „**Austauschloch**“ in die Elektronendichte gleicher Spin-Richtung.

Austauschloch ist **kollektiver Effekt** von allen Elektronen (Mittelung über gesamte Fermi-Kugel)

- energetische Betrachtung:
 - (i) Absenkung der Coulomb-Energie durch reduzierte Abschirmung
 - (ii) Erhöhung der kinetischen Energie durch Lokalisierung im Austauschloch

Welcher Beitrag dominiert??

12.5.6 Bandferromagnetismus in Metallen

- Austausch-Wechselwirkung in einem System freier Elektronen: Stoner-Modell

- einfaches Modell zur Diskussion der Entstehung einer endlichen Magnetisierung in einem freien Elektronengas
 → Austausch führt zu Änderung der Energie der Spin-↑ und Spin-↓ Elektronen

$$E_{\uparrow} = \varepsilon(k) - I \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N} \quad E_{\downarrow} = \varepsilon(k) + I \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N}$$

- 1. Term: Dispersion von Elektronengas ohne Austausch
- 2. Term: Beitrag von Austauschwechselwirkung, I = Stoner-Parameter

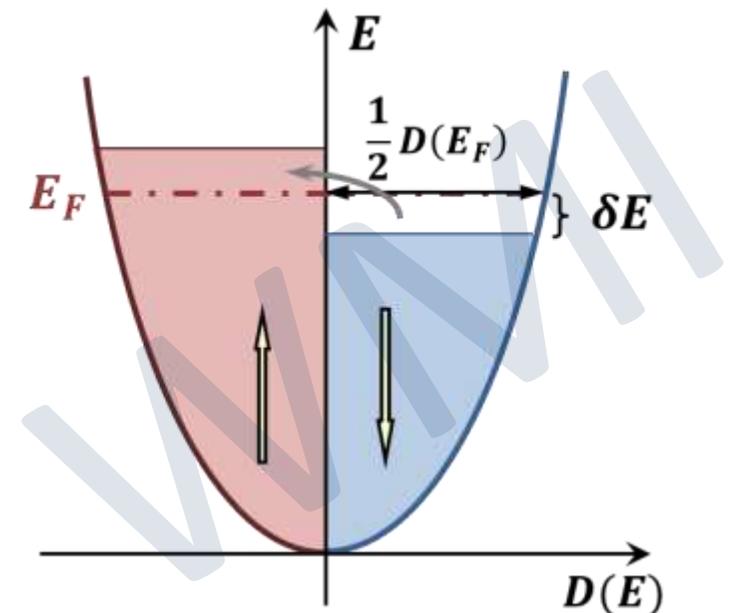
Unter welchen Bedingungen erhalten wir ein Minimum der Gesamtenergie für Spin-Polarisation $P = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N} \neq 0$?

- Diskussion der Energieänderung, wenn wir einige Spin-↑ zu Spin-↓ Elektronen machen (bei $T = 0$)

i. kinetische Energie:

Erhöhung der Zahl der Spin-↑ Elektronen um $\delta N = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{2} = \frac{1}{2} D(E_F) \delta E$

$$\frac{\Delta E_{\text{kin}}}{V} = \frac{\delta N}{V} \delta E = \frac{1}{2V} D(E_F) \delta E^2$$



12.5.6 Bandferromagnetismus in Metallen

ii. potentielle Energie:

wir benutzen $N_{\uparrow,\downarrow} = \frac{N}{2} \pm \frac{1}{2} D(E_F) \delta E$ $n_{\uparrow,\downarrow} = \frac{N}{2V} \pm \frac{1}{2V} D(E_F) \delta E$

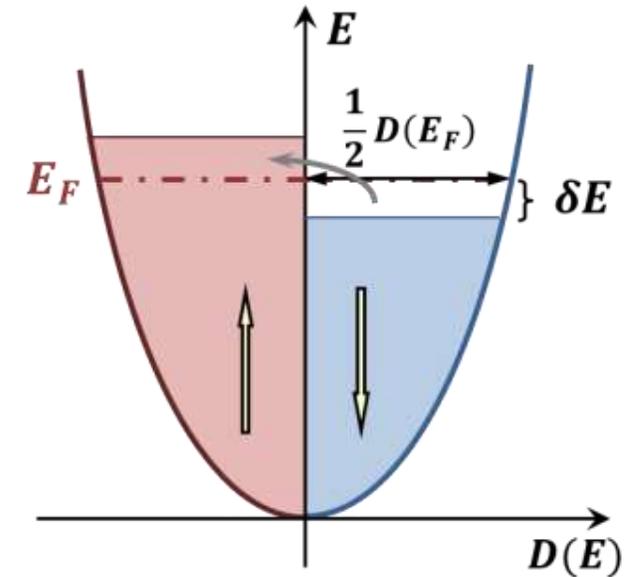
→ $M_A = -\frac{1}{2} g_s \mu_B (n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) = -\mu_B \frac{1}{V} D(E_F) \delta E$

wir argumentieren, dass M_A durch ein fiktives **Austausch-** oder **Molekularfeld** $B_A = \mu_0 \gamma M_A$ entstanden ist (γ = Molekularfeld-Konstante)

→ $\frac{\Delta E_{\text{pot}}}{V} = -\int_0^{B_A} M dB = -\mu_0 \gamma \int_0^{M_A} M dM = -\frac{1}{2} \mu_0 \gamma M_A^2$

$\frac{\Delta E_{\text{pot}}}{V} = -\frac{1}{2} \mu_0 \gamma \mu_B^2 \left[\frac{D(E_F)}{V} \delta E \right]^2 = -\frac{1}{4V} U (2\delta N)^2$

$\frac{\Delta E_{\text{pot}}}{V} = -\frac{1}{4V} U (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})^2 = \frac{1}{4} UV (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})^2$



$\delta N = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{2} = \frac{1}{2} D(E_F) \delta E$

$U = 2\mu_0 \gamma \mu_B^2 / V$

U = charakteristische Energie, die wir aufgrund der Austauschkopplung für ein Elektronenpaar mit parallelem Spin gewinnen (z.B. dadurch, dass diese Elektronen nicht am selben Platz sein dürfen)

12.5.6 Bandferromagnetismus in Metallen

iii. Gesamtenergie:
$$\frac{\Delta E}{V} = \frac{\Delta E_{\text{kin}}}{V} + \frac{\Delta E_{\text{pot}}}{V} = \frac{1}{2V} D(E_F) \delta E^2 \left[1 - \frac{1}{2} U D(E_F) \right]$$

Energieabsenkung, falls

$$\frac{1}{2} U D(E_F) > 1 \quad \text{Stoner-Kriterium}$$

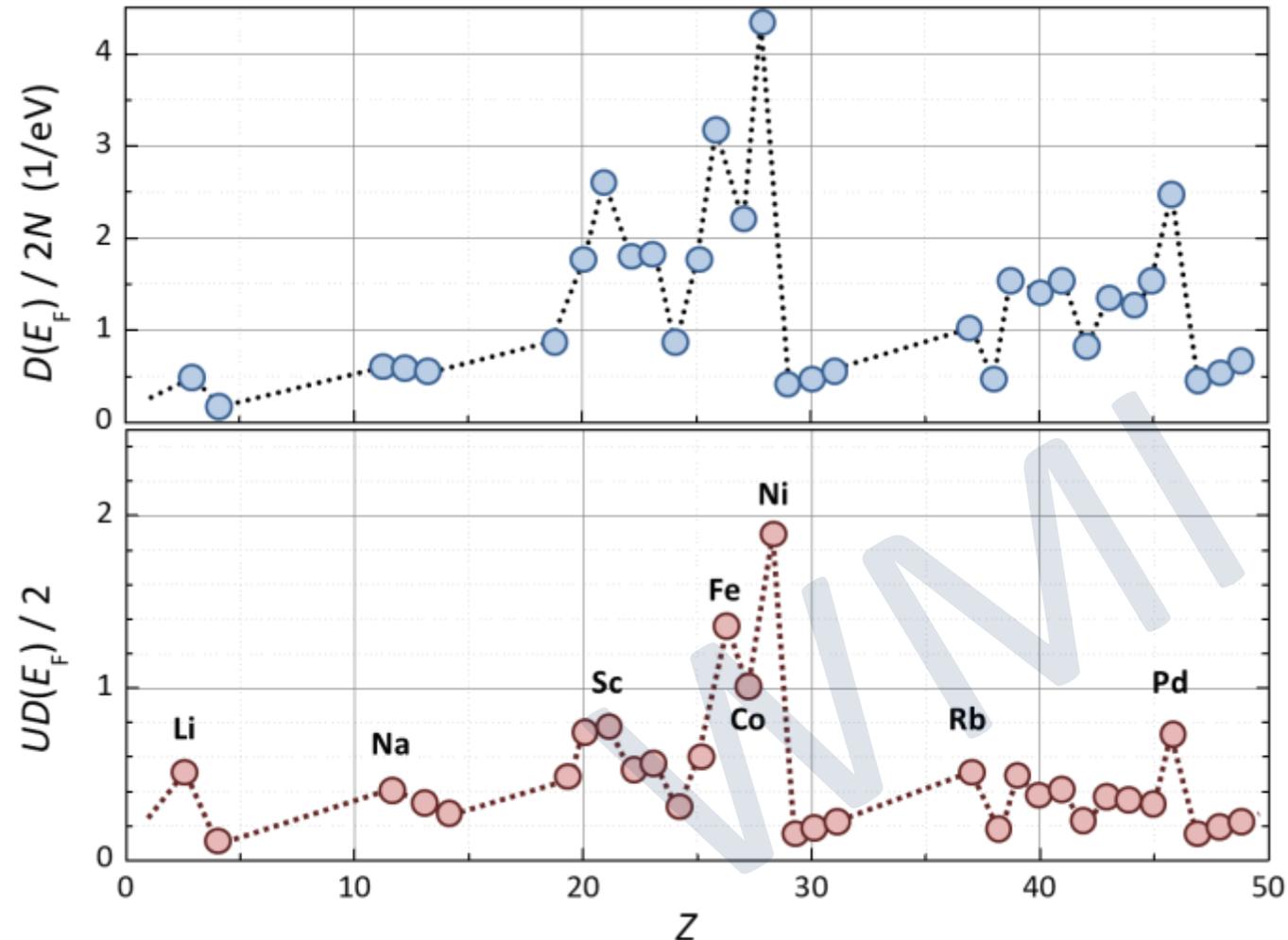
→ wir benötigen hohes $D(E_F)$ und hohes U

Plausibilität:

- hohes $D(E_F)$:
für bestimmtes δN wird Erhöhung von ΔE_{kin} klein
- hohes U :
für bestimmtes δN wird Erniedrigung von ΔE_{pot} groß

– $T > 0$:

$$\frac{1}{2} U \int_0^{\infty} dE D(E) \left(\frac{\partial f(E, T)}{\partial E} \right)_T > 1$$



12.5.6 Bandferromagnetismus in Metallen

- Wie reagiert ein Metall mit ferromagnetischer Austauschkopplung auf ein äußeres Magnetfeld?

- für $B_{\text{ext}} > 0$ erhalten wir **zusätzlichen Term in Energiedichte**

$$\frac{\Delta E}{V} = \frac{1}{2V} D(E_F) \delta E^2 \left[1 - \frac{1}{2} UD(E_F) \right] - M B_{\text{ext}} = \frac{1}{2} \frac{M^2}{\mu_B^2 D(E_F)/V} \left[1 - \frac{1}{2} UD(E_F) \right] - M B_{\text{ext}}$$

$$M = -\frac{1}{2} g_s \mu_B (n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) = -\mu_B \frac{1}{V} D(E_F) \delta E$$

- Minimum der Energiedichte:

$$\frac{1}{V} \frac{\partial \Delta E}{\partial M} = 0 = \frac{M}{\mu_B^2 D(E_F)/V} \left[1 - \frac{1}{2} UD(E_F) \right] - B_{\text{ext}}$$

- Auflösen nach M :

$$M = \frac{\mu_B^2 D(E_F)/V}{1 - \frac{1}{2} UD(E_F)} B_{\text{ext}} \quad \Rightarrow \quad \chi = \mu_0 \left(\frac{\partial M}{\partial B_{\text{ext}}} \right)_{T,V} = \frac{\mu_B^2 D(E_F)/V}{1 - \frac{1}{2} UD(E_F)} = \underbrace{\frac{1}{1 - \frac{1}{2} UD(E_F)}}_{\text{Stoner-Faktor}} \chi_P \quad \chi_P = \text{Paulische Spin-Suszeptibilität}$$

→ durch die Austauschkopplung wird Elektronengas um den **Stoner-Faktor** $\left[1 - \frac{1}{2} UD(E_F) \right]^{-1}$ leichter magnetisch polarisierbar

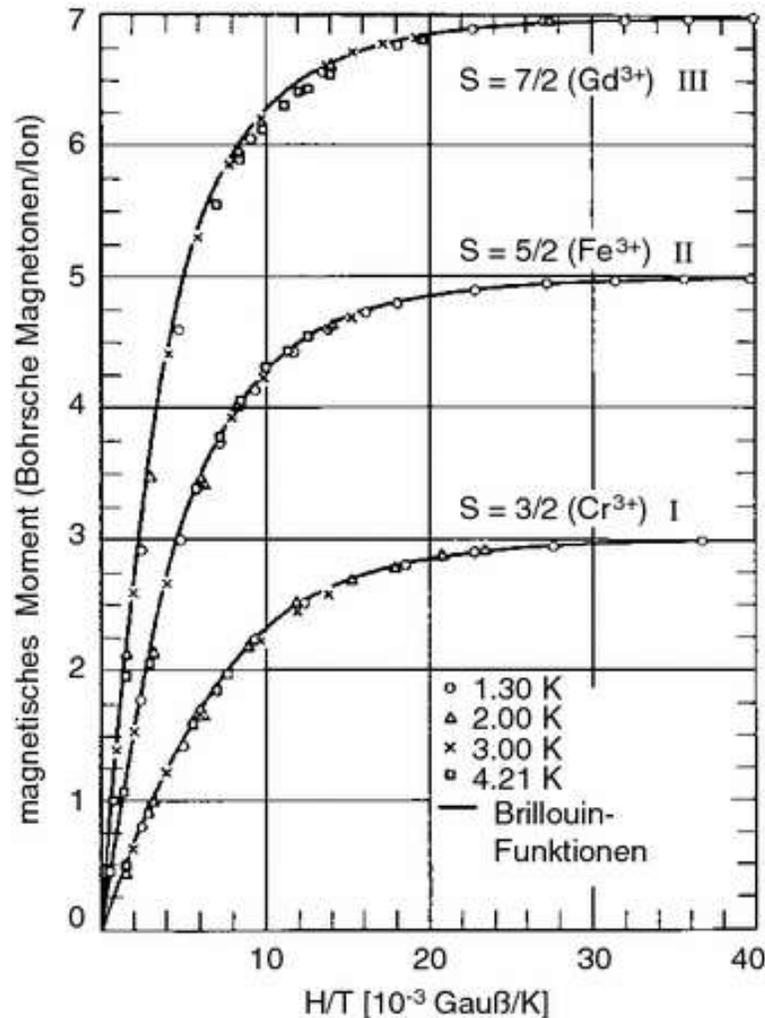
→ für $\frac{1}{2} UD(E_F) \rightarrow 1$ erhalten wir eine Polarisationskatastrophe → Übergang in den ferromagnetischen Zustand

(analog zur Polarisationskatastrophe, die zu Ferroelektrizität führt)

12.5.6 Bandferromagnetismus in Metallen

- Sättigungsmagnetisierung

i. **Wiederholung:** einfache Verhältnisse für Systeme mit nichtwechselwirkenden Momenten gebundener Elektronen:



Gadolinium-Sulfat-Oktahydrat

Eisen-III-Alaun

Kalium-Chrom-Alaun
KCr(SO4)2

Sättigungsmagnetisierung:

$$M_s = n g_J \mu_B J$$

Beispiele:

(i) Gadolinium-Sulfat-Oktahydrat

Gd³⁺-Ion: $S = 7/2, L = 0, J = 7/2$

$$\Rightarrow g_J = 2 \Rightarrow \frac{M_s}{n} = g_J \mu_B J = 7 \mu_B$$

(ii) Eisen-III-Alaun

Fe³⁺-Ion: $S = 5/2, L = 0, J = 5/2$

$$\Rightarrow g_J = 2 \Rightarrow \frac{M_s}{n} = g_J \mu_B J = 5 \mu_B$$

(iii) Kalium-Chrom-Alaun

Cr³⁺-Ion: $S = 3/2, L = 3$ (gequenscht), $J = 3/2$

$$\Rightarrow g_J = 2 \Rightarrow \frac{M_s}{n} = g_J \mu_B J = 3 \mu_B$$

→ sehr gute Übereinstimmung mit Experiment

12.5.6 Bandferromagnetismus in Metallen

- Sättigungsmagnetisierung in Bandferromagneten

- ii. schwierige Verhältnisse für Bandferromagnete:

- Beispiel Nickel

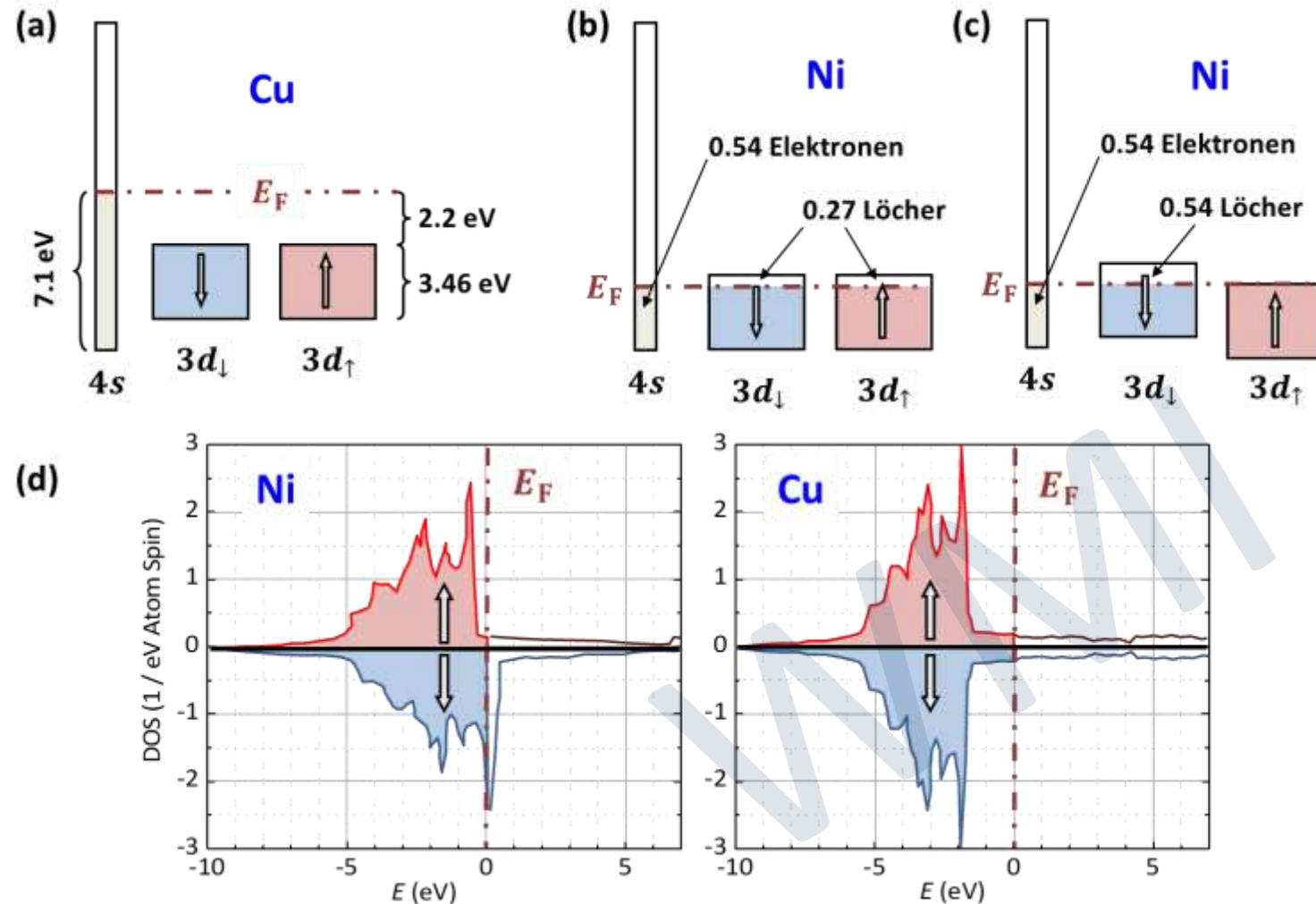
Messung: $M_s = n g_J \mu_B J = 510 \text{ kA/m}$
 $\Rightarrow g_J = 1.2$ für $J = 1/2$,
 erwartet wird $g_J = 2$

Ni hat ein Elektron weniger als Cu (volle 3d-Schale plus ein 4s-Elektron):

- im paramagnetischen Zustand kommt Elektron zu 46% aus 4s- und zu 54% aus 3d-Schale
- im ferromagnetischen Zustand liegen 0.54 Löcher alle im Spin- \downarrow Band

➔ **effektives magnetisches Moment pro Ni-Atom:**

$$M_s/n = 0.54 g_J \mu_B J \approx 1.2 \mu_B J$$



12.6 Magnetische Ordnungsphänomene

- Welche magnetischen Ordnungsphänomene entstehen in Festkörpern aufgrund der Austauschwechselwirkung?

- Können wir magnetische Ordnungsstrukturen für $T = 0$ vorhersagen?
- Welche Magnetfeld- und Temperaturabhängigkeit haben die Ordnungsphänomene?

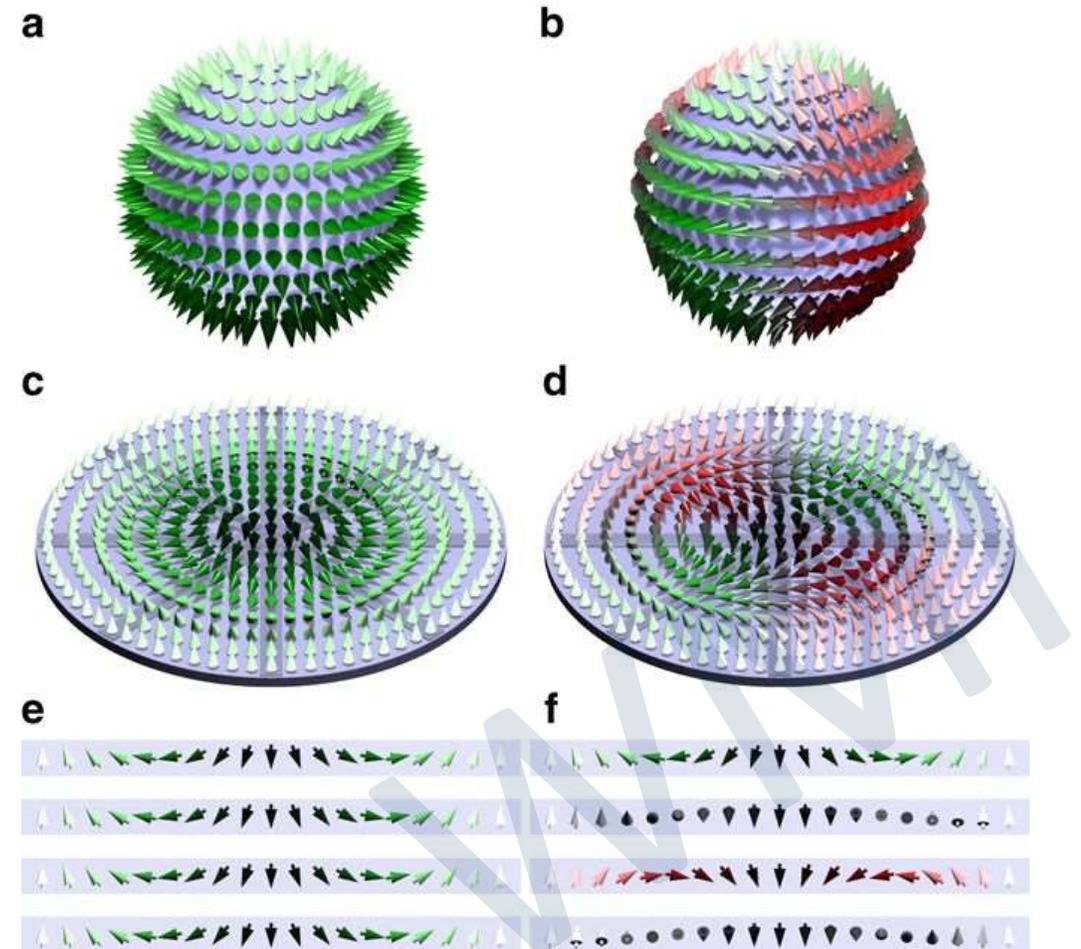
- Theoretische Beschreibung meist sehr anspruchsvoll
- Wechselwirkende Vielteilchensysteme

Wir werden starke Vereinfachungen verwenden, z.B.

Molekularfeld-Näherung

Beschreibung der Wechselwirkung eines magnetischen Moments mit allen anderen durch ein mittleres

Austausch- oder **Molekularfeld** (Pierre Weiss, 1907)

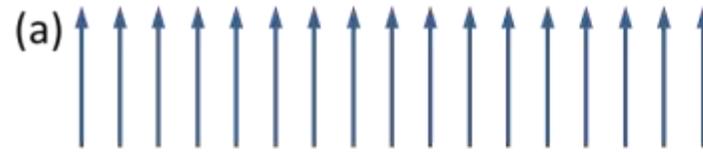


Markus Hoffmann et al., "Antiskyrmions stabilized at interfaces by anisotropic Dzyaloshinskii-Moriya interactions". Nature Communications. **8** (308) (2013)

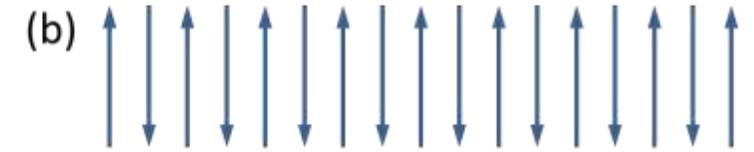
12.6.1 Magnetische Ordnungsstrukturen

- Beispiele für magnetische Ordnungsstrukturen von lokalisierten magnetischen Momenten

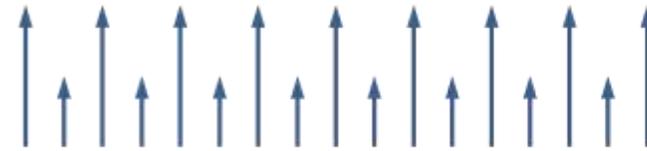
a. Ferromagnetische Ordnung



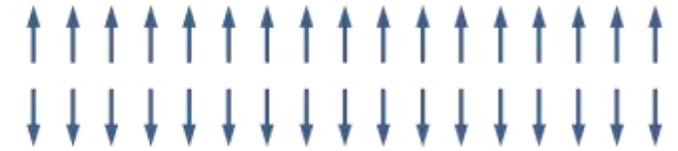
b. Antiferromagnetische Ordnung



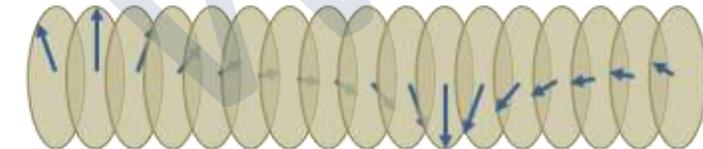
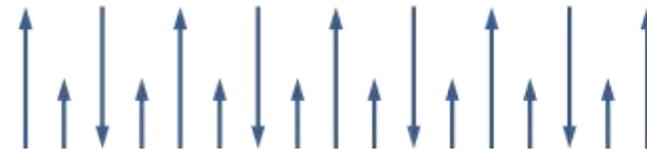
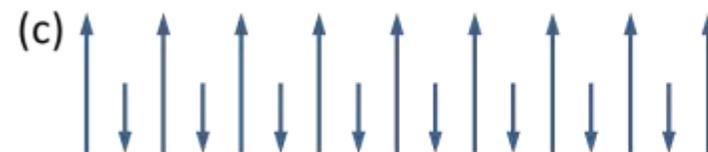
c. Ferrimagnetische Ordnung



d. Zykloidale Ordnung



e. Helikale Ordnung



12.6.1 Magnetische Ordnungsstrukturen

- Wie können wir magnetisch Ordnungsstrukturen in Systemen mit itineranten Ladungsträgern beschreiben?
 - Beschreibung der Ordnungsstruktur durch **Spin-Dichte**

$$s_z(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} [n_\uparrow(\mathbf{r}) - n_\downarrow(\mathbf{r})]$$

- ferromagnetischen Metalle:

$$\int s_z(\mathbf{r}) d^3r > 0 \quad (\text{für eine bestimmte Richtung})$$

- antiferromagnetischen Metalle:

$$\int s_z(\mathbf{r}) d^3r = 0 \quad (\text{für jede beliebige Richtung})$$



• Austauschwechselwirkung zwischen freien Elektronen

effektive Ladungsdichte, die von Spin-↑-Elektron gesehen wird:

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

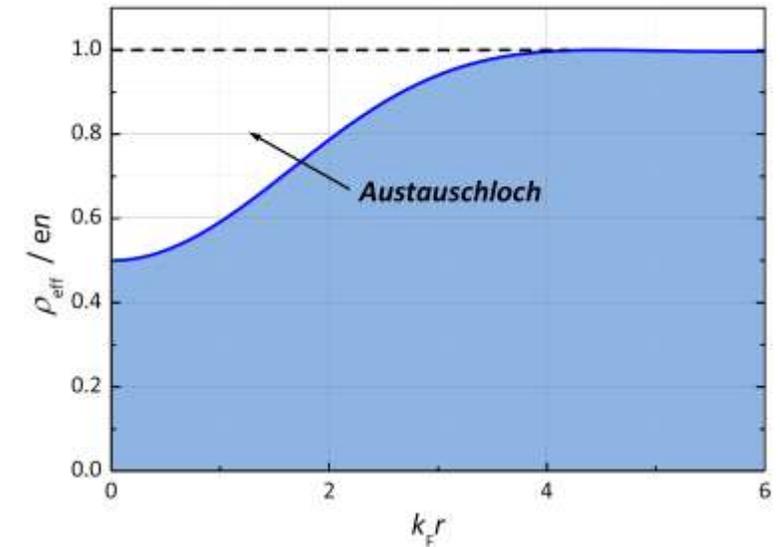
- **Austauschloch durch Pauli-Prinzip**
- **fehlende Spin-↑-Elektron**

Reduktion der Gesamtenergie durch Austauschloch:

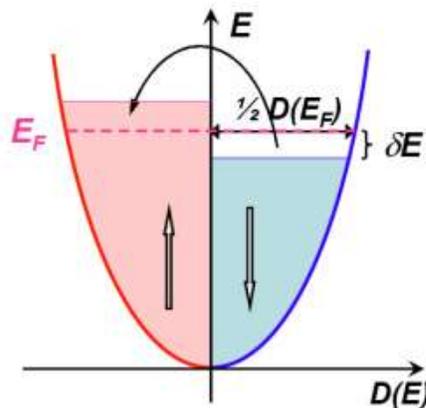
parallele Spin-Ausrichtung

Erhöhung der Gesamtenergie durch Austauschloch:

antiparallele Spin-Ausrichtung



• Bandferromagnetismus in Metallen: Stoner-Modell



- Erhöhung der Dichte einer Spin-Sorte um $\frac{\delta N}{V} = \frac{1}{2} \frac{D(E_F)}{V} \delta E$

→ Erhöhung von E_{kin}

$$\frac{\Delta E_{\text{kin}}}{V} = \frac{\delta N}{V} \delta E = \frac{1}{2V} D(E_F) \delta E^2$$

→ Erniedrigung von E_{pot}

$$\Delta E_{\text{pot}} = - \int_0^{B_A} M dB = -\mu_0 \gamma \int_0^{M_A} M dM = -\frac{1}{2} \mu_0 \gamma M_A^2$$

Molekularfeld $B_A = \mu_0 \gamma M_A$

Molekularfeldkonstante γ

$$\frac{\Delta E_{\text{pot}}}{V} = -\frac{1}{4} V U \left[\frac{D(E_F)}{V} \delta E \right]^2$$

Energiegewinn pro Elektronenpaar:

$$U = 2\mu_0 \gamma \mu_B^2 / V$$

- **Bandferromagnetismus in Metallen: Stoner-Modell**

→ Änderung der Gesamtenergie: $\Delta E = \Delta E_{\text{kin}} + \Delta E_{\text{pot}} = \frac{1}{2V} D(E_F) (\delta E)^2 \left[1 - \frac{1}{2} UD(E_F) \right] < 0$ für $\frac{1}{2} UD(E_F) > 1$

Stoner-Kriterium

- **Metall mit ferromagnetischer Austauschkopplung in externem Magnetfeld**

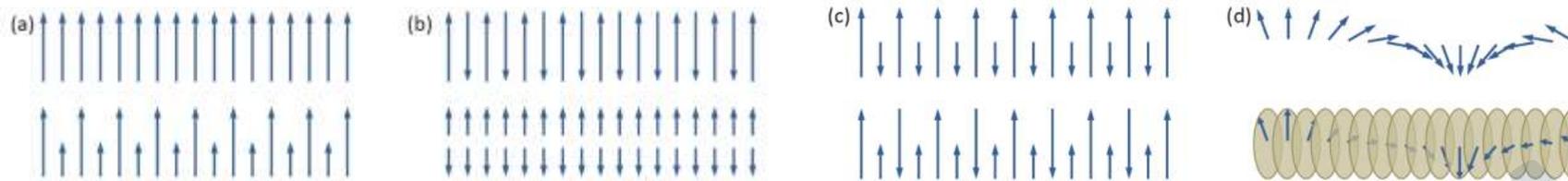
Suszeptibilität:
$$\chi = \frac{\mu_B^2 D(E_F)/V}{1 - \frac{1}{2} UD(E_F)} = \underbrace{\frac{1}{1 - \frac{1}{2} UD(E_F)}}_{\text{Stoner-Faktor}} \chi_P$$

χ_P = Paulische Spin-Suszeptibilität

→ Divergenz der magnetischen

Suszeptibilität für $\frac{1}{2} UD(E_F) \rightarrow 1$: „**Magnetisierungskatastrophe**“

- **Magnetische Ordnungsphänomene**



- **gebundene Elektronen:** Ordnungsstruktur der lokalisierten magnetischen Momente

- **itinerante Elektronen:** Beschreibung der Ordnungsstruktur durch Spin-Dichte

$$s_z(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} [n_{\uparrow}(\mathbf{r}) - n_{\downarrow}(\mathbf{r})]$$