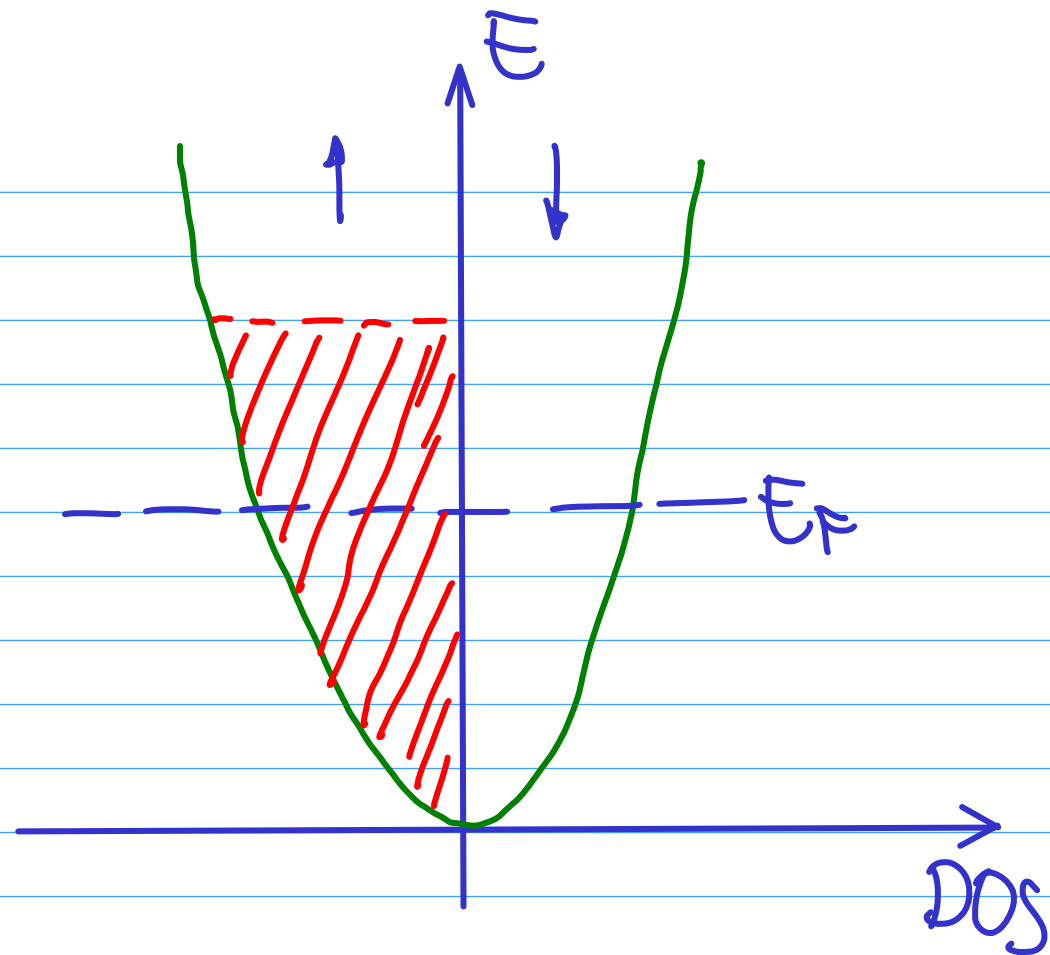


vs.

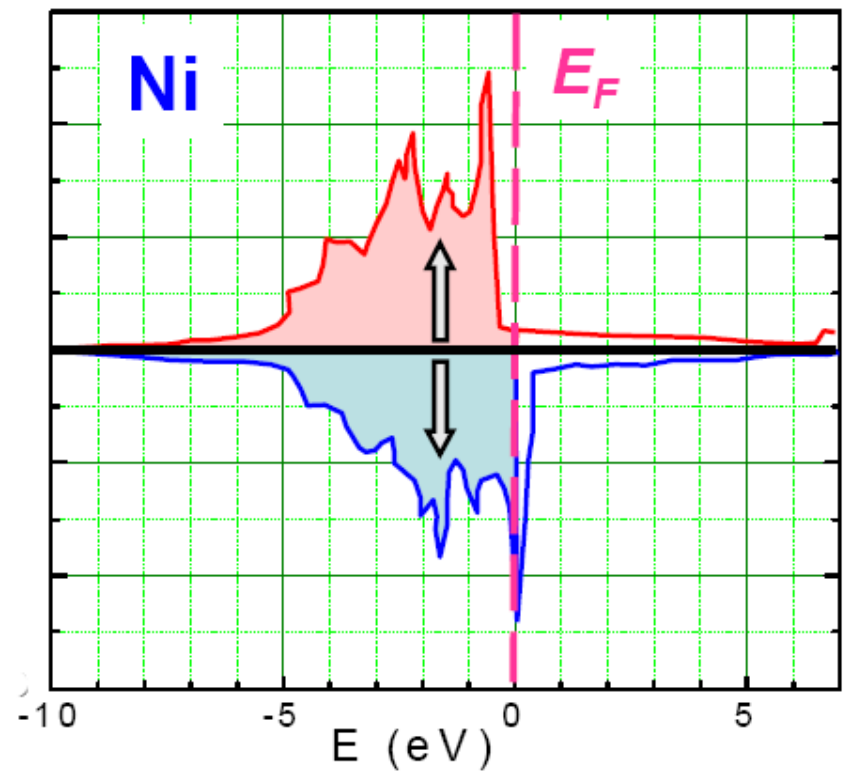
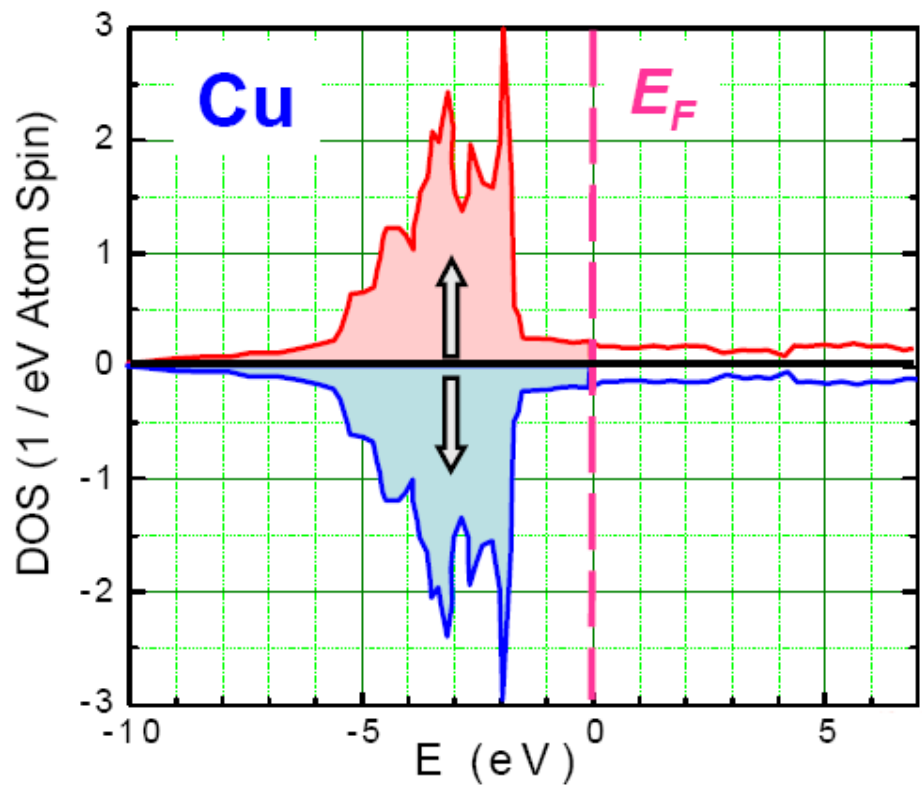


Austauschgewinn minimal
 E_{kin} minimal

Austauschgewinn maximal
 E_{kin} maximal

Was "gewinnt"?

Besetzung der 3d- und 4s-Niveaux & berechnete Zustandsdichte



J. Callaway, C.S. Wang,
 Phys. Rev. B **7** (1983) 1096

4s: breite, niedrige DOS von -10 bis +7 eV

3d: schmale, hohe DOS (Breite ca. 4 eV) "viele Spins für wenig E_{kin} "

Modell von Stoner & Wohlfarth

Austausch U favorisiere $\uparrow\uparrow$.

"Preis" für $\downarrow\uparrow$: I

Ansatz für e^- -Zustände:

$$\tilde{E}_{\uparrow\downarrow}(k) = E(k) + I \frac{n_{\uparrow\downarrow}}{n} \pm \mu_B B$$

2 Gln, für \uparrow und \downarrow Elektronen

gew. $1e^-$ -Dispersion

↑
wg. Pauli-Paramagn.
Anteil "falsch" orientierter Spins

$$\Rightarrow \tilde{E}_{\uparrow} = E(k) - \mu_B B + \frac{1}{2} I \left(\frac{n_{\downarrow}}{n} + 1 - \frac{n_{\uparrow}}{n} \right)$$

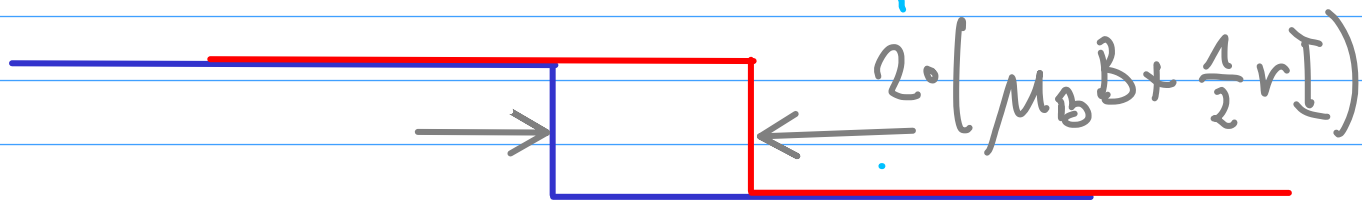
Verschiebe E -Nullpkt. um $\frac{1}{2}I$, def. $v = \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{n}$

$$\Rightarrow E_{\uparrow\downarrow}(k) = E(k) \mp \mu_B B \pm \frac{1}{2} r I \quad (2.61n)$$

Verschiebung der Bänder für \uparrow ed ergibt Umverteilung

$$n_{\uparrow} - n_{\downarrow} = \int_0^{\infty} dE \frac{1}{2} D(E) [f(E_{\uparrow}(k)) - f(E_{\downarrow}(k))]$$

[...] sind bei $T \rightarrow 0$ zwei Stufenfunktionen



$D \approx D(E_F)$
(besser $D^{\text{eff}}(E_F)$)

$$r = \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{n} = \frac{D(E_F)}{2n} (2 \mu_B B + r I)$$

$$\Rightarrow r = \frac{D(E_F) \mu_B B}{n} \frac{1}{1 - \frac{I D(E_F)}{2n}}$$

Mit Magnetisierung $M = r n \mu_B$

$$\Rightarrow \chi = \frac{\mu_0 M}{B} = \frac{\mu_0 \mu_B^2 D(E_F)}{1 - \frac{I D(E_F)}{2n}} = \frac{\chi^{\text{Pauli}}}{1 - \frac{I D(E_F)}{2n}}$$

χ^{Pauli}

Def. Zustandsdichte pro Atom $\tilde{D} = D \cdot \frac{V}{N} = \frac{D}{n}$

$$\Rightarrow \chi = \frac{\chi^{\text{Pauli}}}{1 - \frac{1}{2} I \tilde{D}(E_F)} \Rightarrow \text{großes } I \tilde{D} \text{ erhöht } \chi$$

divergiert bei $\frac{1}{2} I \tilde{D} = 1$

Stoner-Wohlfarth:

$$J \frac{1}{2} D_0(E_F) > 1$$

Austauschintegral J

J

Zustandsdichte

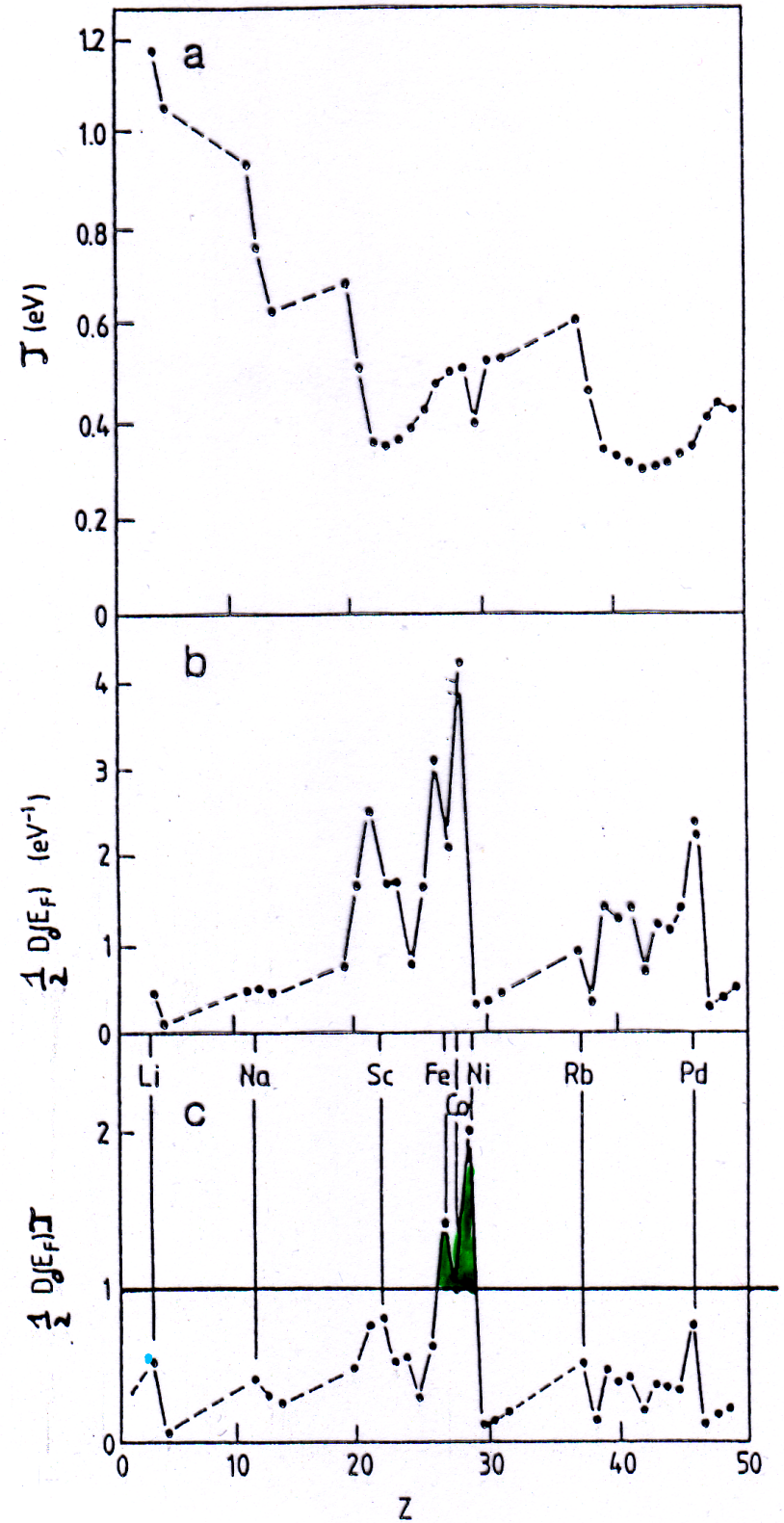
$$\frac{1}{2} D_0(E_F)$$

Stonerparameter

$$\frac{1}{2} J D_0(E_F)$$

aus: J.F. Janak,
Phys. Rev. B **16**, 255 (1977)

ferromagnetisch



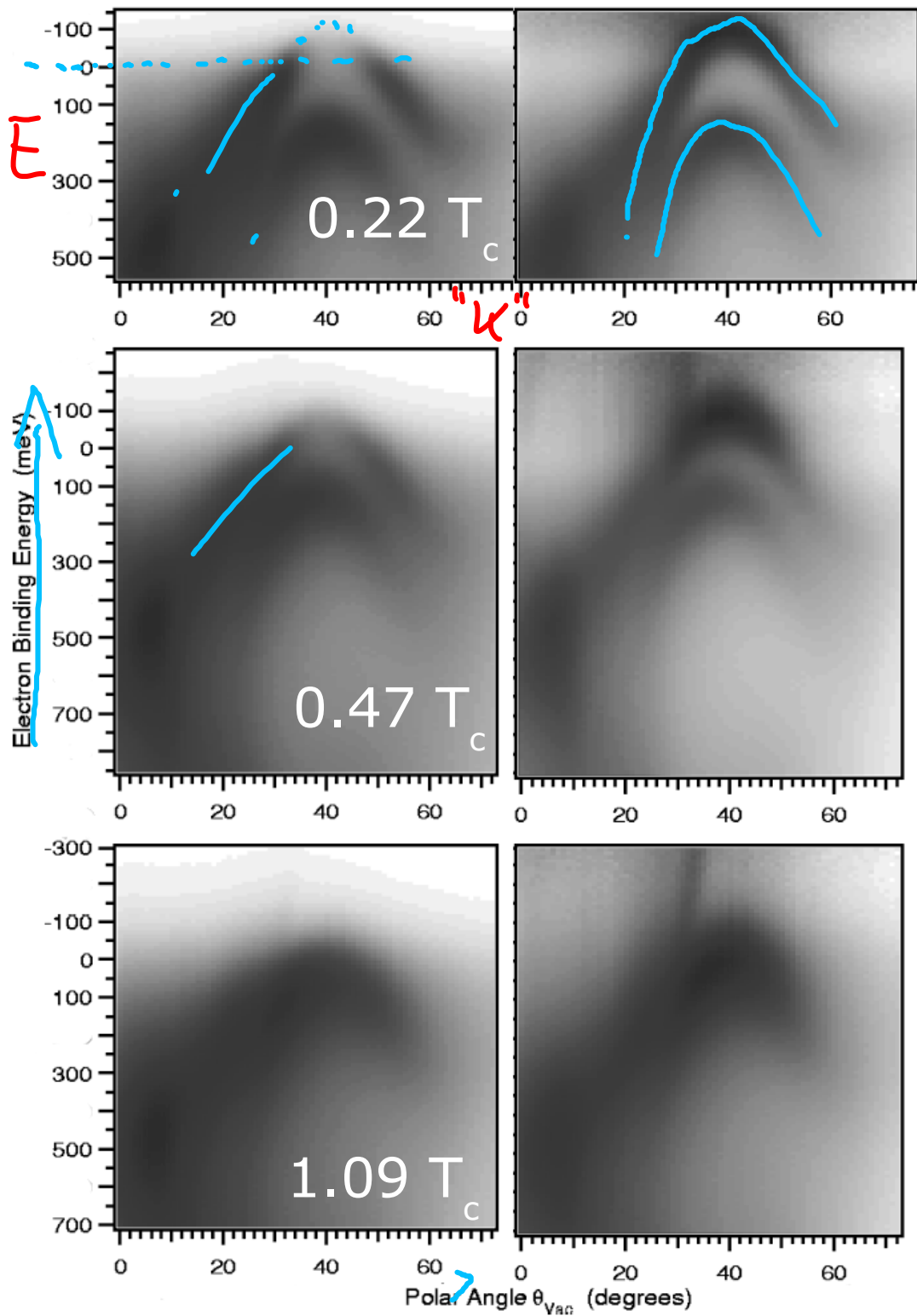
Fazit Stonermodell

- Ferromagnetismus begünstigt durch
 - großes J – i. W. atomare Eigenschaft
 - großes $D(E_F)$ – Bandstruktur; skaliert mit Bandbreite W
- starke Lokalisierung \rightarrow geringes W
 - \rightarrow Tendenz zu Ferromagnetismus, z. B. 3D ÜM Fe, Co, Ni
- $D(E_F)$ hängt von Struktur des Gitters ab
 - α Fe bcc: ferromagnetisch, Stonerkriterium erfüllt
 - β Fe fcc: paramagnetisch, Stonerkriterium nicht erfüllt



Grenzfall Atom

Überlapp = 0 \rightarrow $W = 0$ \rightarrow $F(M)$ ist Stufenfunktion \rightarrow Stonerkriterium
immer erfüllt \rightarrow maximales Moment – Hund'sche Regel 1

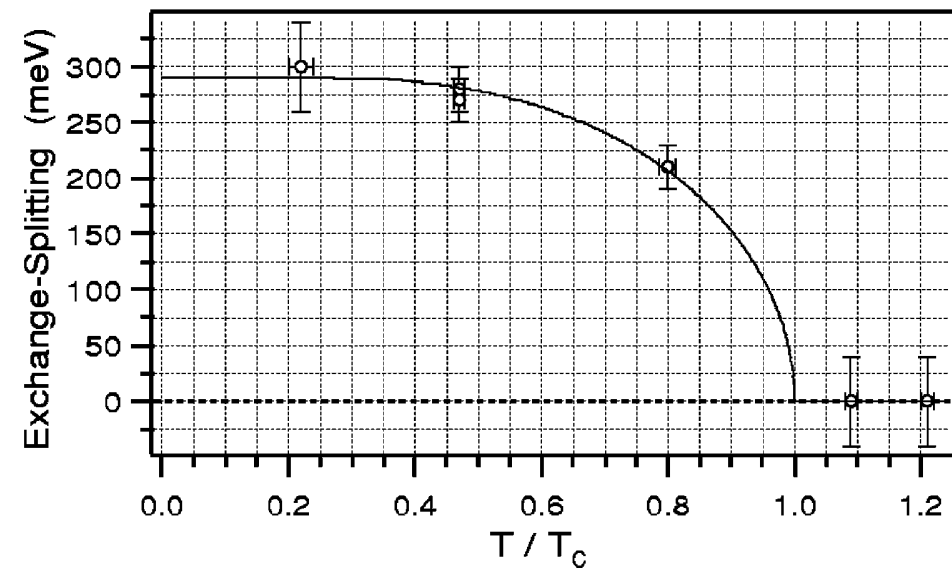


Temperature-dependent exchange splitting of Ni(111) d bands

ARPES

left: raw data

right: corrected for $f(E)$



adapted from Kreutz, Greber, Aebi, Osterwalder, Phys. Rev. B **58**, 1300 (1998)

Bisher gezeigt: \exists spontane Magnetisierung
- der Band- e^-
- lokalisierter e^-

wenn J groß genug ist.

Aber warum steht \vec{M} fest im Raum?
(im Permanentmagneten)

Oder auch fest nicht?
(im Trafoblech)

Magnetokristalline Anisotropie

Technische Anwendungen (Kompass, Tonband, hard disks) nutzen
MAE

Reduzierte Dimensionalität/Symmetrie kann MAE um
Größenordnungen ändern (\rightarrow Forschung an ultradünnen
Filmen, magnetischen Clustern etc.)

Aber: Heisenbergoperator ist bzgl. $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2$ isotrop:
nur der Winkel zwischen \mathbf{s}_1 und \mathbf{s}_2 ist relevant,
nicht der zwischen \mathbf{s}_1 und dem Gitter



Ursache 1: Dipol-Dipol-WW

→ Formanisotropie

→ Domänenstruktur

Simulation "NEEL":

$$\epsilon_{\text{DD}} = \frac{1}{2} \sum_{ij} D \frac{a^3}{r_{ij}^3} S_i S_j$$

Formanisotropie

Idee : Dipol ww. $\sim \frac{1}{r_{ij}^3}$

$$\vec{B}_{\text{innen}} = \vec{B}_{\text{außen}} - \vec{N} \vec{M} \mu_0$$

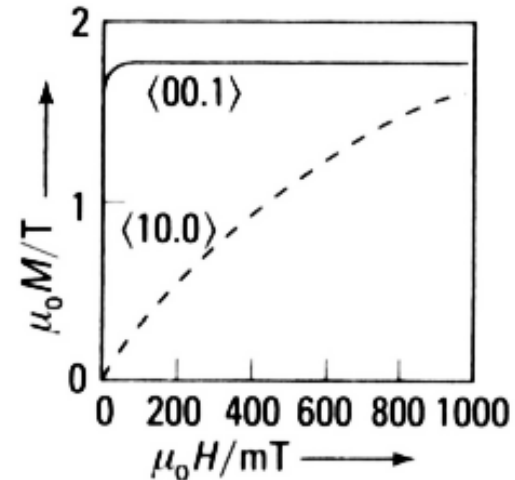
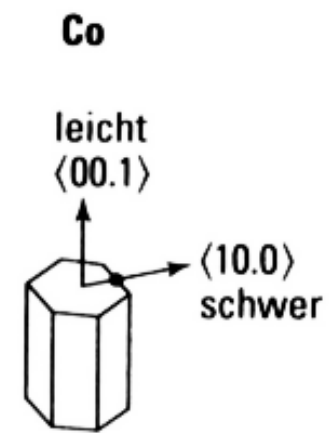
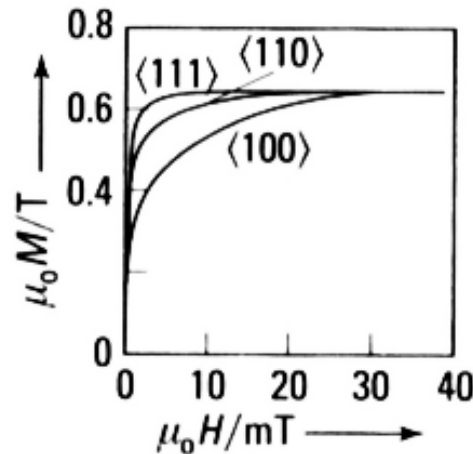
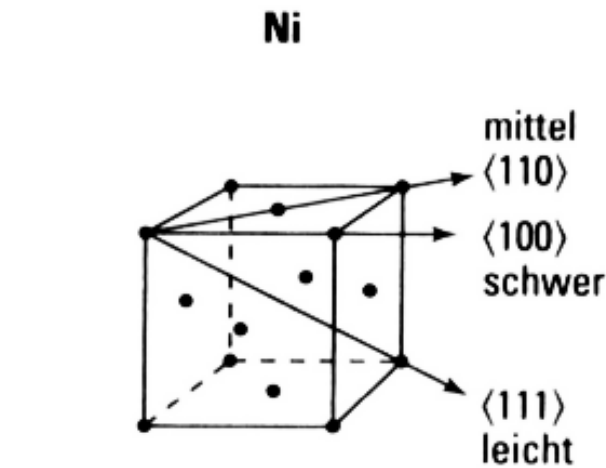
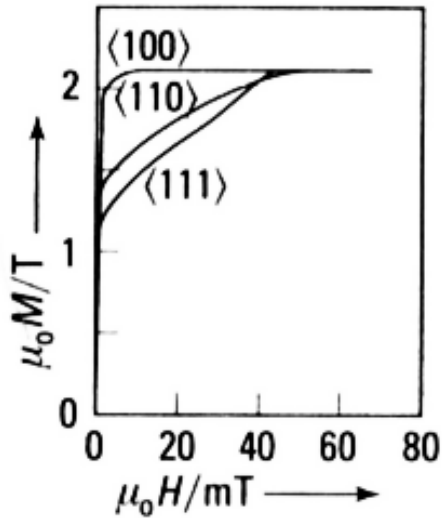
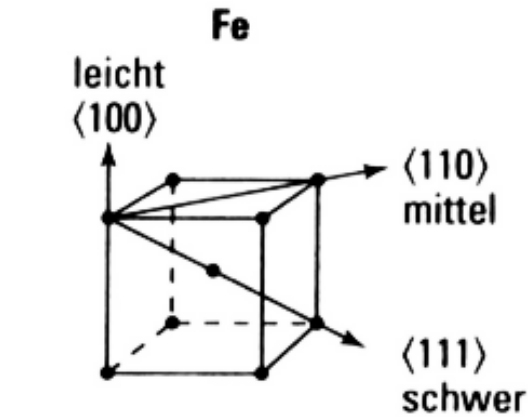
\vec{N} ist hat Diagonalgestalt, \vec{M} homogen
für Kugel, Ellipse, Scheibe

	N_{xx}	N_{yy}	N_{zz}
Kugel	$1/3$	$1/3$	$1/3$
Zyl. z	$1/2$	$1/2$	0
xy Film	0	0	1

⇒ Magnetisierbarkeit richtungsabhängig
(Nadel: längs; Film: in Ebene)

Magnetokristalline Anisotropie

Ursache 2



Co hcp, θ Winkel zw. \mathbf{M} & \mathbf{c} :

kubische Kristalle, α_i Richtungscosinus: $U = k_1 (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_1^2 \alpha_3^2)$

$$U = k_1 \sin^2 \theta + k_2 \sin^4 \theta$$

Die Magnetisierung eines Festkörpers hängt von der Orientierung des äußeren Magnetfeldes relativ zu den Kristallachsen ab.

Durch die Spin-Bahn-Kopplung wird die Orientierung des Spins an die Orientierung der Elektronenorbitale gekoppelt.

Leichte Achse (*easy axis*):

Achse des Festkörpers, entlang der eine spontane Magnetisierung bevorzugt orientiert ist.

Schwere Achse (*hard axis*):

Achse des Festkörpers, die für eine Magnetisierung energetisch nicht bevorzugt ist.

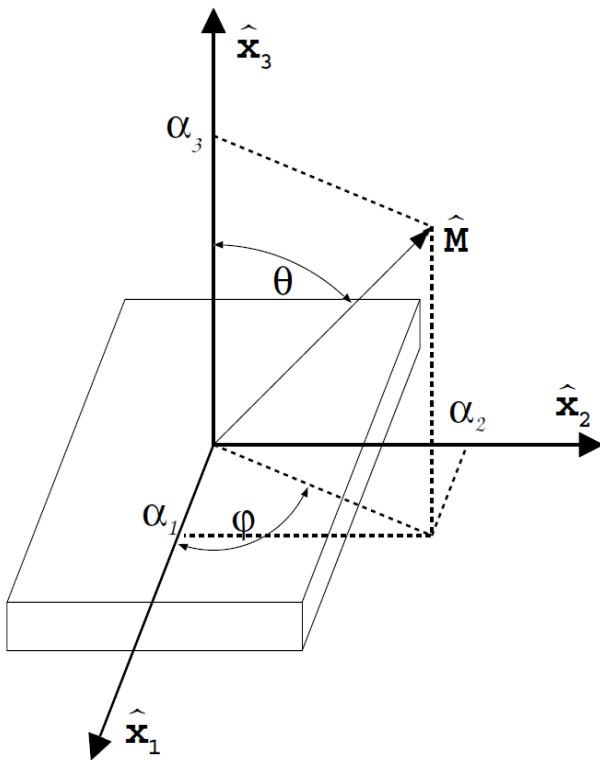
Magnetokristalline Anisotropie

Co hcp, θ Winkel zw. \mathbf{M} & \mathbf{c} :

$$U = K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta + \dots$$

kubische Kristalle, α_i Richtungscosinus:

$$U = K_1 (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_1^2 \alpha_3^2) + K_2 (\alpha_1^2 \alpha_2^2 \alpha_3^2) + \dots$$



S. Hunklinger, Festkörperphysik (Oldenbourg, 2009)

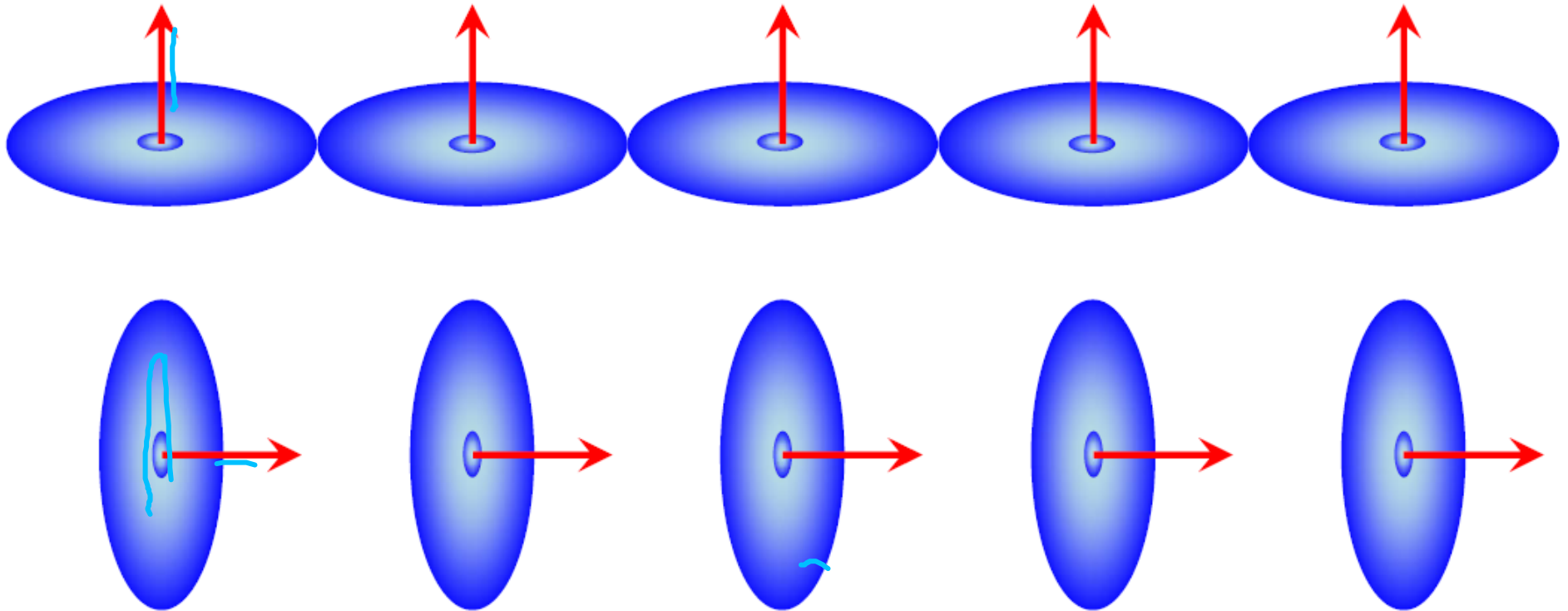
Anisotropiekonstanten

		K_1 [kJ/m ³] / [μeV/Atom]		K_2 [kJ/m ³]
Fe	krz	54,8	/ 4,02	9,5
Co	hex	766,0	/ 53.3	105
Ni	kfz	-126,3	/ -8,63	57,8
Gd	hex	80		260
SmCo ₅		≈ 20000		
Sm ₂ Fe ₁₄ B		≈ 26000		

(Kapitel Magnetismus von B. Hillebrands, S. Blügel)

Struktur kann MAE der ÜM um Größenordnungen ändern

Magnetokristalline Anisotropie



- Ursache der Anisotropie: Kristallstruktur \leftrightarrow \mathbf{L} \leftrightarrow LS Kopplung \leftrightarrow \mathbf{S}
- Spin-Bahn-Kopplung verzerrt Ladungsverteilung der Atome
⇒ Austausch & elektrostatische Wechselwirkung sind abhängig vom Winkel zwischen Spin und Kristallrichtung

spontane Magnetisierung - feste Magnetisierungsrichtung

Zwei unterschiedliche Phänomene

- (1) spontane Magnetisierung eines Ferromagneten unterhalb T_c
Folge der Austauschwechselwirkung & notwendige Bedingung für (2), aber keine hinreichende
- (2) feste Magnetisierungsrichtung von Permanentmagneten
(feste Orientierung des Spins im Raum)
Folge kleiner relativistischer Quanteneffekte der Elektronen

LS

Verwandte Effekte:

Magnetoelastischer Effekt

mech. Spannung $\Rightarrow \vec{M}$

Magnetostriktion

Änderung von $\vec{M} \Rightarrow$ mech. Spannung

Hämatit (Fe_2O_3)

häufige Beimischung von Mineralien

bis auf ein kleines magnetisches Nettomoment antiferromagnetisch
aber starke magnetokristalline Anisotropie

Bei Erdabkühlung unter T_C : Ausrichtung der einsetzenden spontanen
Magnetisierung im Erdmagnetfeld zur damaligen Zeit

Danach: häufige Änderung des Erdmagnetfelds und Plattentektonik
große MAE verhinderte Ummagnetisierung

heute: Hämatit als "Magnetnadel" zur Untersuchung der Plattentektonik

Exkurs 2: Abbildende Messmethoden