

Austauschwechselwirkung im Elektronengas

Ferromagnetismus ↔ Elementarmagnete

Bei $T = 0$: Sättigungsmagnetisierung, also $M(T=0) = n_B \mu_B N/V$; $n_B \in \mathbb{N}$

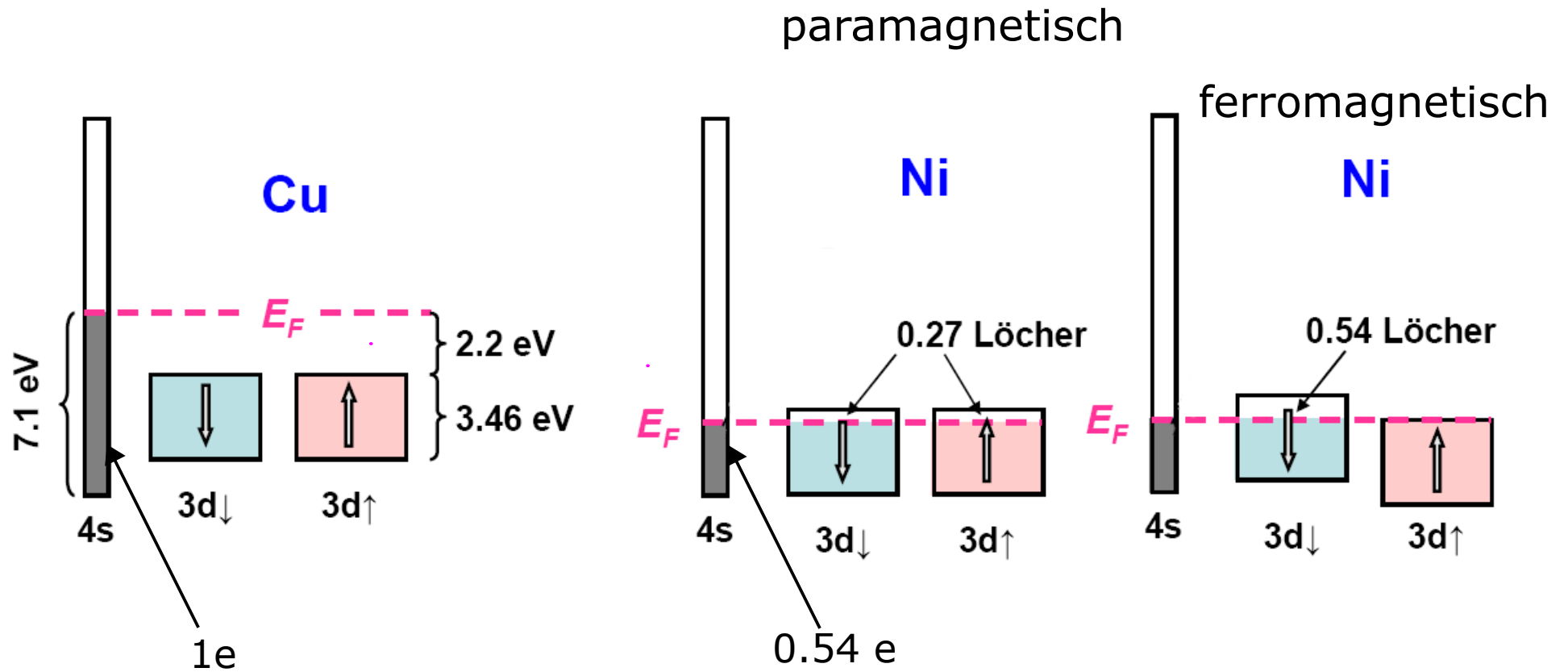
Stoff	Sättigungsmagnetisierung M_s in Gauß		n_B (0 K) pro Molekül	Curie-Temperatur in K
	Zimmertemperatur	0 K		
Fe	1707	1740	2,22	1043
Co	1400	1446	1,72	1388
Ni	485	510	0,606	627
Gd	–	2060	7,63	292
Dy	–	2920	10,2	88
MnAs	670	870	3,4	318
MnBi	620	680	3,52	630
MnSb	710	–	3,5	587
CrO ₂	515	–	2,03	386
MnOFe ₂ O ₃	410	–	5,0	573
FeOFe ₂ O ₃	480	–	4,1	858
NiOFe ₂ O ₃	270	–	2,4	858
CuOFe ₂ O ₃	135	–	1,3	728
MgOFe ₂ O ₃	110	–	1,1	713
EuO	–	1920	6,8	69
Y ₃ Fe ₅ O ₁₂	130	200	5,0	560

Ursachen für Abweichungen: Bahnmoment, Ferrimagnetismus, Leitungselektronen

Ni "=" Cu - 1e

Rechnungen: Elektron gemischt aus 46 % s- und 54 % d-Band

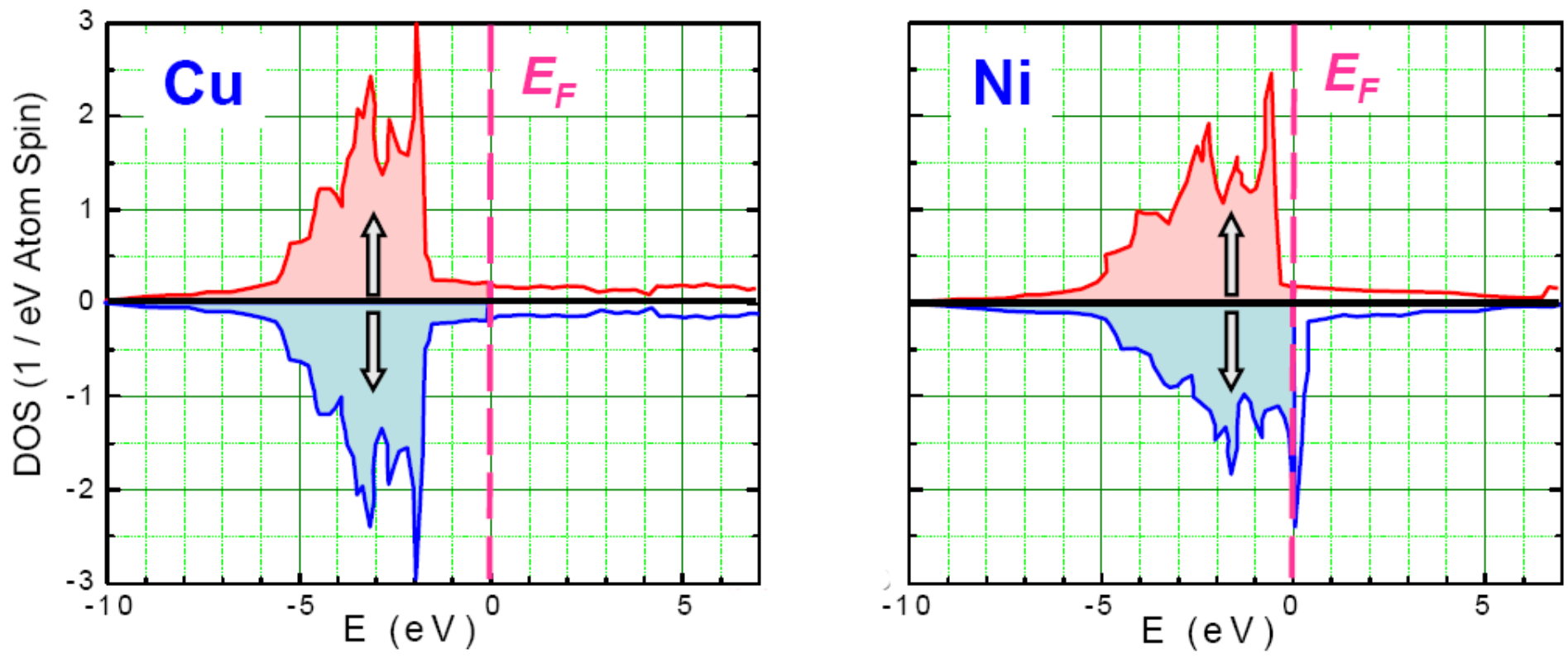
spinaufgelöste Rechnungen: besser 54 % ↓ als je 27 % ↑ und ↓



offenbar genug Gewinn an Austauschenergie um zusätzliche kinetische Energie aufzubringen

ΔE_{kin} hängt von Bandstruktur ab ...

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} "

The concept of the exchange-correlation hole

What is the probability of finding 2 electrons at distance r ?

Pauli principle and Coulomb interaction tend to keep electrons apart

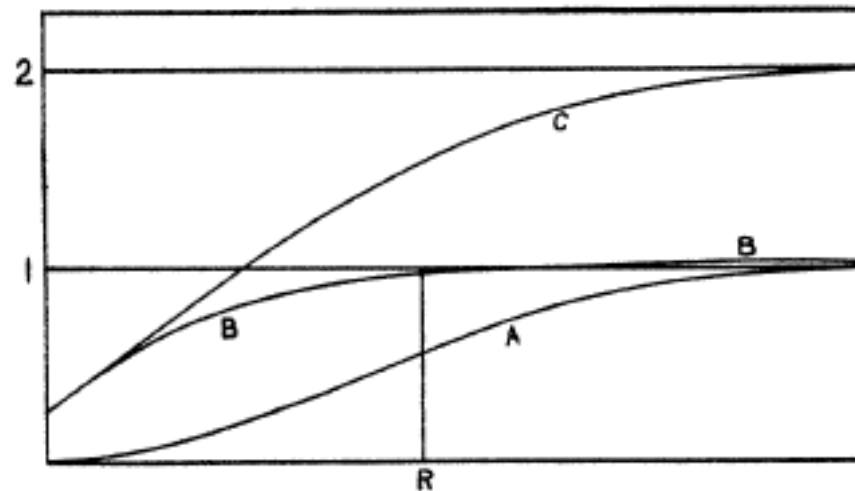
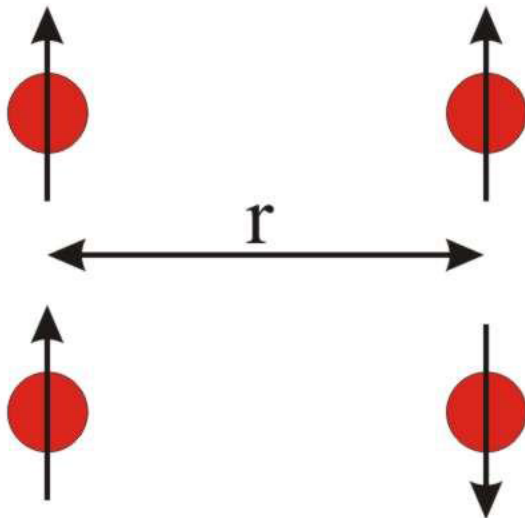
Landmark papers by Wigner & Seitz (1933) and Slater (1934, 1951)

Key result: "Exchange-correlation hole"

exchange hole around each electron - exactly one electron missing

hole dimension a few \AA

Coulomb interaction also reduces charge around antiparallel spins



C: Summe
beider
Richtungen

A: gleiche
B: andere
Spinrichtung

FIG. 6. Density of charge near an electron, plotted against internuclear distance. Curve *A* for another electron of same spin, *B* of opposite spin, *C* for both spins combined. One unit of density represents maximum allowable value for electron of one spin. Integrated deficiency of charge, for curves *A* and *C*, one electron unit; for *B*, zero.

Austauschw. im FEG: Idee einer Berechnung

Elektronen 1 & 2 mit Spins \uparrow, \uparrow

\Rightarrow Ortswellenfkt. antisymmetrisch

$$\begin{aligned}\Psi_{12} &= \frac{1}{\sqrt{2}V} \left(\exp(i\vec{k}_1\vec{r}_1) \exp(i\vec{k}_2\vec{r}_2) - \exp(i\vec{k}_1\vec{r}_2) \exp(i\vec{k}_2\vec{r}_1) \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}V} \exp(i(\vec{k}_1\vec{r}_1 + \vec{k}_2\vec{r}_2)) \cdot \left[1 - \exp(-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)) \right]\end{aligned}$$

Wahrsch., zugleich ein e^- in $d^3\vec{r}_1$ und $d^3\vec{r}_2$ zu finden:

$$|\Psi_{12}|^2 = \frac{1}{V^2} \left[1 - \cos[(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)] \right]$$

\Rightarrow spingleiche e^- anders verteilt als solche
mit entgegengesetzte Spins

⇒ Energie des Kristalls hängt von Spindichten ab

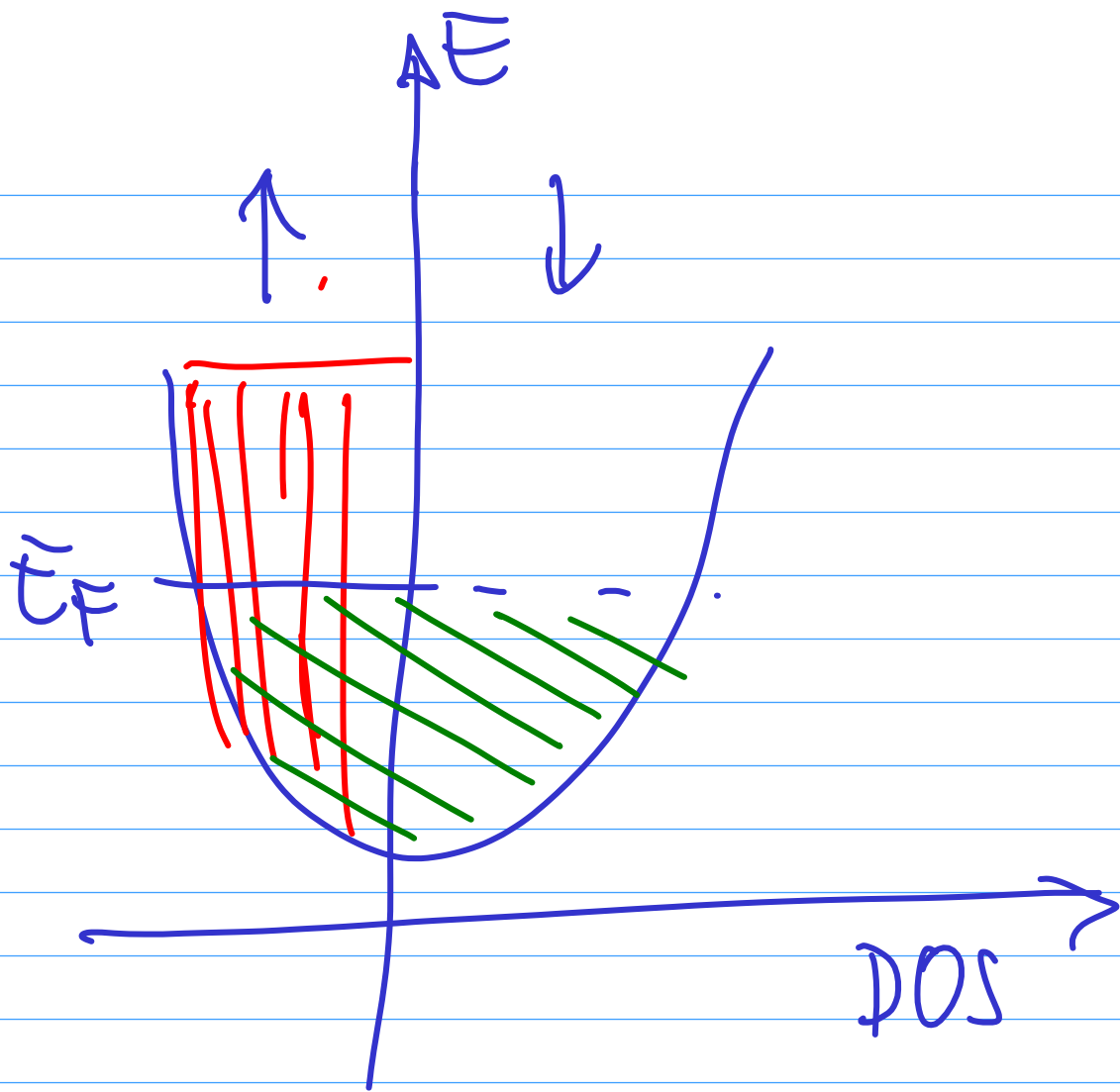
⇒ kollektive Austausch WW

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$

$$J^A = e \frac{n}{2} \left\langle 1 - \cos((\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}) \right\rangle_{\vec{k}}$$

$\langle \rangle_{\vec{k}} \rightarrow$ Skript Punkte

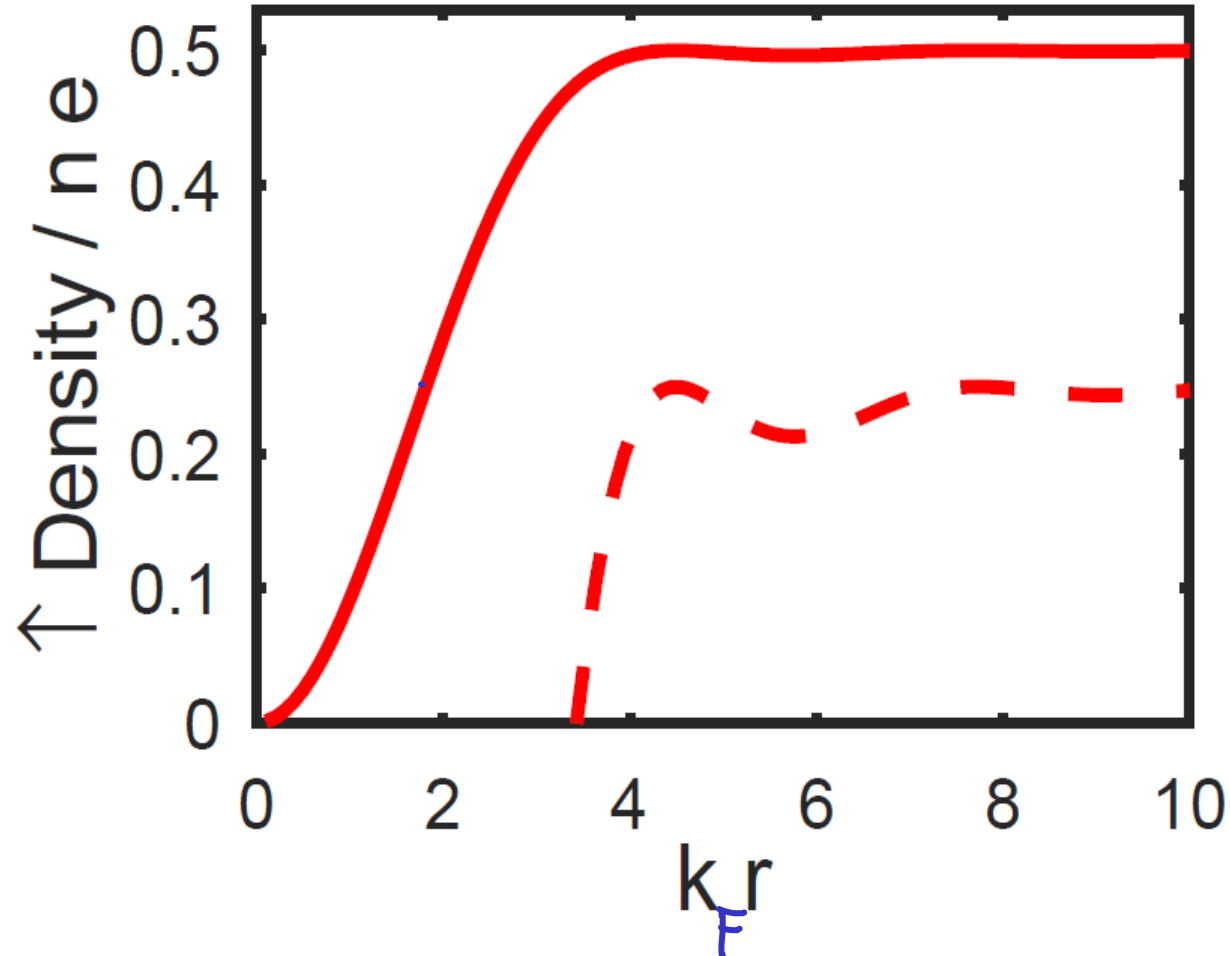
$$J^A = e \frac{n}{2} \left(1 - \frac{9 (\sin(x) - x \cos(x))^2}{x^6} \right); \quad x = k_F \cdot r$$



Itineranter Austausch

The Exchange Hole

austauschloch for RB Wed Nov 27 11:15:4



Normierte effektive Ladungsdichte um ein Elektron im FEG
Austausch reduziert Dichte von Elektronen gleichen Spins