

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:

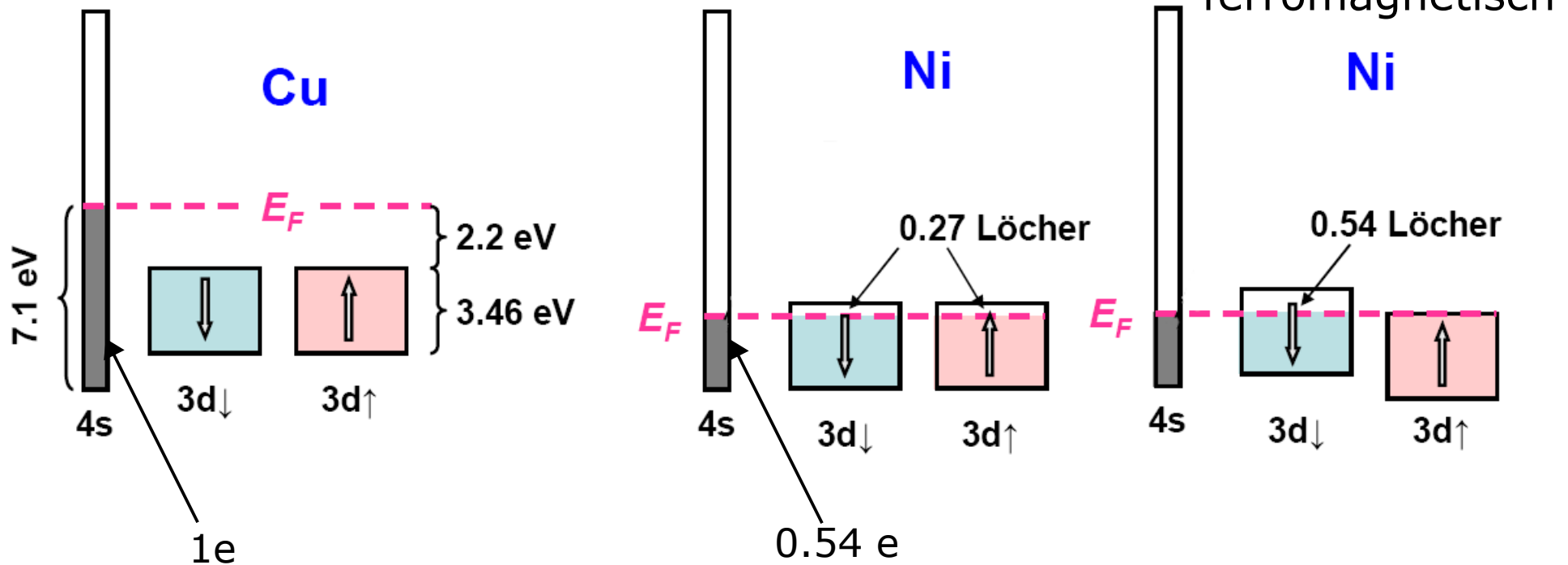
Elektron gemischt aus 46 % s- und 54 % d-Band

spinaufgelöste Rechnungen:

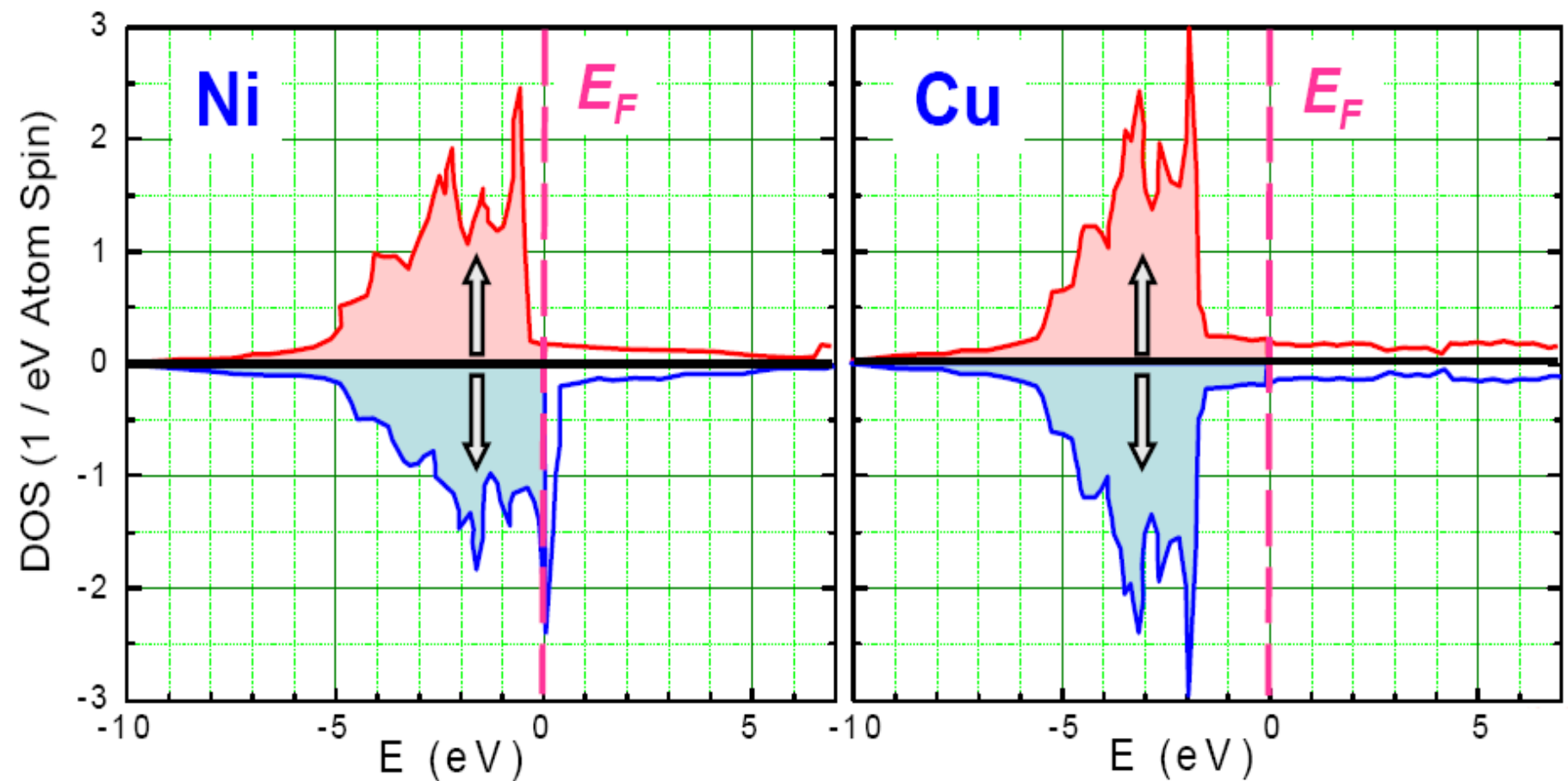
besser 54 % ↓ als je 27 % ↑ und ↓

paramagnetisch

ferromagnetisch



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)

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

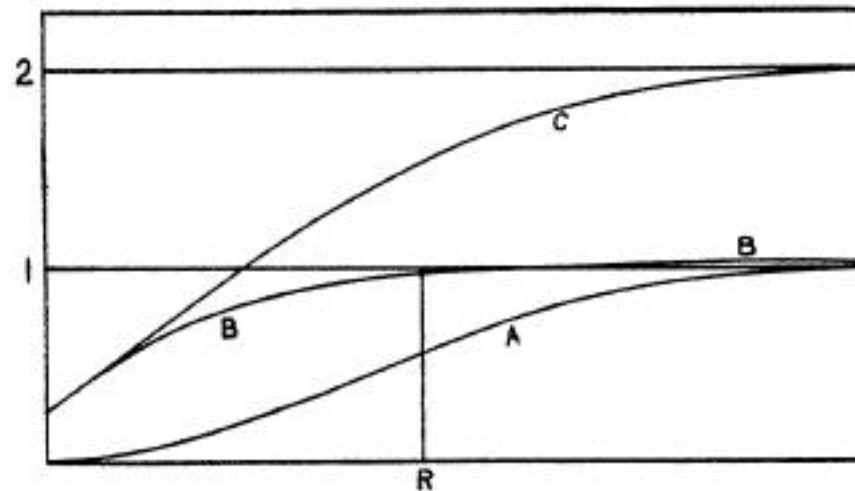
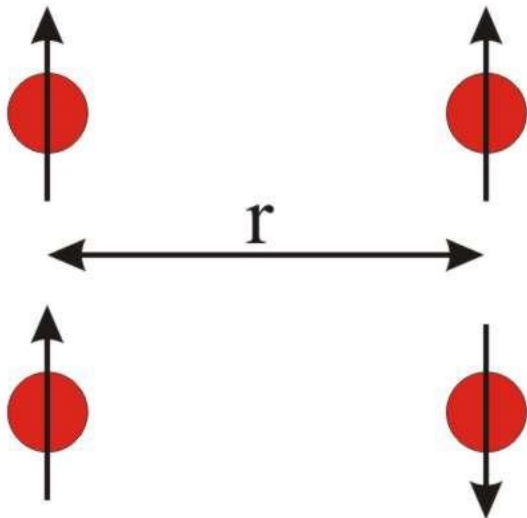
Landmark papers by Wigner & Seitz (1933) and Slater (1934, 1951)

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

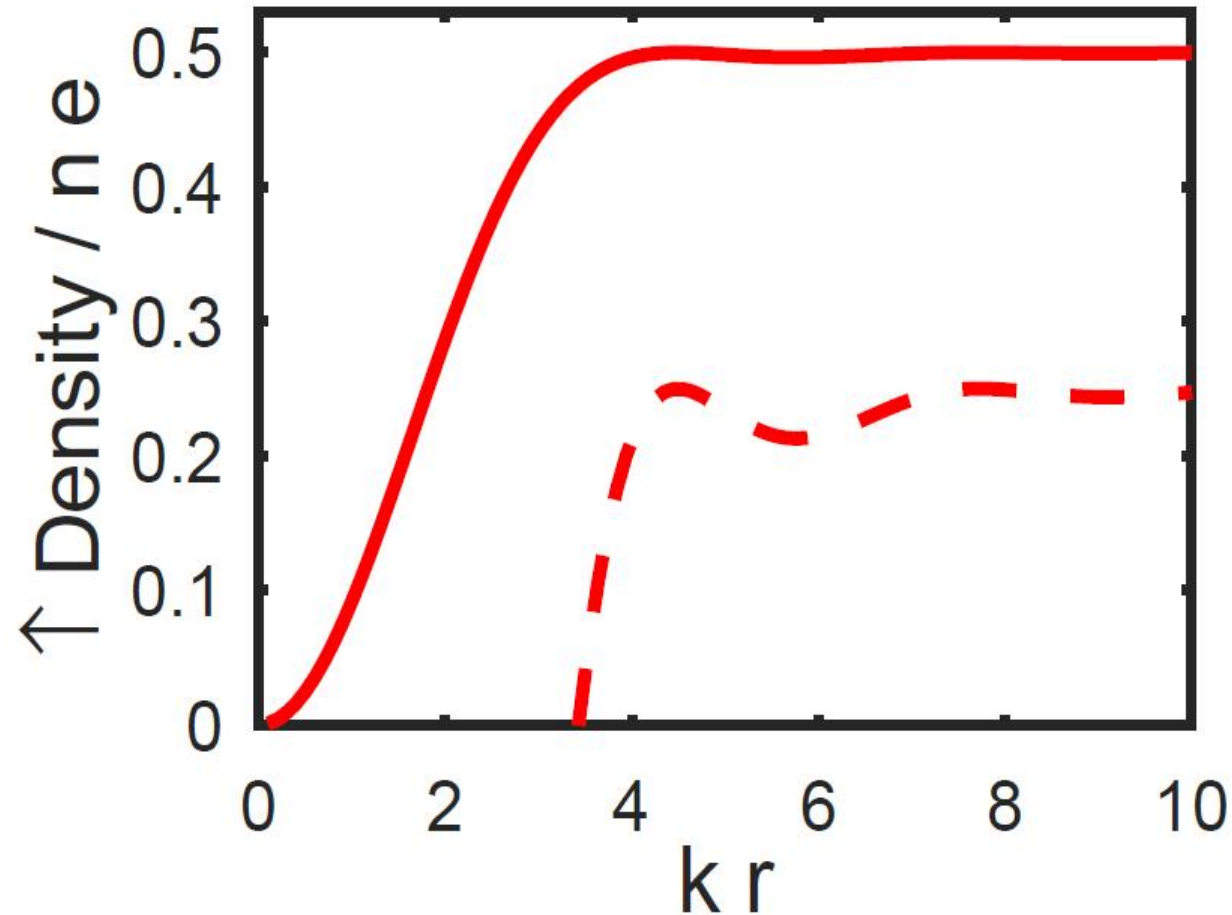
A: gleiche
B: andere
Spinrichtung

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.

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

Stoner-Wohlfarth:

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

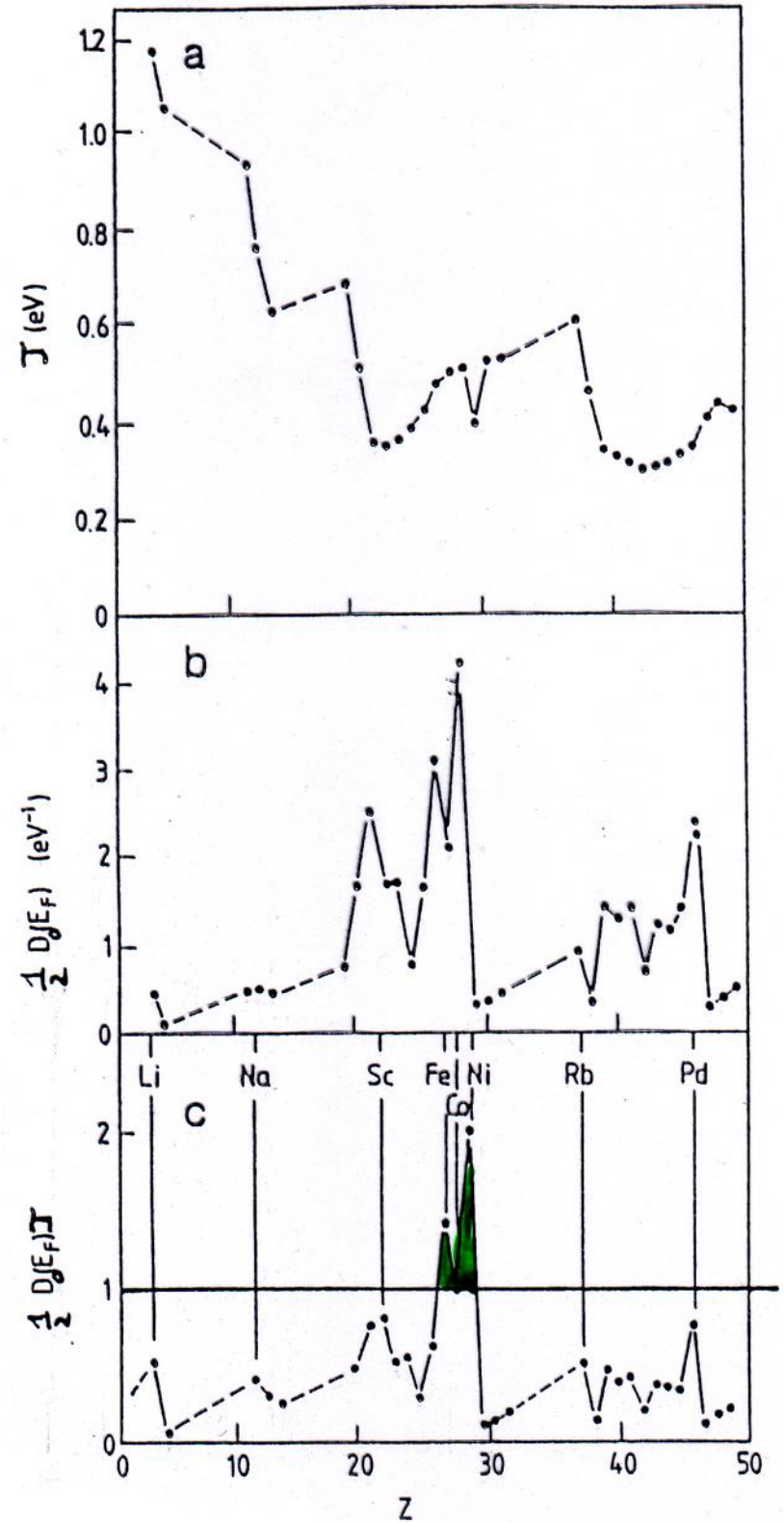
Austauschintegral
 J

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

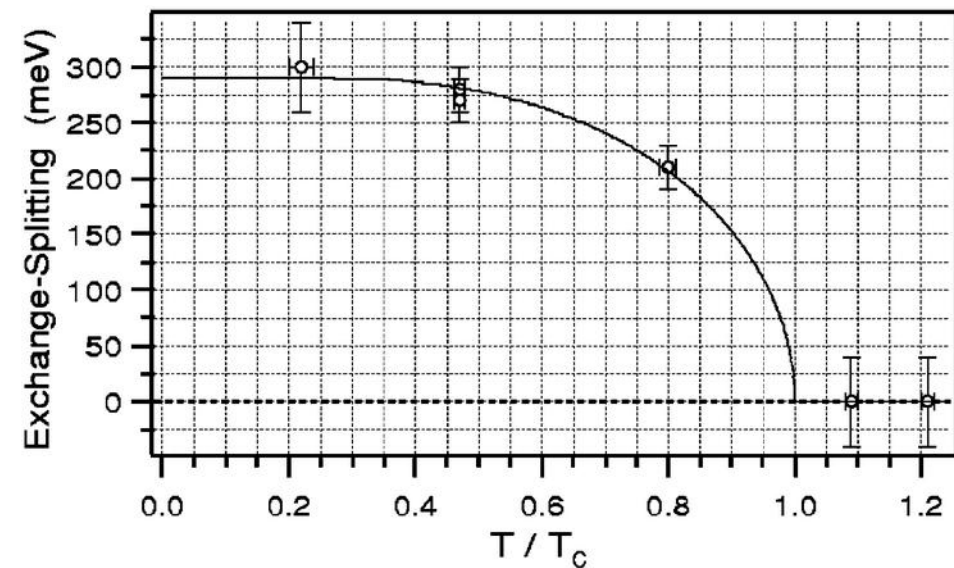
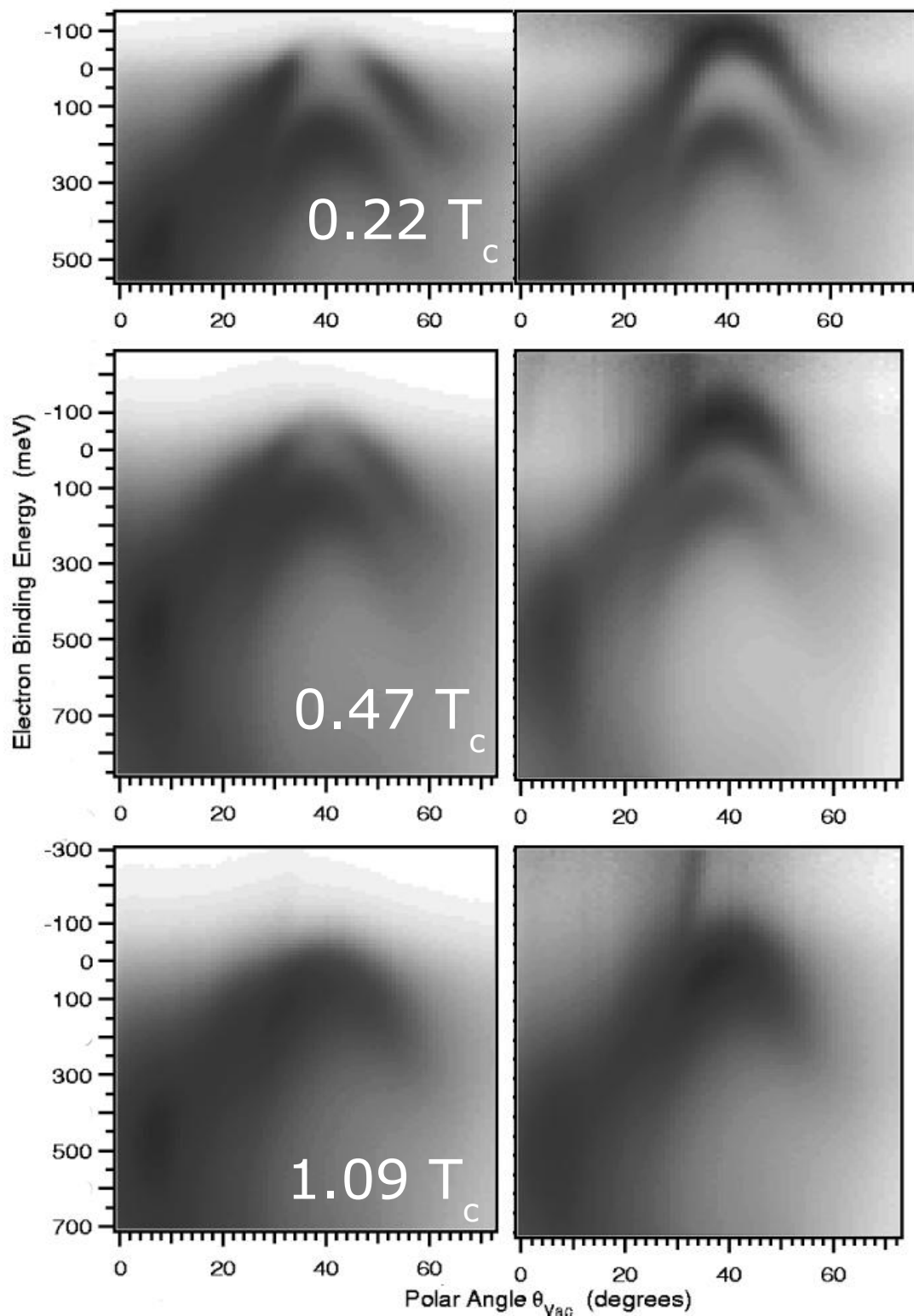
Überlapp = 0 \rightarrow $W = 0$ \rightarrow $F(M)$ ist Stufenfunktion \rightarrow Stonerkriterium
immer erfüllt \rightarrow maximales Moment – Hund'sche Regel 1

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

ARPES

left: raw data

right: corrected for $f(E)$



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

Magnetokristalline Anisotropie

Technische Anwendungen (Kompass, Tonband, hard disks) nutzen

MAE

Reduzierte Dimensionalität/Symmetrie kann MAE um

Größenordnungen ändern (→ 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

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.

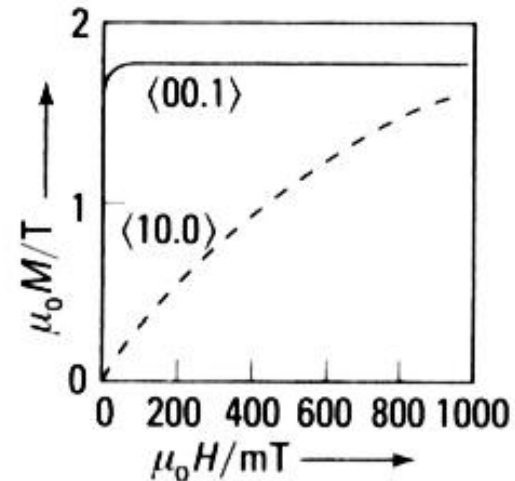
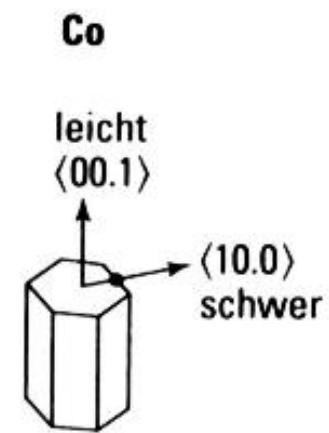
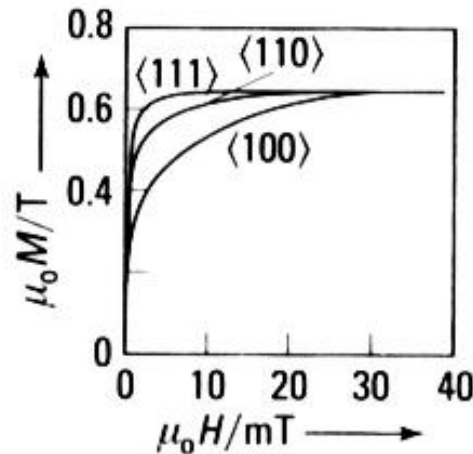
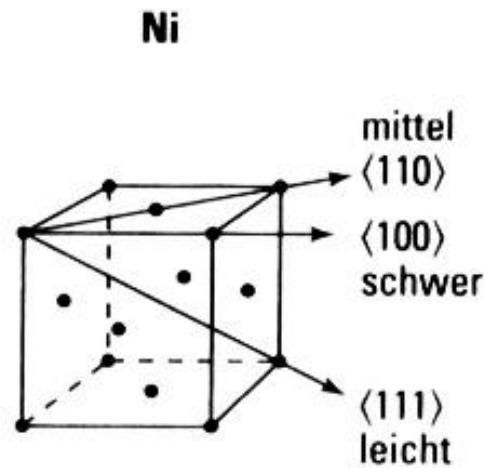
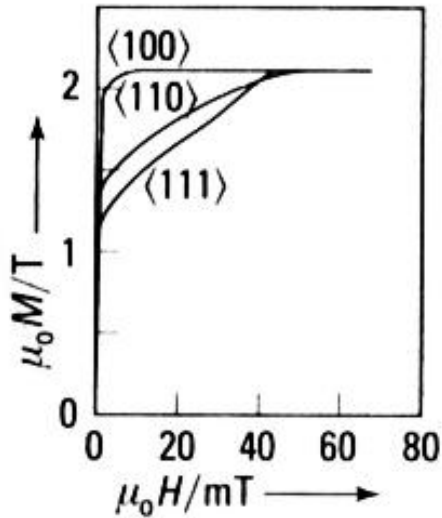
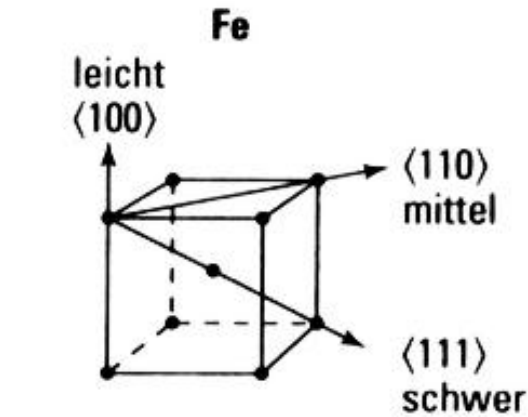
Leichte Achse (*easy axis*):

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} :

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

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

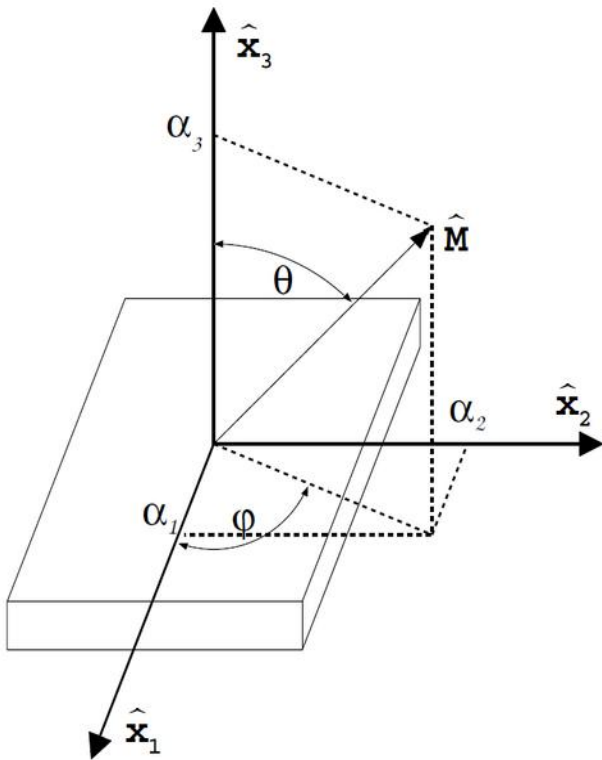
Magnetokristalline Anisotropie

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)

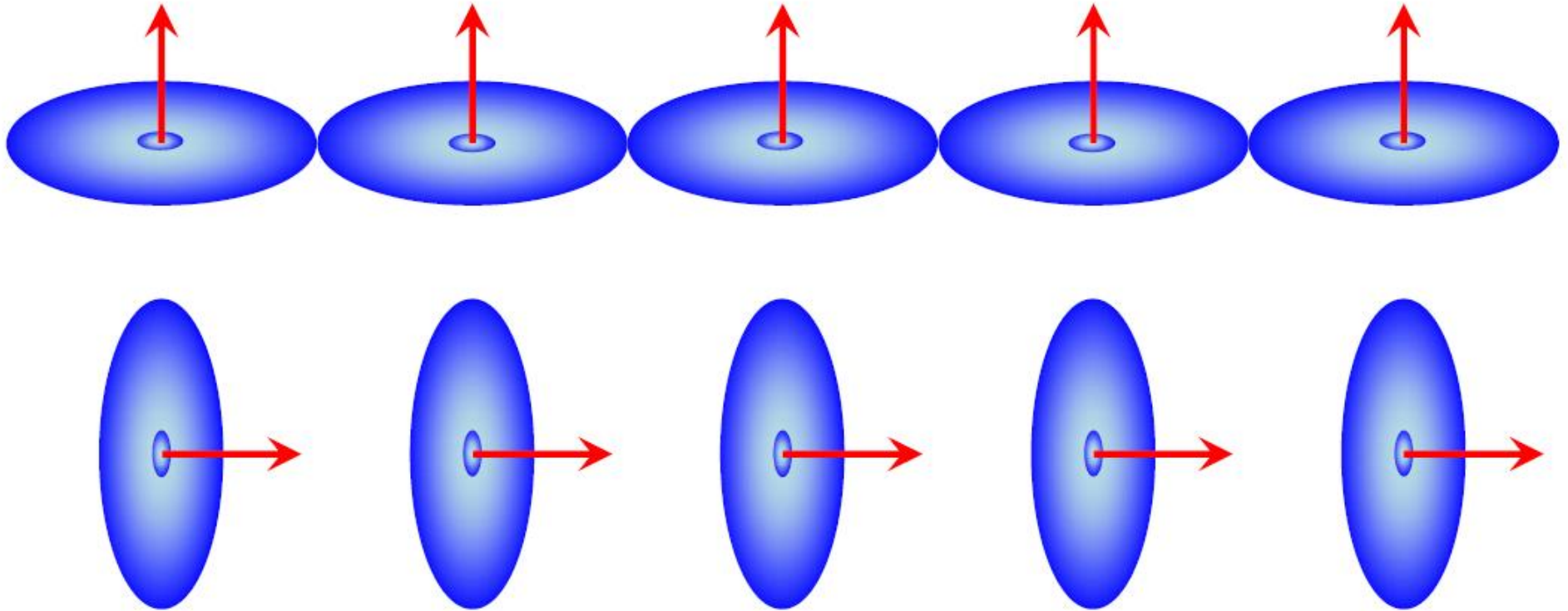
Anisotropiekonstanten

		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

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

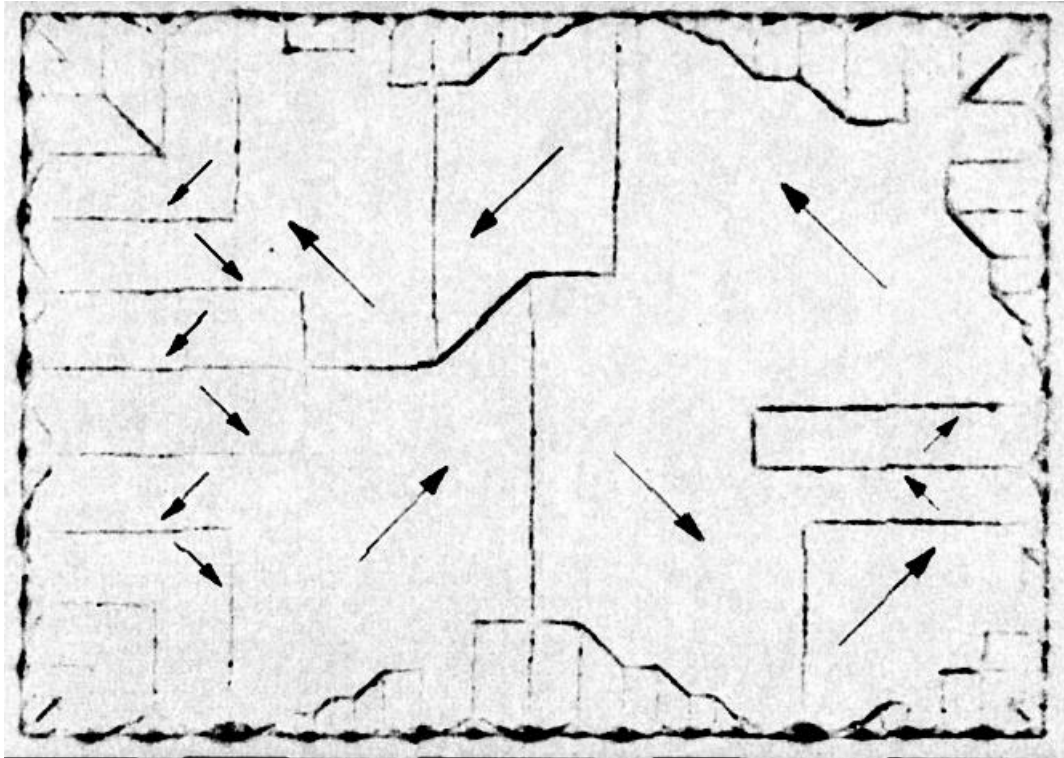
Danach: häufige Änderung des Erdmagnetfelds und Plattentektonik
große MAE verhinderte Ummagnetisierung

heute: Hämatit als "Magnetnadel" zur Untersuchung der Plattentektonik

M von Ferromagneten ist viel kleiner als zu erwarten ...

Domänen

Nickel



(Negativbilder)

Figure 24 Ferromagnetic domain pattern on a single crystal platelet of nickel. The domain boundaries are made visible by the Bitter magnetic powder pattern technique. The direction of magnetization within a domain is determined by observing growth or contraction of the domain in a magnetic field. (After R. W. De Blois.)

Eisenwhisker

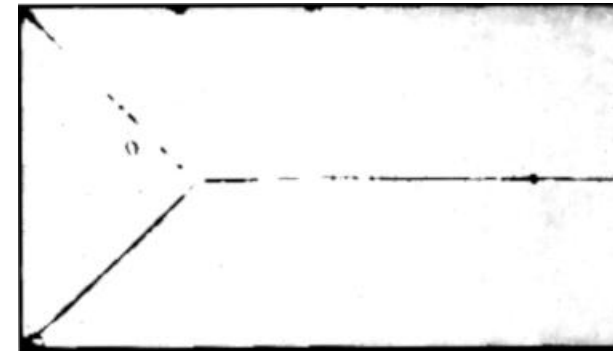
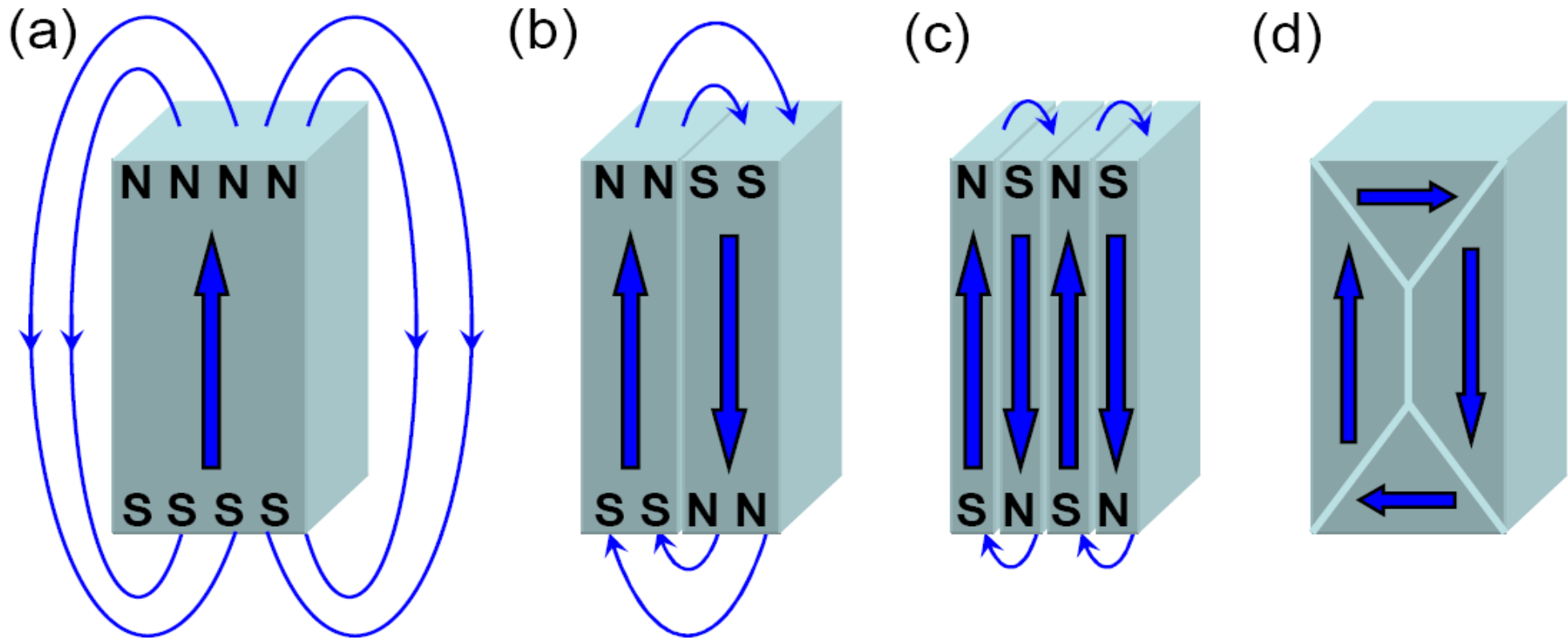


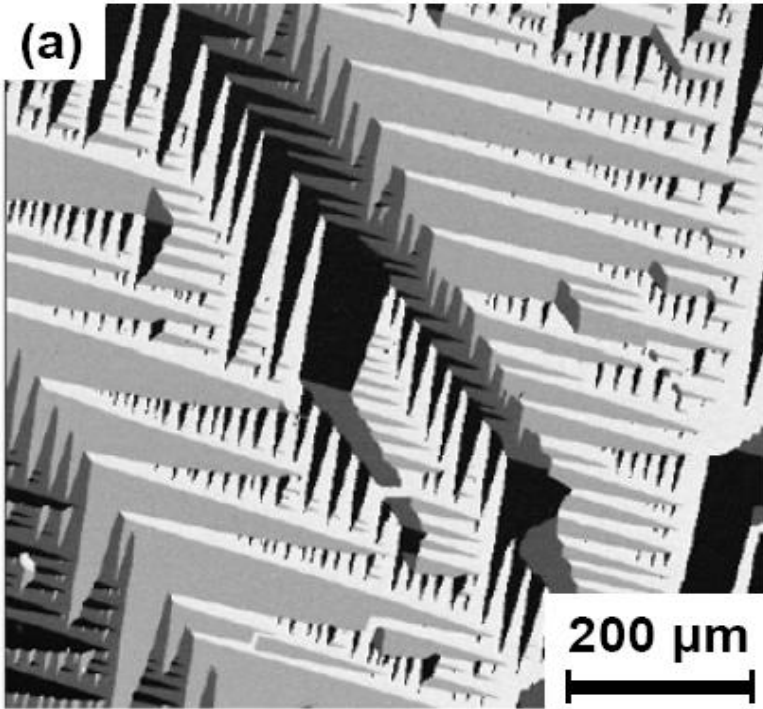
Figure 31 Domain of closure at the end of a single crystal iron whisker. The face is a (100) plane; the whisker axis is [001]. (Courtesy of R. V. Coleman, C. G. Scott, and A. Isin.)

Abschlussdomänen

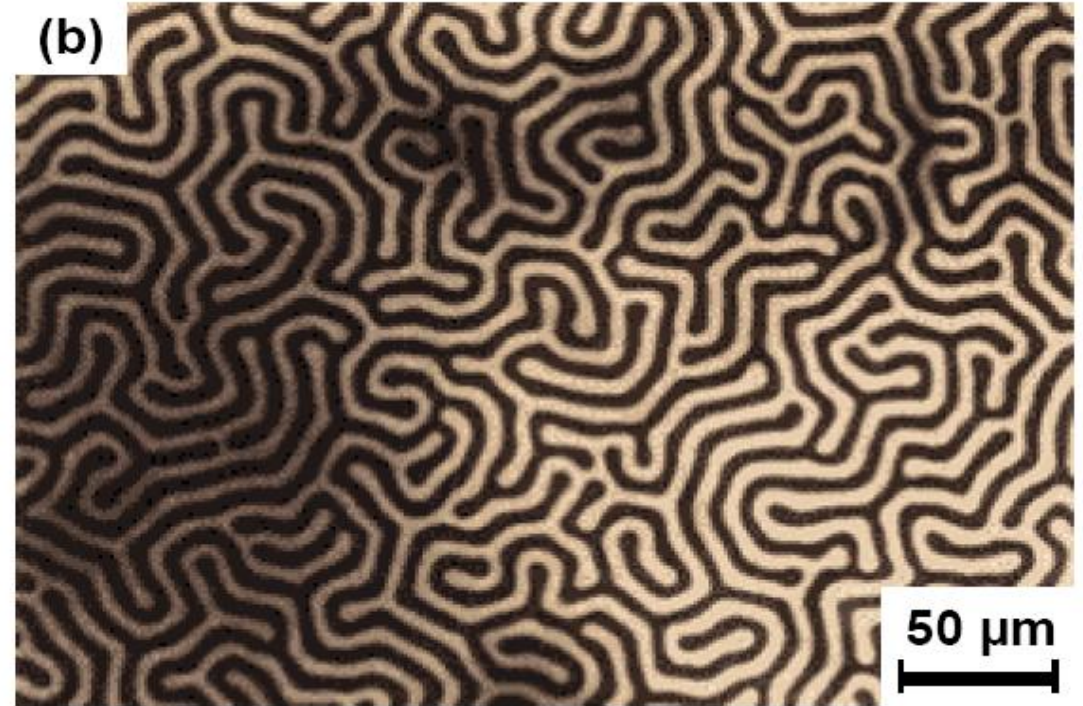
$$U_{\text{Feld}} \sim \int dV B^2$$



Mehr Domänen

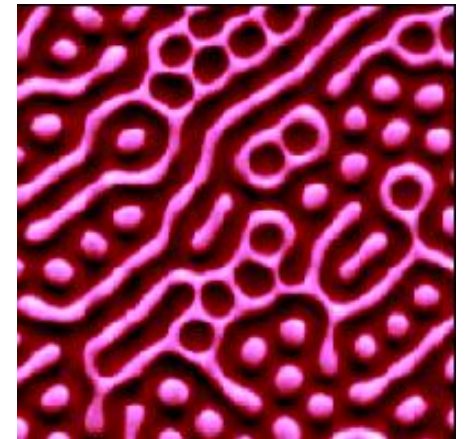


Fe (100) Film
(spinpolarisiertes SEM)



Amorpher Gd-Co-Film
(Kerr-Mikroskopie)

Granat



Fe: Domänen mit und ohne externes Feld

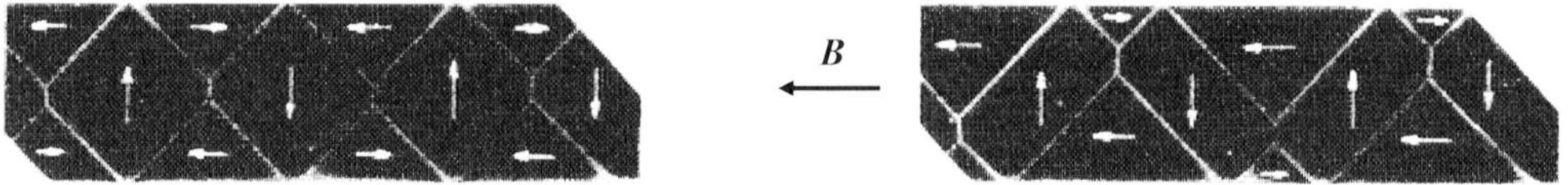
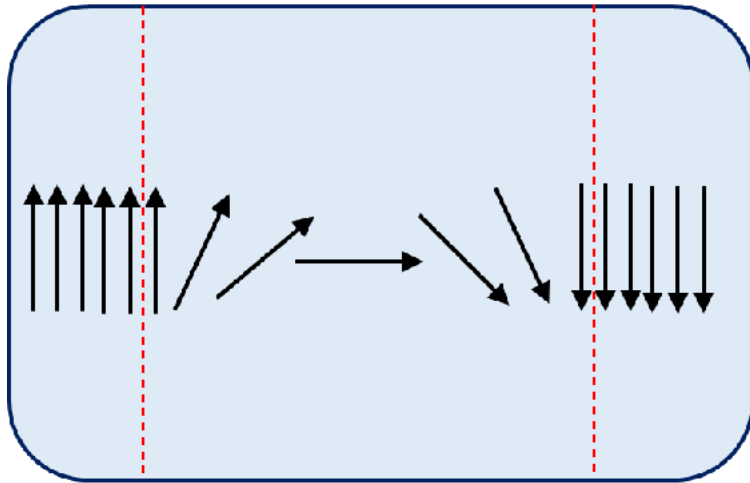


Bild 12.15: Richtung der spontanen Magnetisierung in den Domänen eines 50 μm breiten Eiseneinkristalls. Die Domänenwände sind mit Hilfe eines feinen magnetischen Pulvers sichtbar gemacht. Das linke Bild wurde ohne, das rechte mit Magnetfeld in angegebener Richtung aufgenommen. (Nach R.W. DeBois, C.D. Graham J. Appl. Phys. **29**, 931 (1958)).

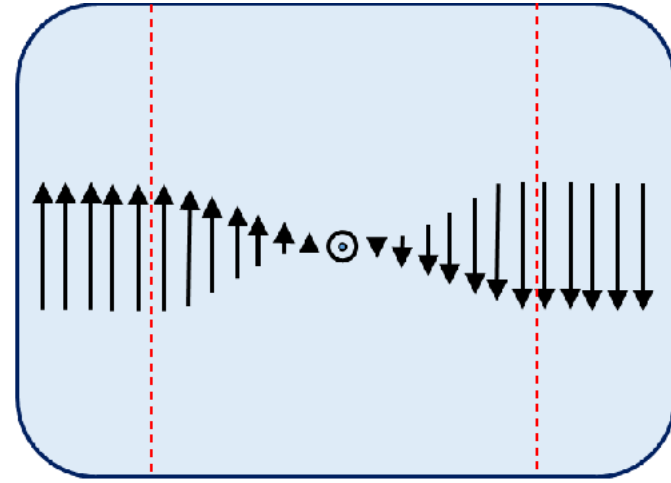
Domänenwände

Bloch: M rotiert um Achse senkrecht zur D.wand

Néel: M rotiert um Achse parallel zur D.wand



Néel wall



Bloch wall

Domänenwände

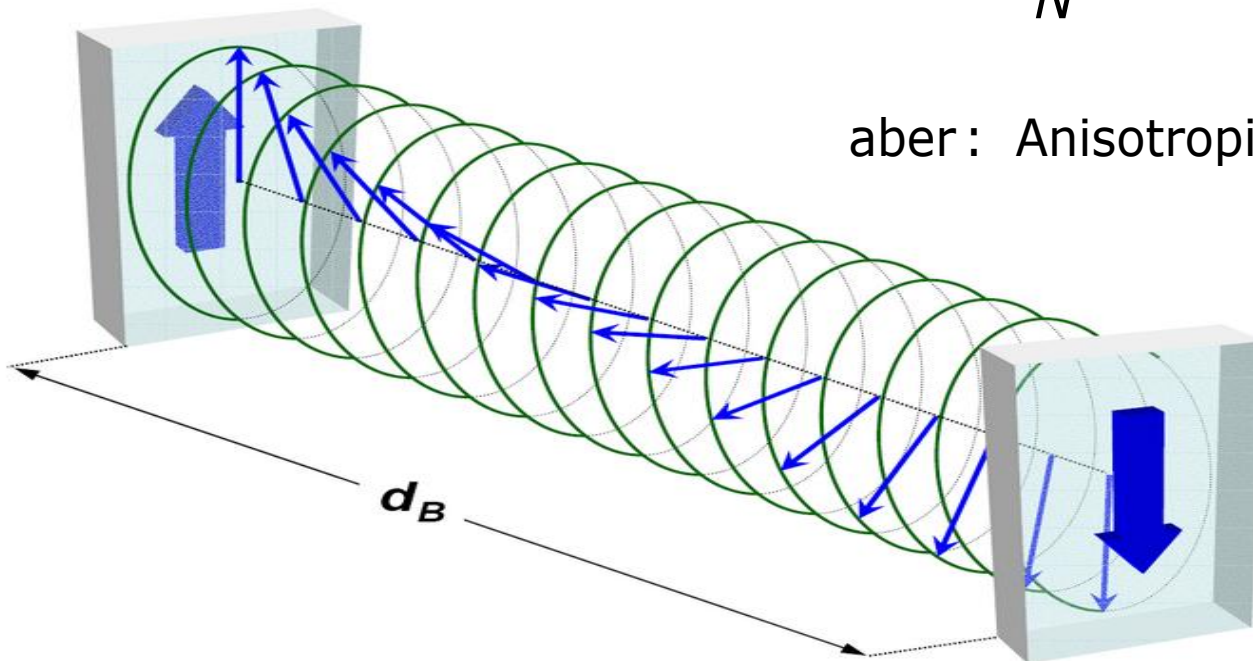
Spin-Spin-Wechselwirkung: $E \propto J \vec{S}_1 \vec{S}_2$

klassisch: $E \propto \cos(\phi) \approx 1 - \frac{1}{2}\phi^2 \Rightarrow E \propto JS^2\phi^2$

Blochwand: $\Delta\phi = \pi$; N Schritte à $\frac{\pi}{N}$

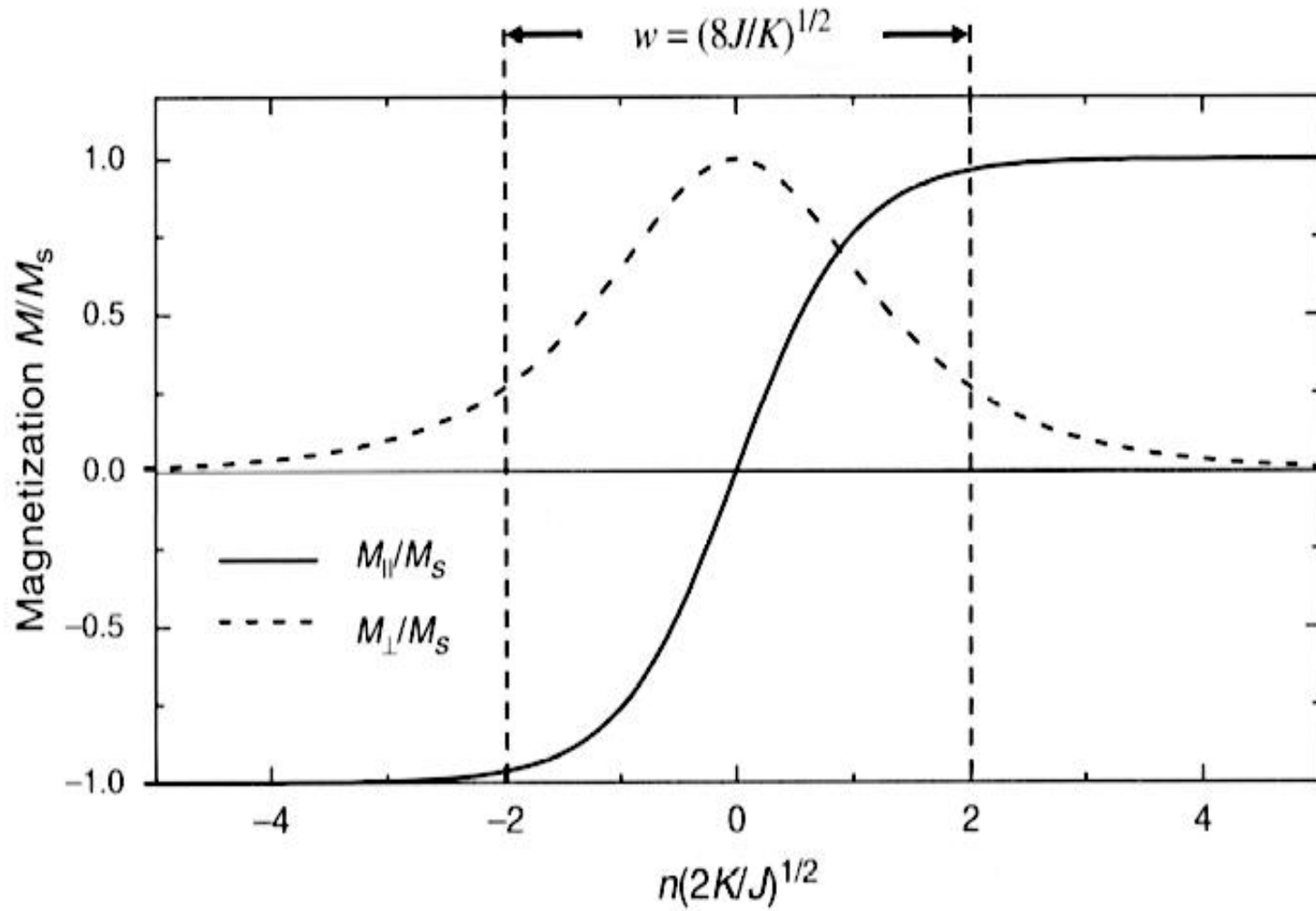
$E_{ges} = NE \propto JS^2 \frac{\pi^2}{N} \Rightarrow E_{ges} \rightarrow 0 \text{ for } N \rightarrow \infty$

aber: Anisotropieenergie



Spinorientierung in
einer 180° Blochwand

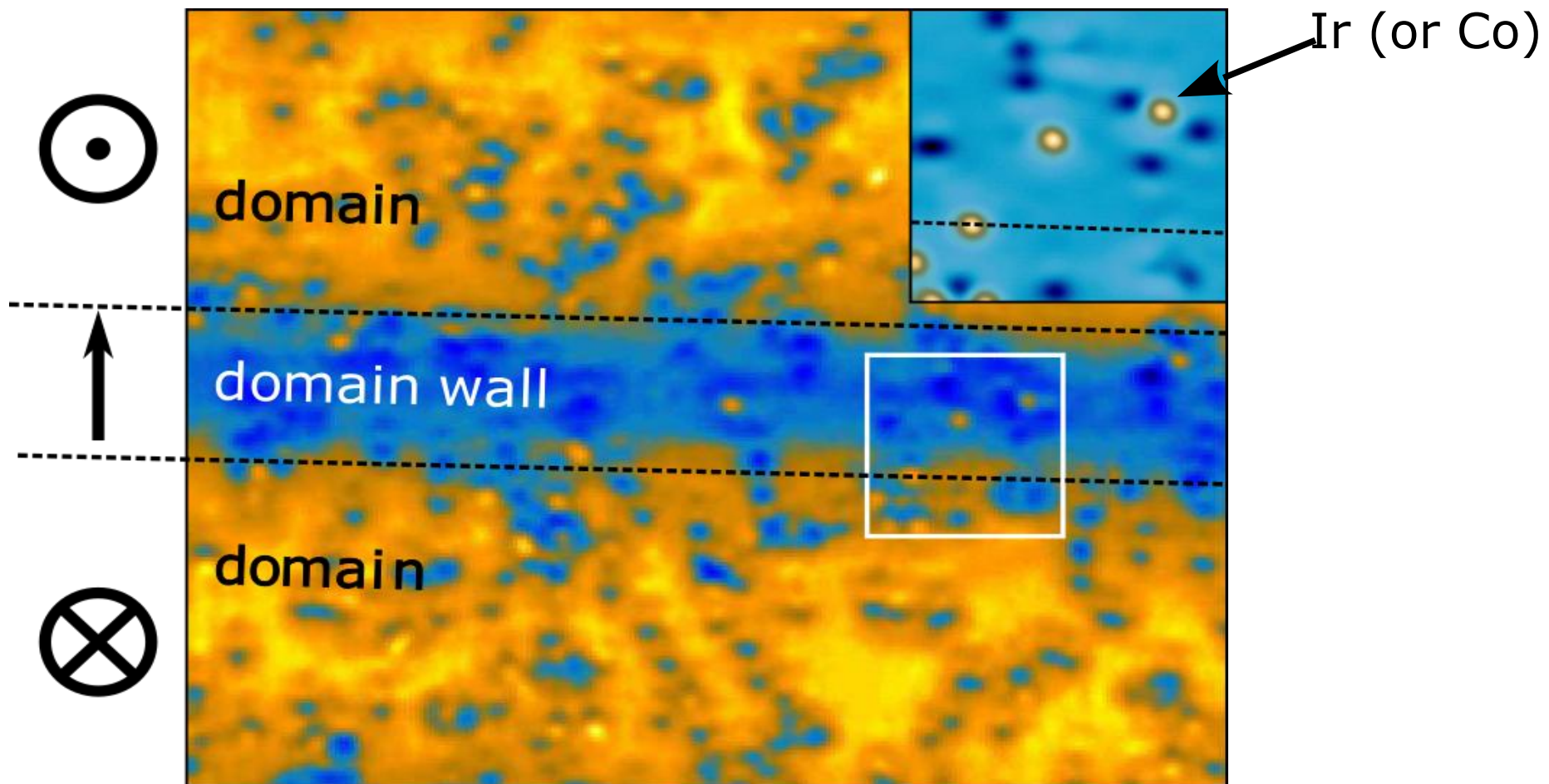
180° Blochwand (Ibach Lüth)



Ir (& Co) on Fe bilayer on W(110)

Tunneling Anisotropic MR of Co: Néel et al., PRL **110**, 037202 (2013)

Here: heavy Ir, contact, W tip, no magnetostriction



dI/dV map at 70 mV, 52 x 42 nm²

$$\text{AMR} = (G_{\text{domain}} - G_{\text{wall}}) / G_{\text{domain}}$$

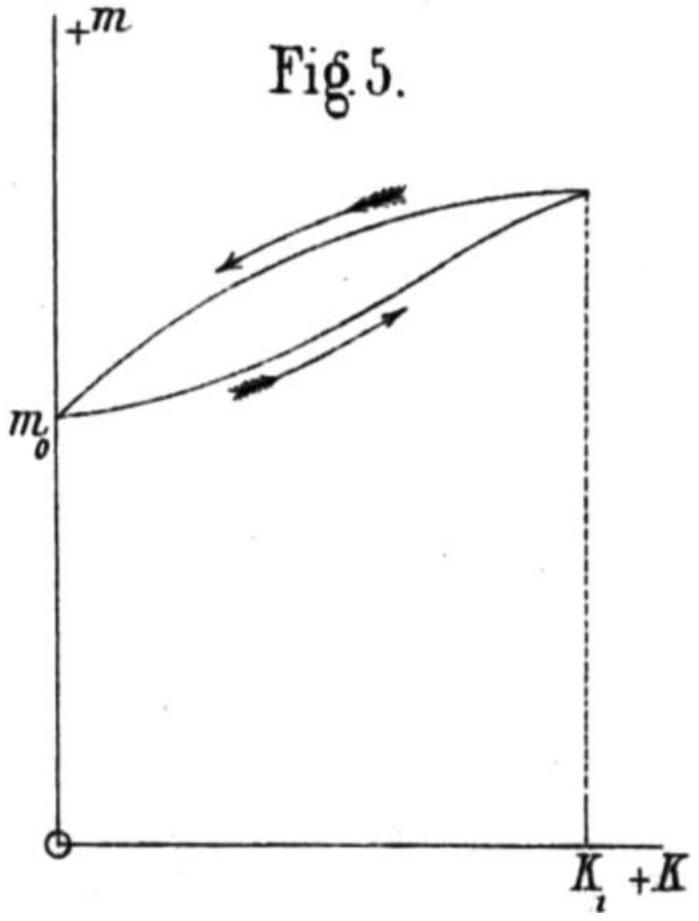
Magnetische Hysterese in einem Ferromagnetikum

Annalen der Physik und Chemie **20**, 814 (1881)

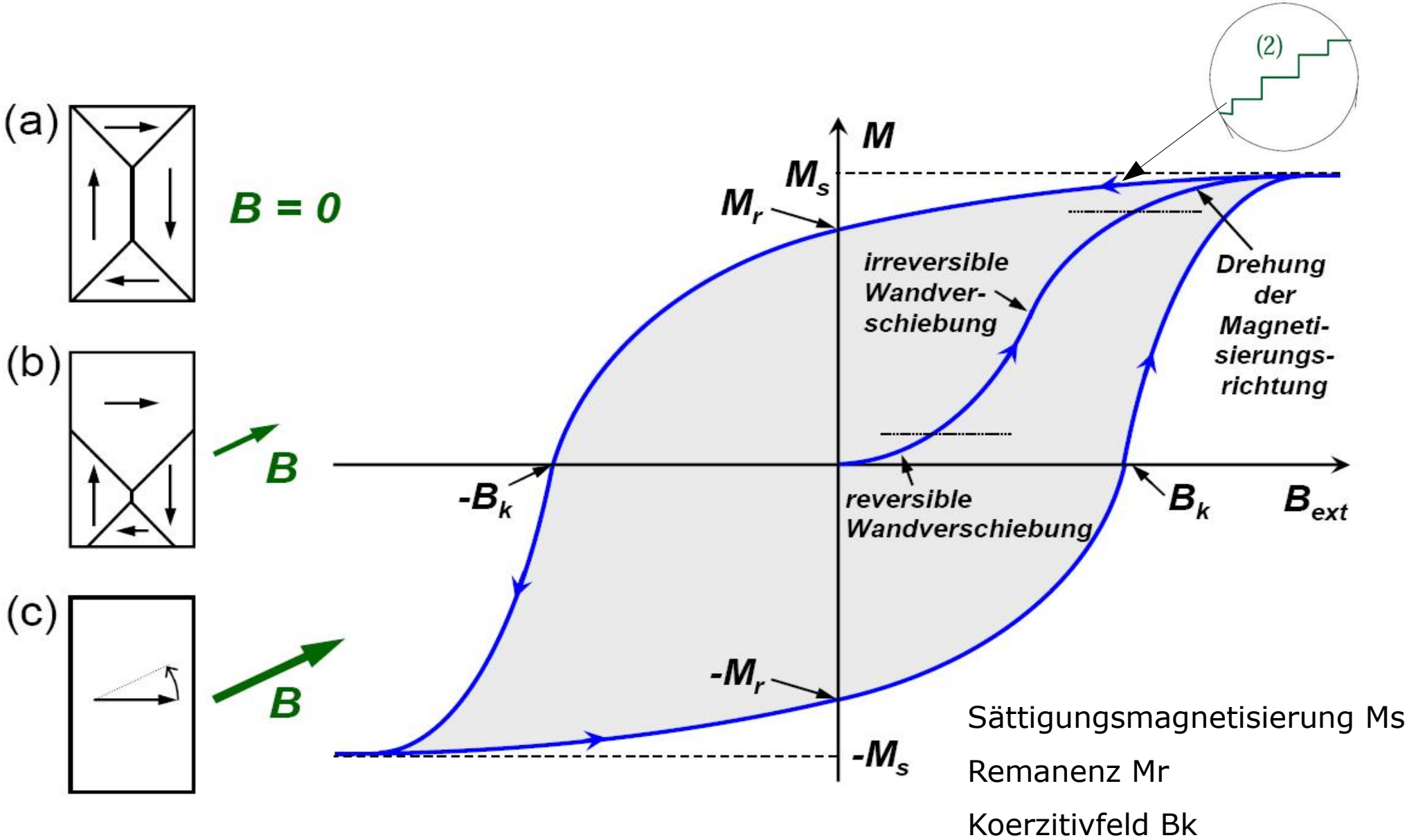


Prof. Dr. Warburg

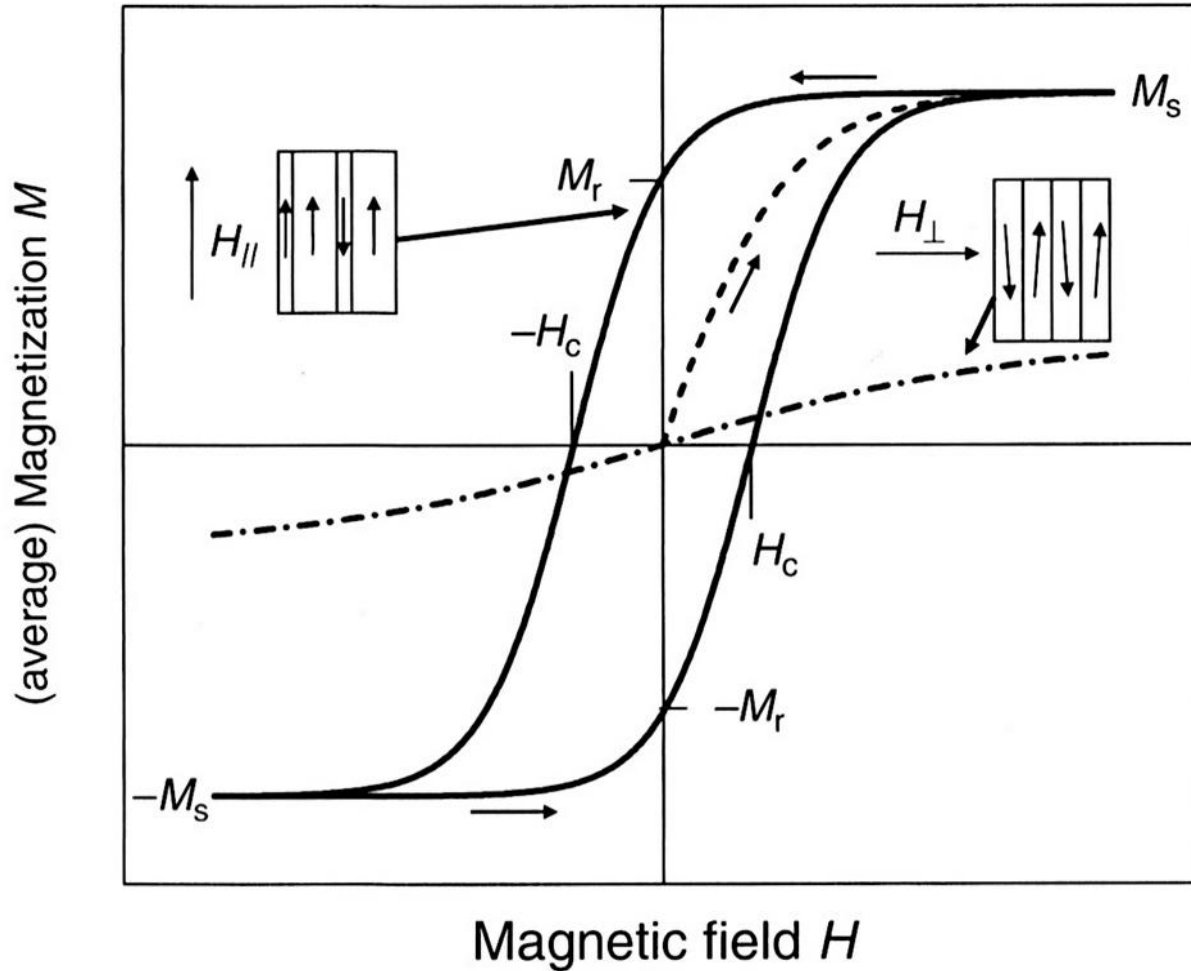
Emil G. Warburg
(1846 - 1931)



Ferromagnetische Hysterese



Mittlere Magnetisierung $M(H)$ eines Ferromagneten mit einer einzigen leichten Achse (hcp Cobalt) im äußeren Feld H



schematische Magnetisierungszyklus
gestrichelt: anfängliche M (Neukurve)
ausgezogen:

H parallel zur leichten Achse
→ ausgeprägte Hysterese

strichpunktiert:

H senkrecht zur leichten Achse
→ keine deutliche Hysterese

H_c : Koerzitivfeldstärke

M_r : Remanenz

M_s : Sättigungsmagnetisierung

Domänengrenzen haften an **Kristallfehlern** $\Rightarrow H_c$ wächst

Dissipation: eingeschlossene Fläche

klein / groß: magnetisch weich / hart

Weichmagnete

Transformatoren und Motoren.

breite Domänenwände, leicht beweglich

Permalloy, NiFe-Legierung, ca. 80:20, $\mu_0 H_c \approx 2 \cdot 10^{-7} \text{ T}$

Hartmagnete

Permanentmagnete

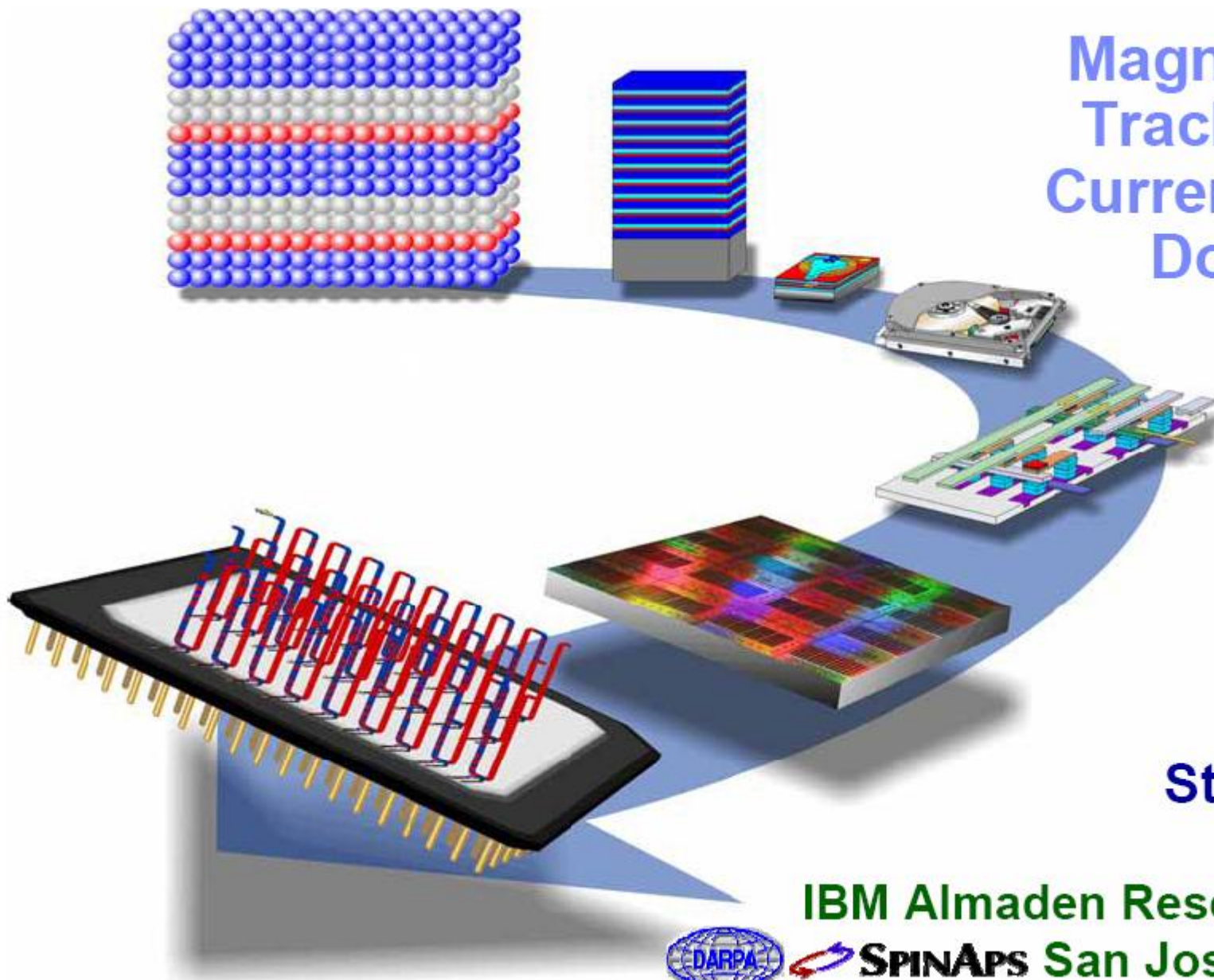
dünne Domänenwände, stark "gepinnt"

$\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ mit $T_C = 585 \text{ K}$, $\mu_0 H_c \approx 1,2 \text{ T}$

Magnetostriktion

magnetokristalline Anisotropie \Rightarrow magnetoelastische Kopplung

Magnetic Race-Track Memory: Current Induced Domain Wall Motion!

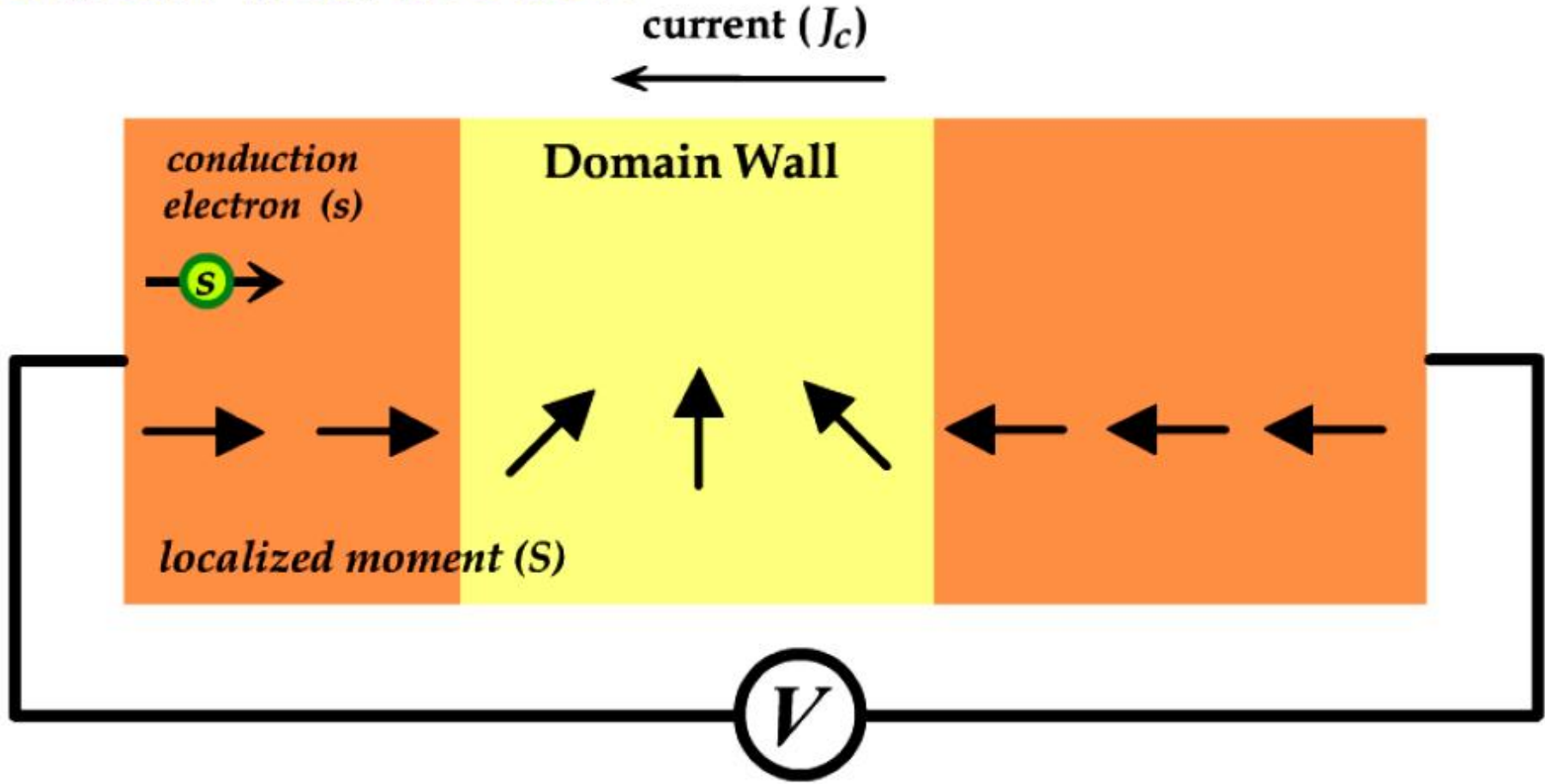


Stuart Parkin
IBM Fellow

IBM Almaden Research Center
SPINAPS San Jose, California



Domain wall motion

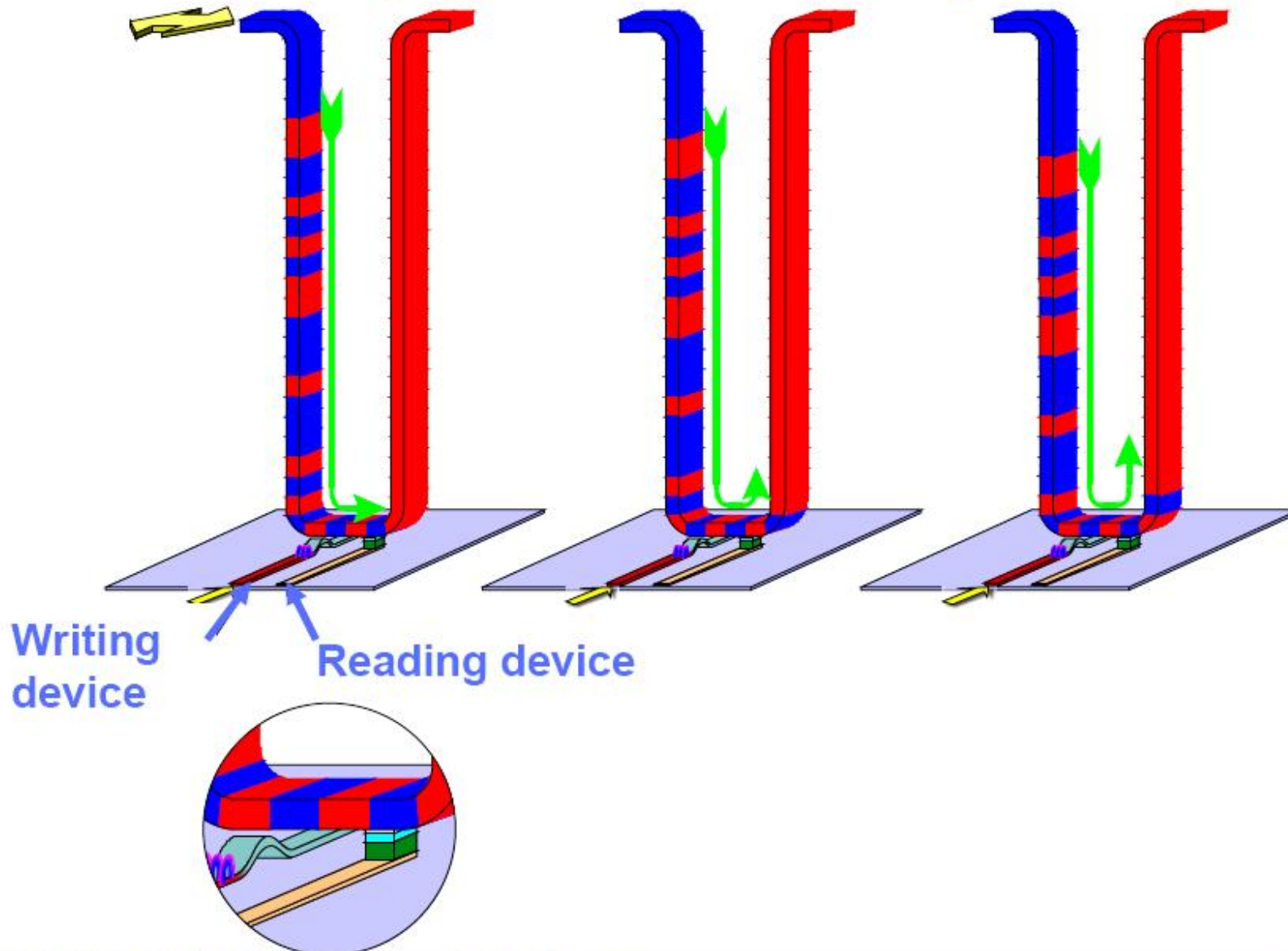


Current \rightarrow torque on DW $\frac{\partial \theta}{\partial t} \neq 0, \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0$ **Massless motion!!**

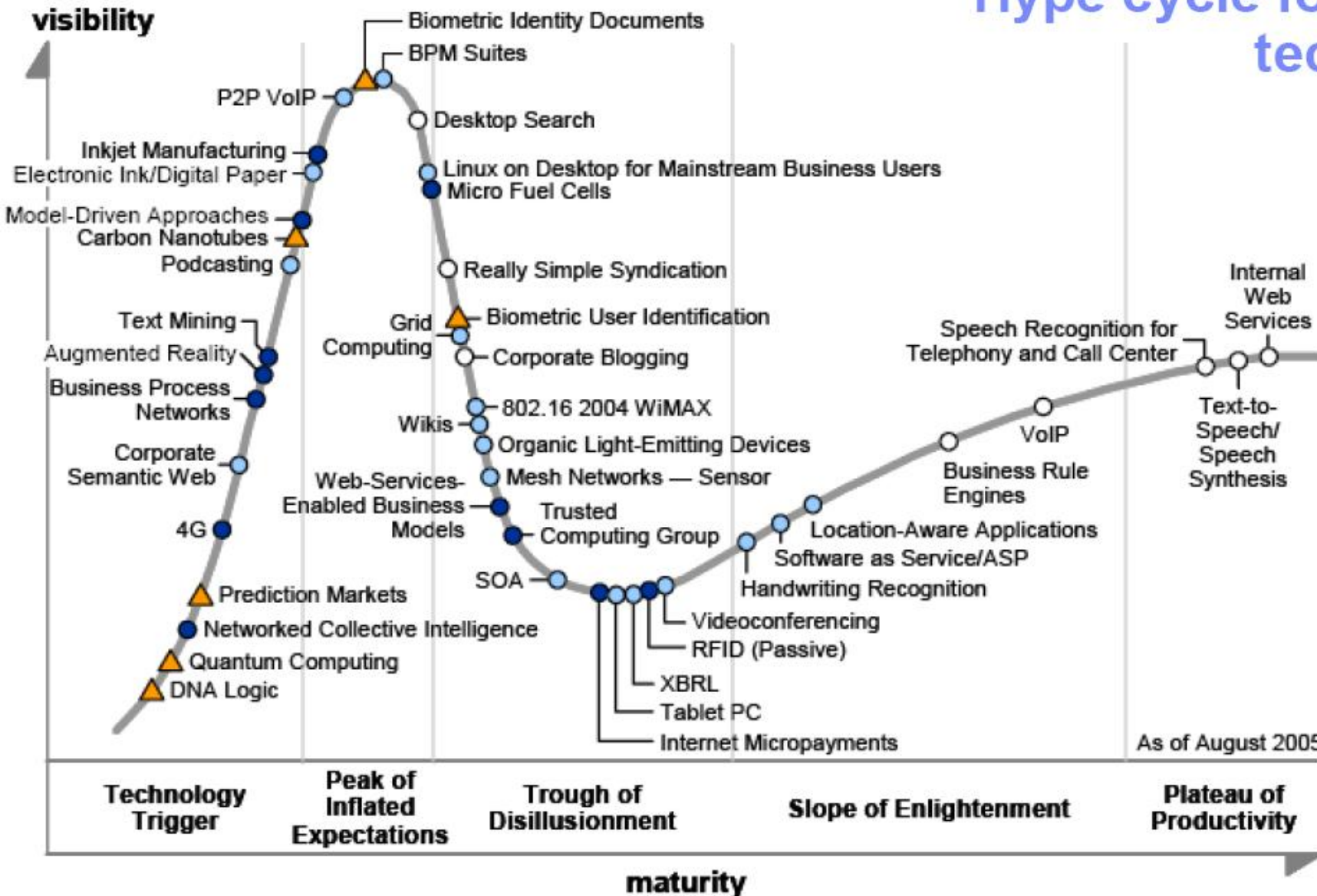
(Magnetic field \rightarrow pressure on DW, $\frac{\partial \theta}{\partial t} \neq 0, \frac{\partial \phi}{\partial t} \neq 0$) *From Sadamichi Maekawa*

Magnetic Shift Register Memory

- Nanosecond long current pulses push domain walls around race-track
- due to a spin torque from transfer of spin angular momentum



Hype cycle for emerging technologies!



Plateau will be reached in:

- less than 2 years
- 2 to 5 years
- 5 to 10 years
- ▲ more than 10 years
- ⊗ obsolete before plateau

Source: Gerstner, August 2005

Magnetit $\text{FeO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3 = \text{Fe}_3\text{O}_4$

2 Ferriionen Fe^{3+} mit $S = 5/2$, 1 Ferroion Fe^{2+} mit $S = 2$

L im Kristall i. w. unterdrückt

man erwartet also: $2 \times 5 \mu_B + 4 \mu_B = 14 \mu_B$

Experiment zeigt ca. $4,1 \mu_B$

Antiparallele Spins ergeben effektive Magnetisierung

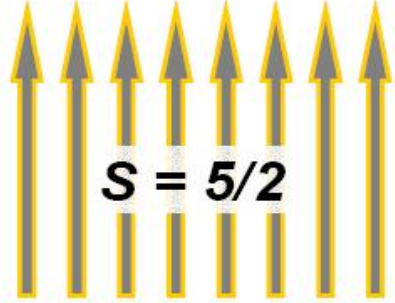
Ferrimagnetismus

Ferrite $\text{MO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$ mit $M = \text{Zn}, \text{Cd}, \text{Fe}, \text{Ni}, \text{Co}, \text{Cu}, \text{Mg}$

Anwendung: schlechter Leiter mit großem μ -- Trafos

Magnetit $\text{FeO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$

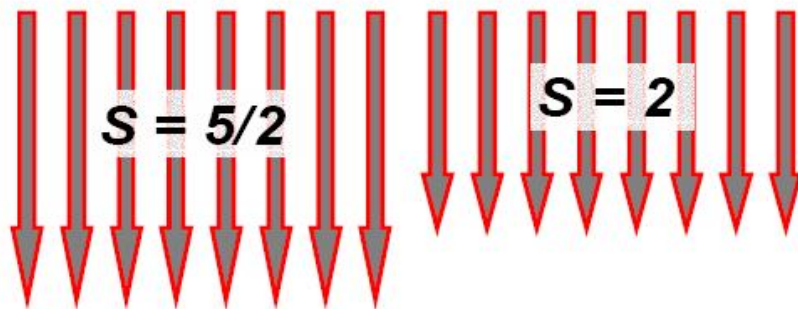
(a) A-Plätze, tetraedrisch



$$S = 5/2$$



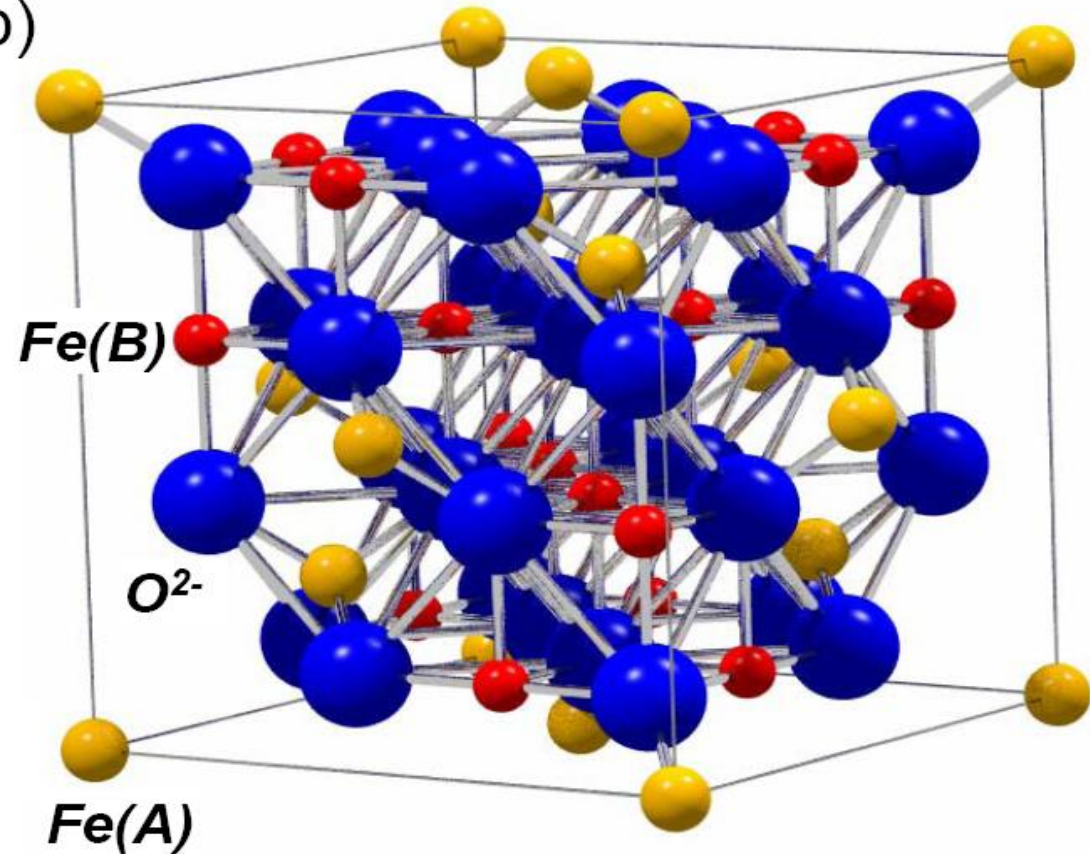
B-Plätze, oktaedrisch



$$S = 5/2$$

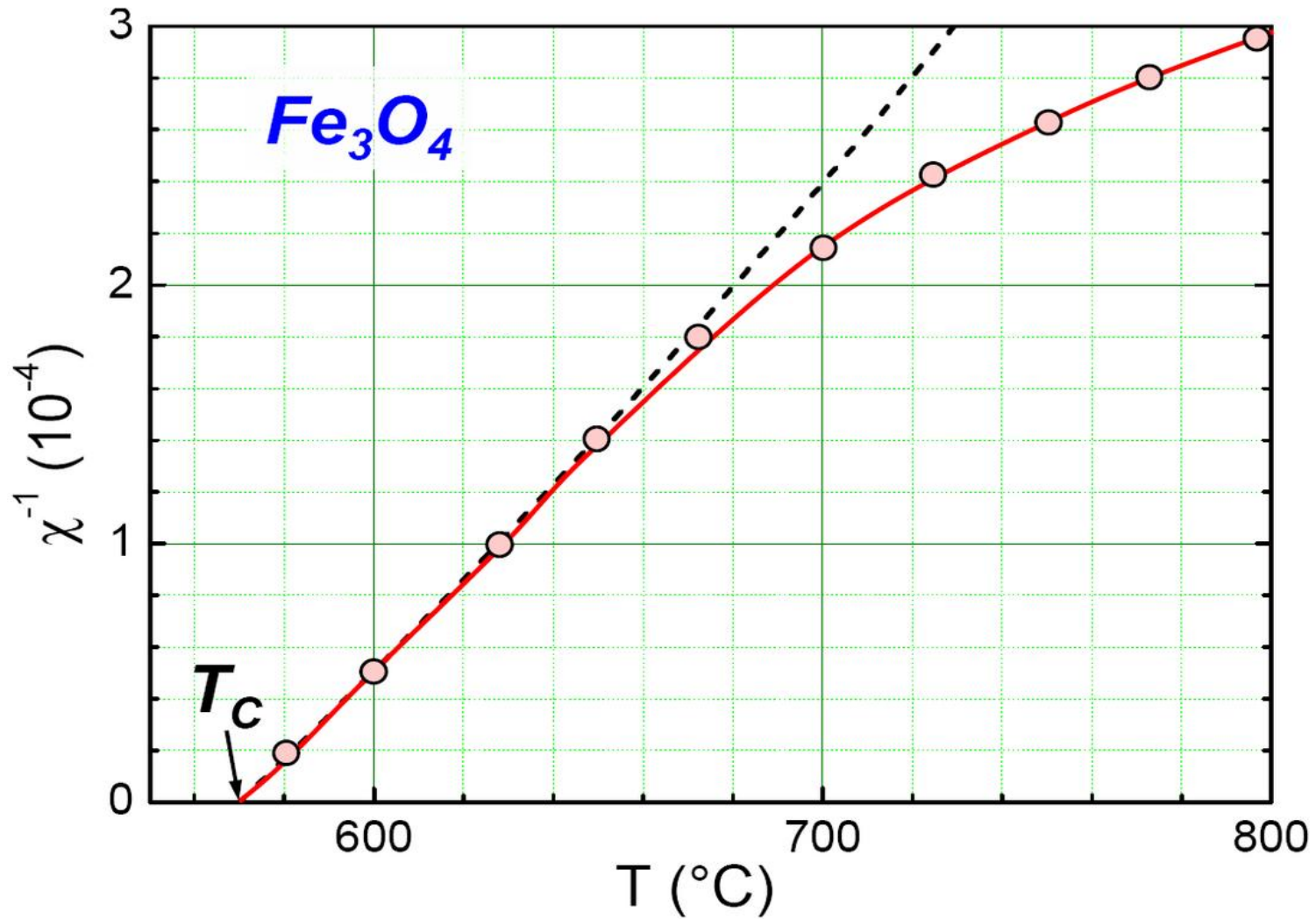


(b)



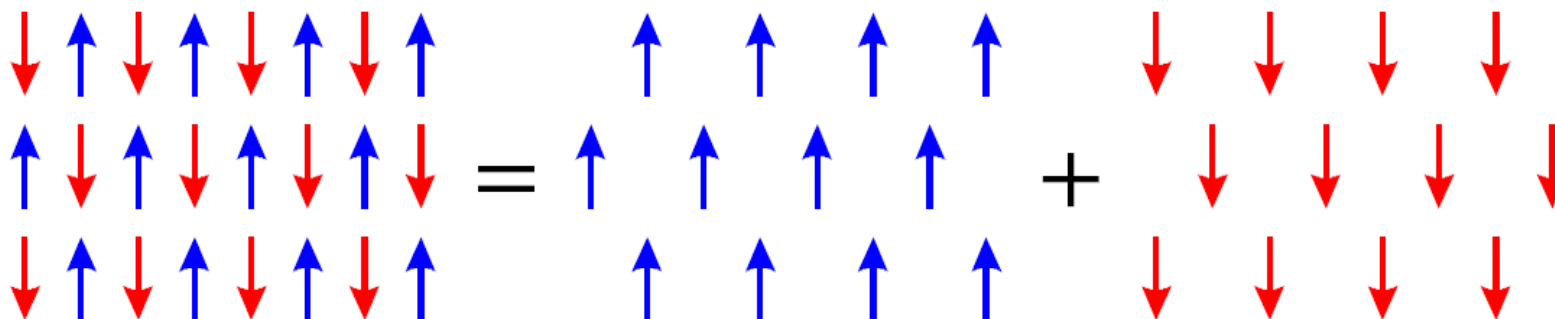
Spins an tetraedrisch und oktaedrisch
koordinierte Fe³⁺-Ionen: antiparallel
Magnetisierung nur aufgrund der
oktaedrisch koordinierten Fe²⁺-Ionen

Inverse Spinellstruktur von Magnetit
tetraedrische A-Plätze: 3-wertige Ionen
oktaedrische B-Plätze: je zur Hälfte
2- & 3-wertige Ionen
(Normaler Spinell: A-Plätze nur 2-wertige,
B-Plätze nur 3-wertige Ionen)



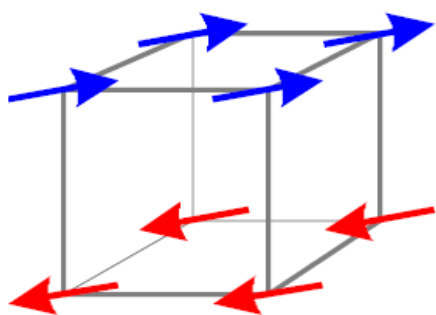
Reziproke Suszeptibilität von Magnetit
Krümmung typisch für Ferrimagneten

Antiferromagnetisches Gitter aufgebaut aus zwei ferromagnetischen



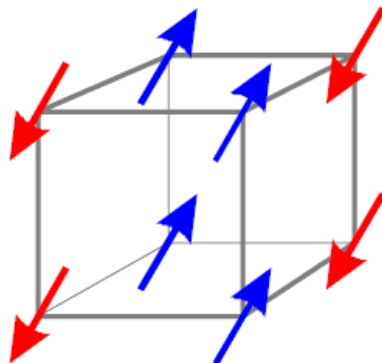
Einige mögliche antiferromagnetische Anordnungen im SC Gitter

(a) Typ A



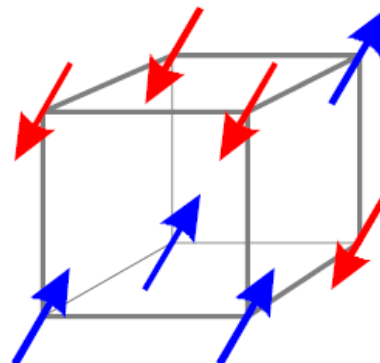
lagenartig

(b) Typ C

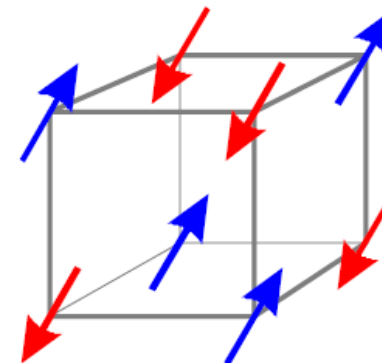


kettenartig

(c) Typ E



(d) Typ G



Eisengranate $M_3Fe_5O_{12}$: ferrimagnetisches Oxid

z. B.: Yttrium Iron Garnet (YIG)

Faraday effect (rotation of plane of polarization with \mathbf{B} parallel to \mathbf{k})

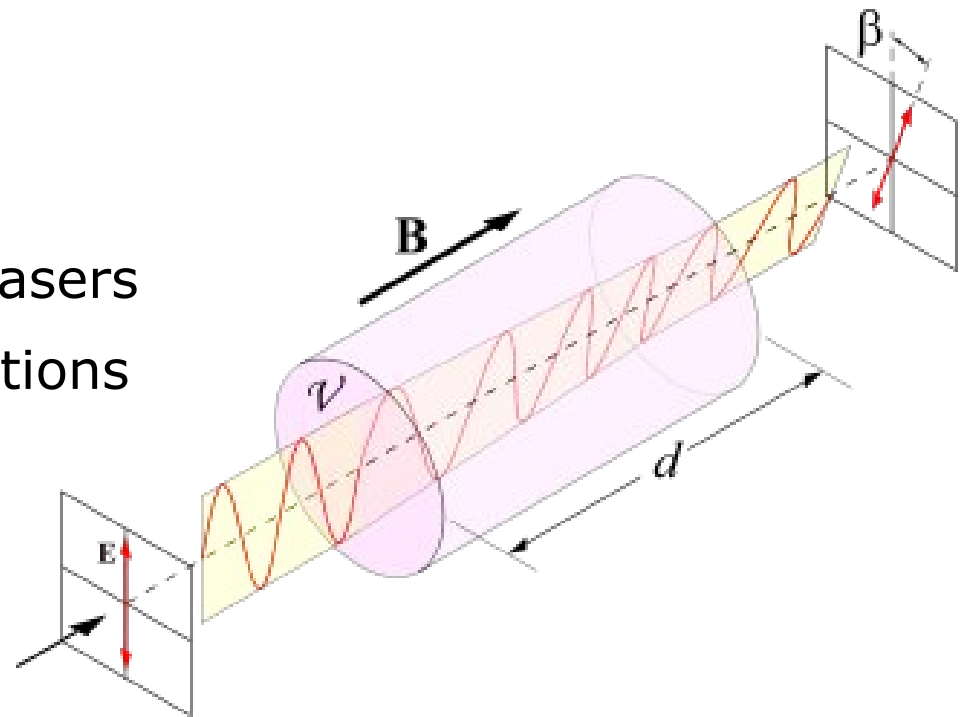
low absorption: infrared up to 600 nm

Applications

microwave filters

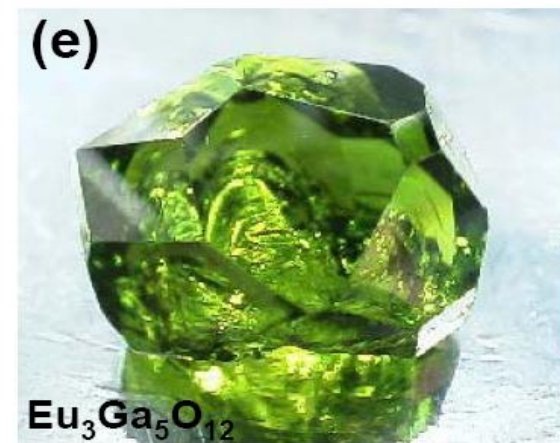
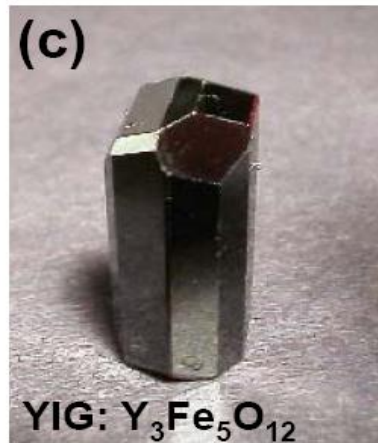
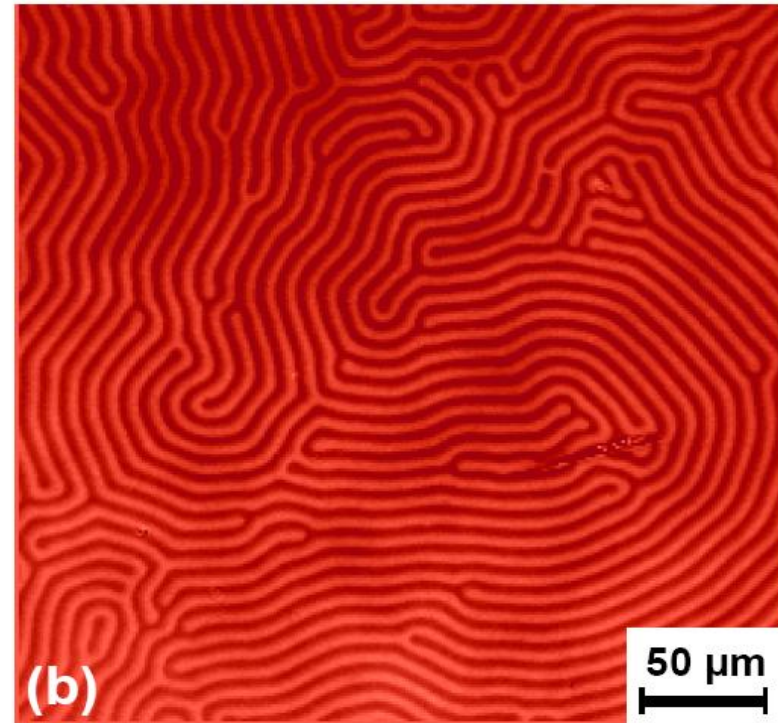
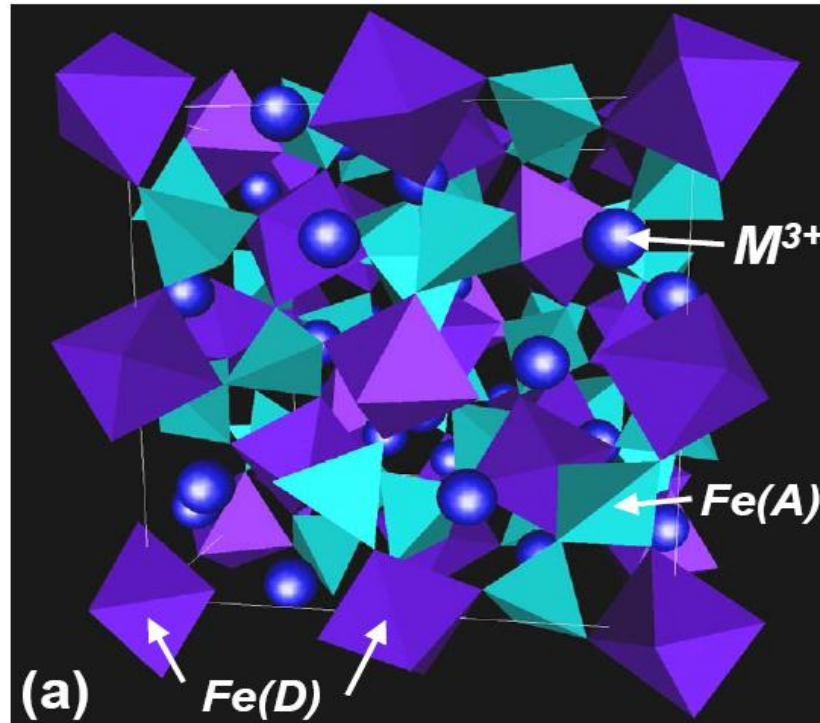
Faraday rotators in solid-state lasers

various nonlinear optics applications

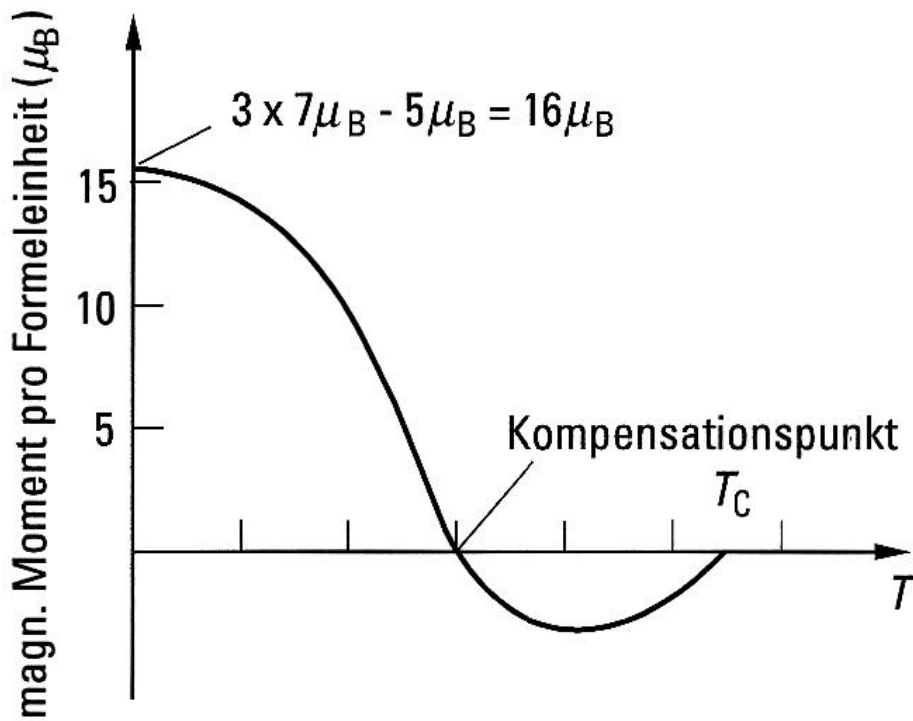
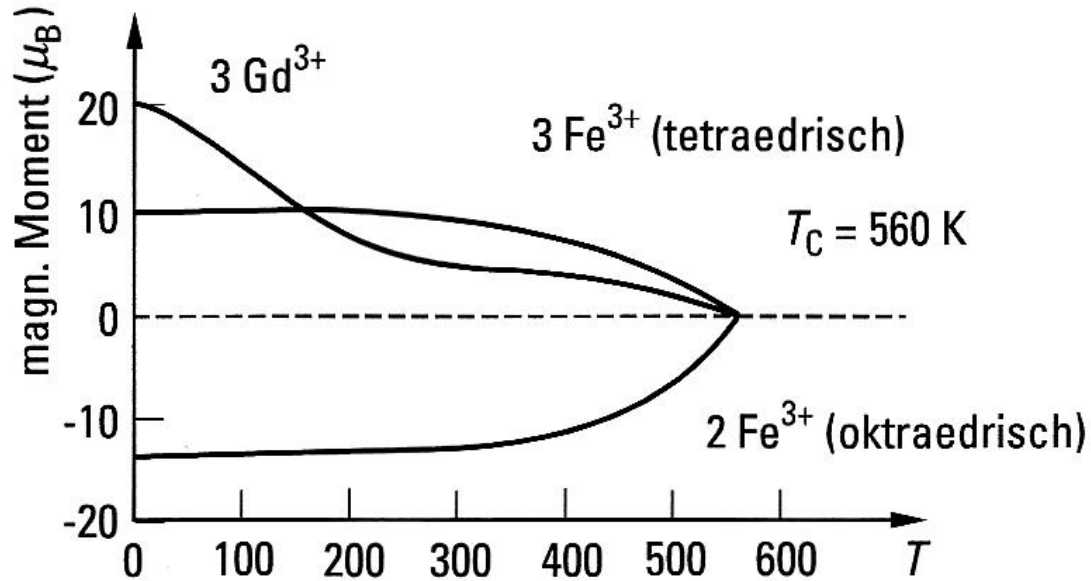


Yttrium Iron Garnet: Kristallstruktur
 A-Plätze tetra-, D-Plätze oktaedrisch
 (gezeigt nur die O-tetra- & -oktaeder
 ohne die Fe³⁺-Ionen in ihrem Zentrum)

Kerr-Mikroskopiebild magnetischer
 Streifendomänen in YIG-Film bei B
 senkrecht zum Film



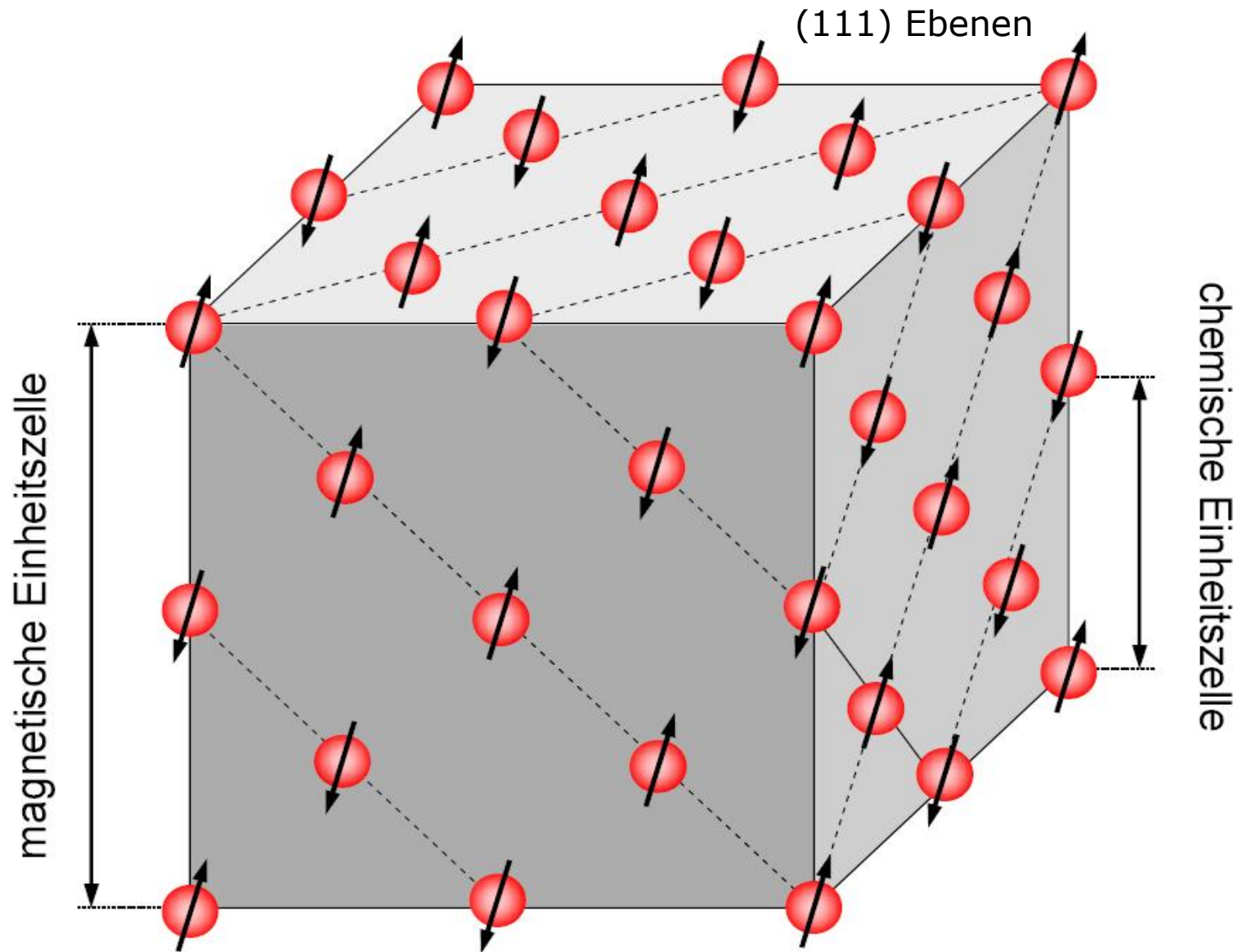
Magnetisches Moment von $\text{Gd}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$



- Anwendung: magnetooptische Speicher
 kleines M bei RT
 → Ummagnetisierung kaum möglich
 Laserheizen
 → M steigt
 → ermöglicht Ummagnetisierung

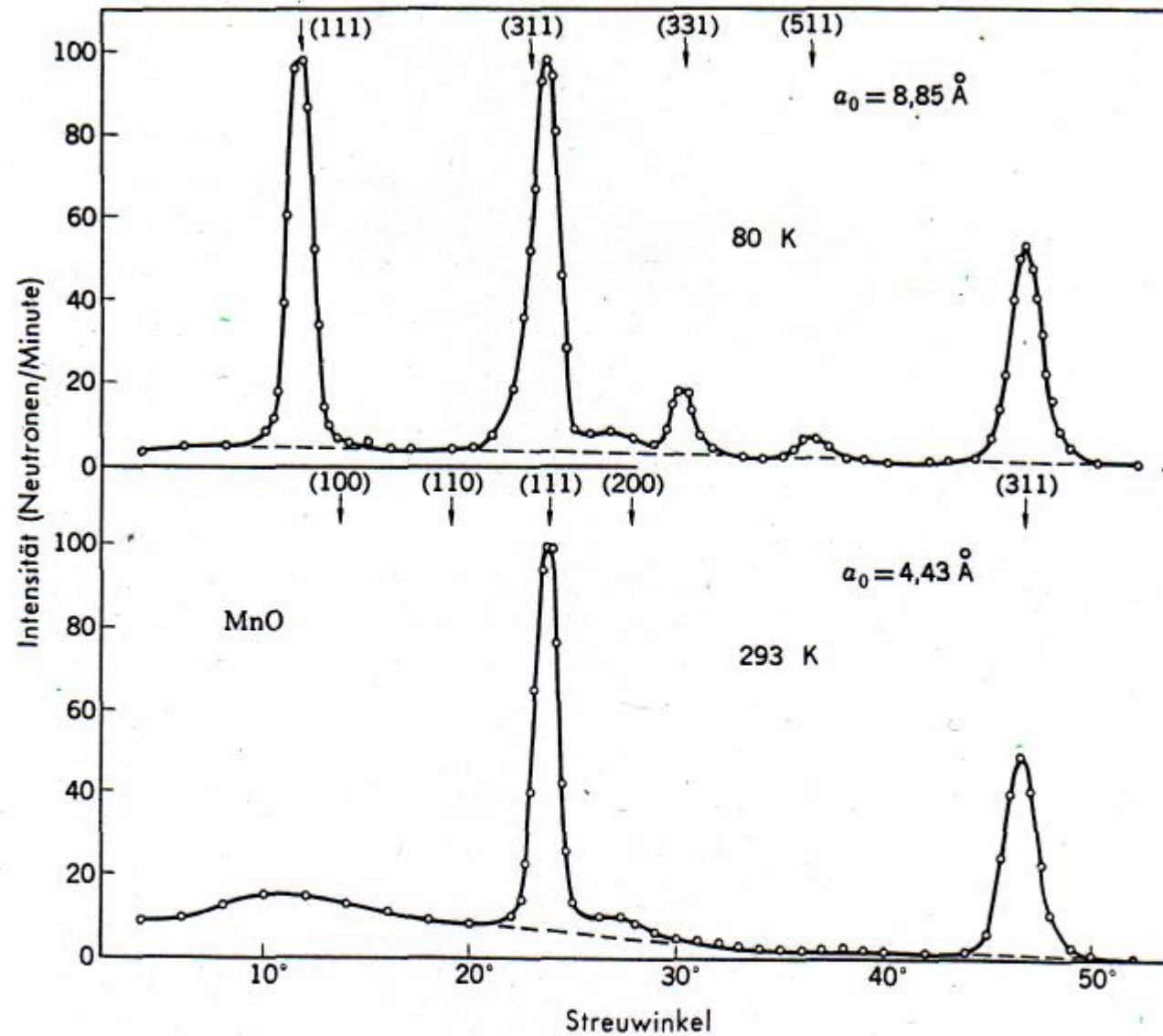
MnO

NaCl-Struktur



Spins der Mn²⁺-Ionen in antiferromagnetischem MnO
(O²⁻-Ionen nicht dargestellt) für $T < T_{\text{Néel}} = 116 \text{ K}$

80 K



293 K

Bild 20 Neutronenbeugungsaufnahme von MnO unterhalb und oberhalb der Spinordnungstemperatur bei 120 K, nach C. G. Shull, W. A. Streuser und E. O. Wollan. Für die Reflexionsindizes wurde bei 80 K eine 8,85 Å-Elementarzelle und bei 293 eine 4,43 Å-Elementarzelle zugrunde gelegt. Bei der höheren Temperatur sind die Mn^{++} -Ionen immer noch magnetisch aber nicht mehr geordnet.

Antiferromagnetic Crystals

Substance	Paramagnetic ion lattice	Transition temperature, T_N , in K	Curie-Weiss θ , in K	$\frac{\theta}{T_N}$	$\frac{\chi(0)}{\chi(T_N)}$
MnO	fcc	116	610	5.3	$\frac{2}{3}$
MnS	fcc	160	528	3.3	0.82
MnTe	hex. layer	307	690	2.25	
MnF ₂	bc tetr.	67	82	1.24	0.76
FeF ₂	bc tetr.	79	117	1.48	0.72
FeCl ₂	hex. layer	24	48	2.0	<0.2
FeO	fcc	198	570	2.9	0.8
CoCl ₂	hex. layer	25	38.1	1.53	
CoO	fcc	291	330	1.14	
NiCl ₂	hex. layer	50	68.2	1.37	
NiO	fcc	525	~2000	~4	
Cr	bcc	308			

Molekularfeldnäherung für 2 Spingitter liefert für $T > T_{\text{n eel}}$: $\chi_{AF} = \frac{2C}{T + T_{\text{N eel}}}$

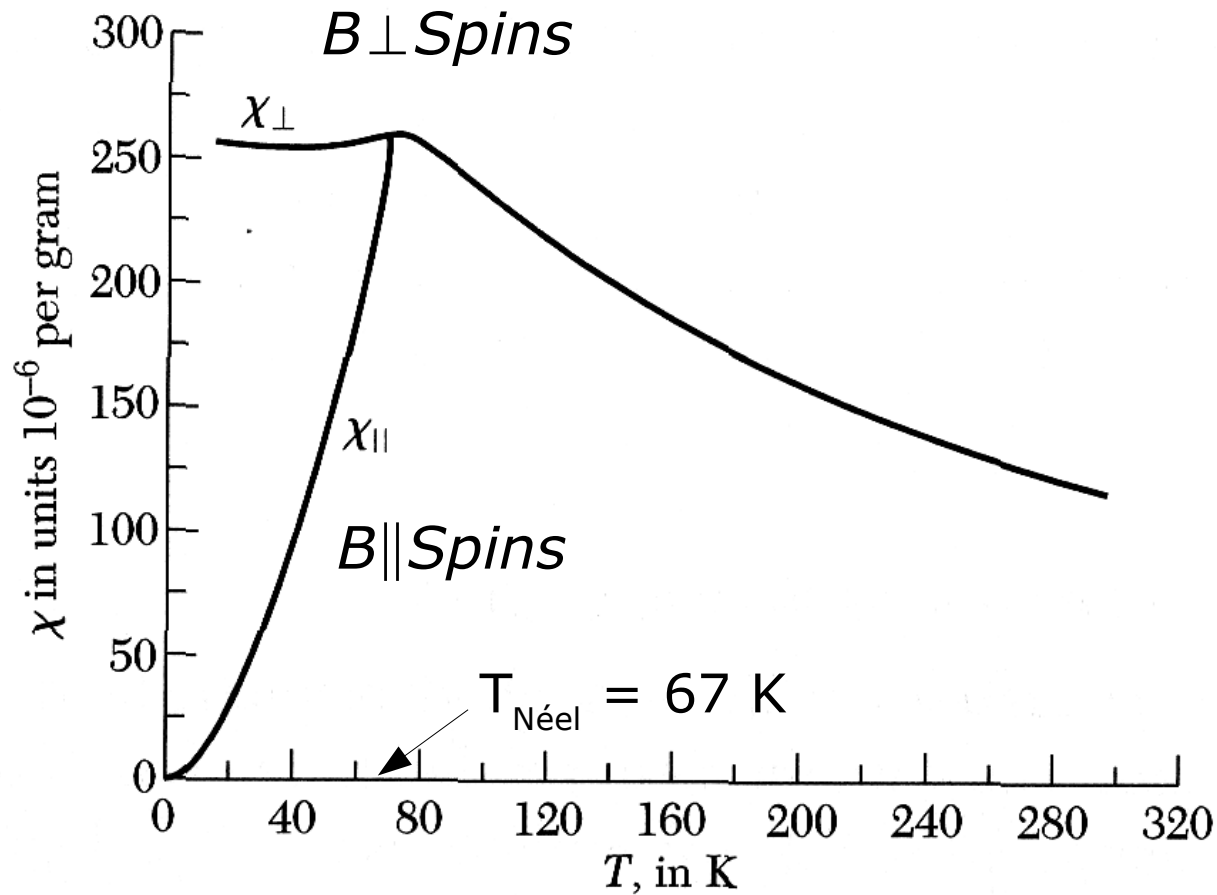
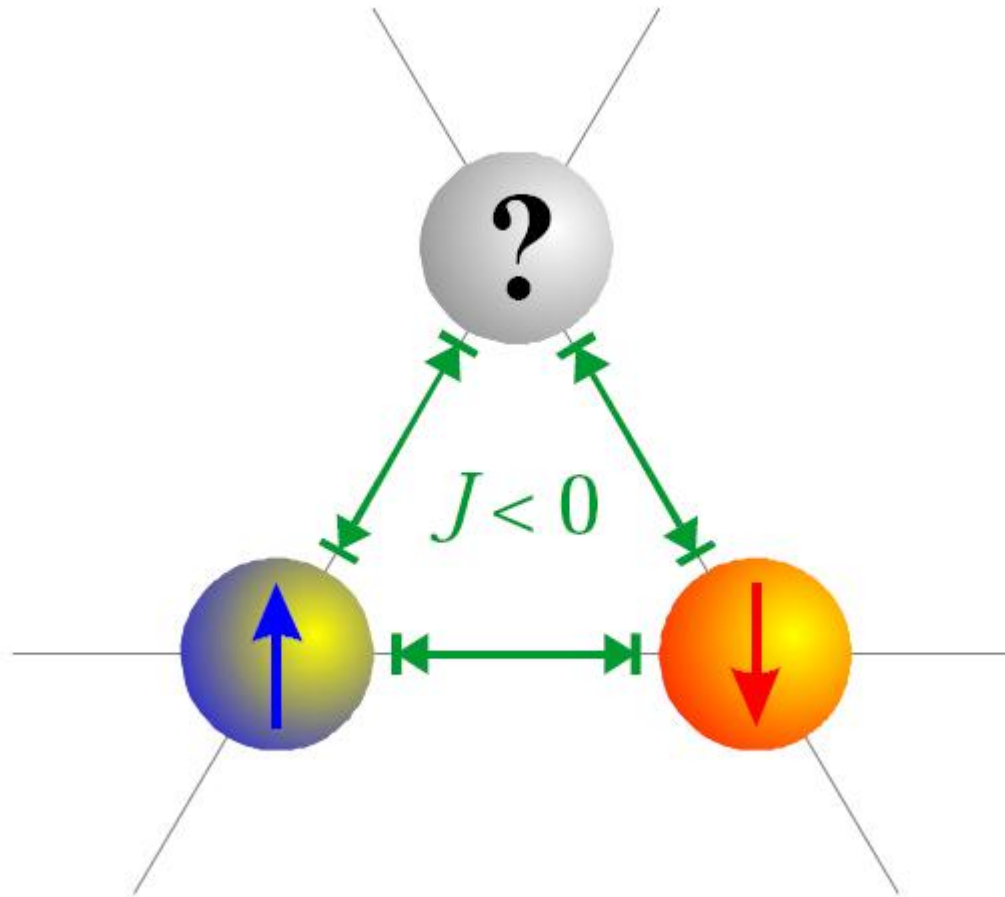


Figure 22 Magnetic susceptibility of manganese fluoride, MnF_2 , parallel and perpendicular to the tetragonal axis. (After S. Foner.)

Frustration im 2D Dreiecksgitter



Spingläser

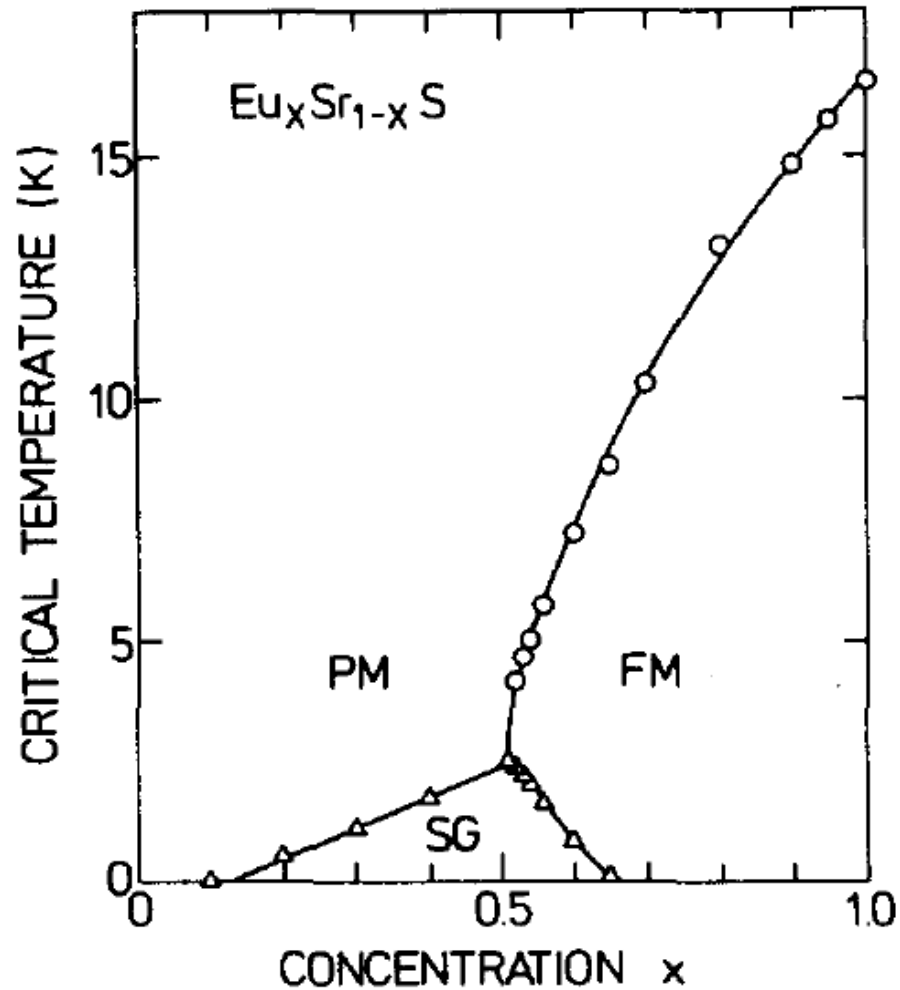


Fig. 1. Magnetic phase diagram of $\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$: PM, paramagnetic; FM, ferromagnetic; SG, spin glass (6).

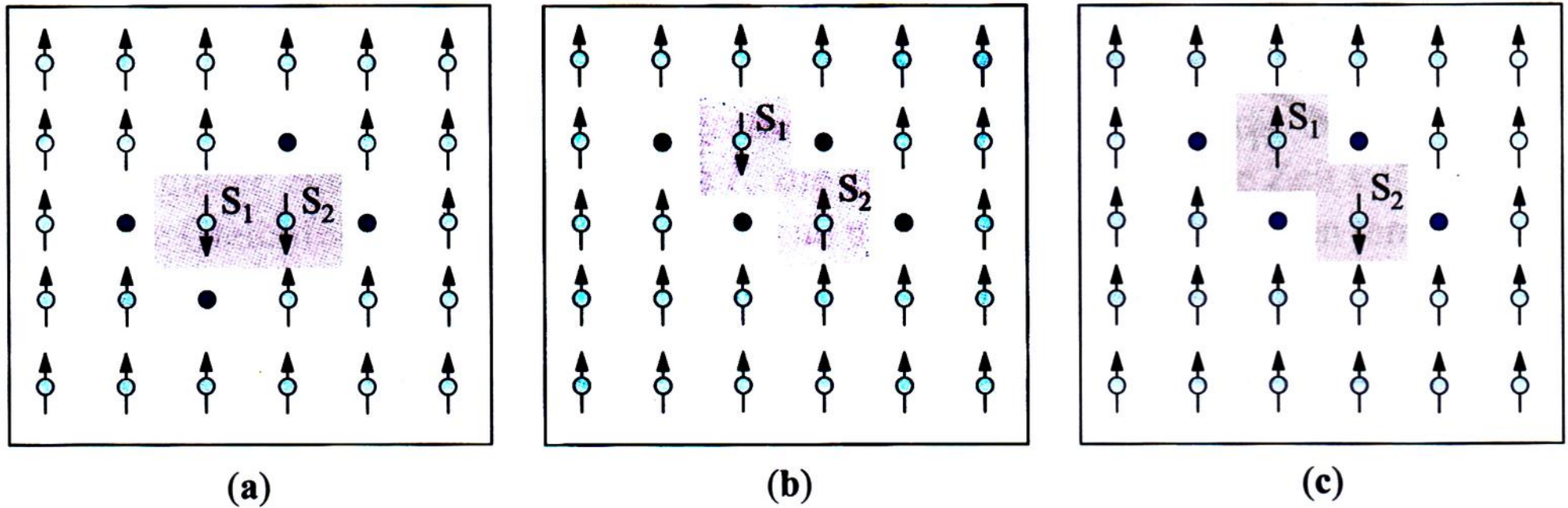
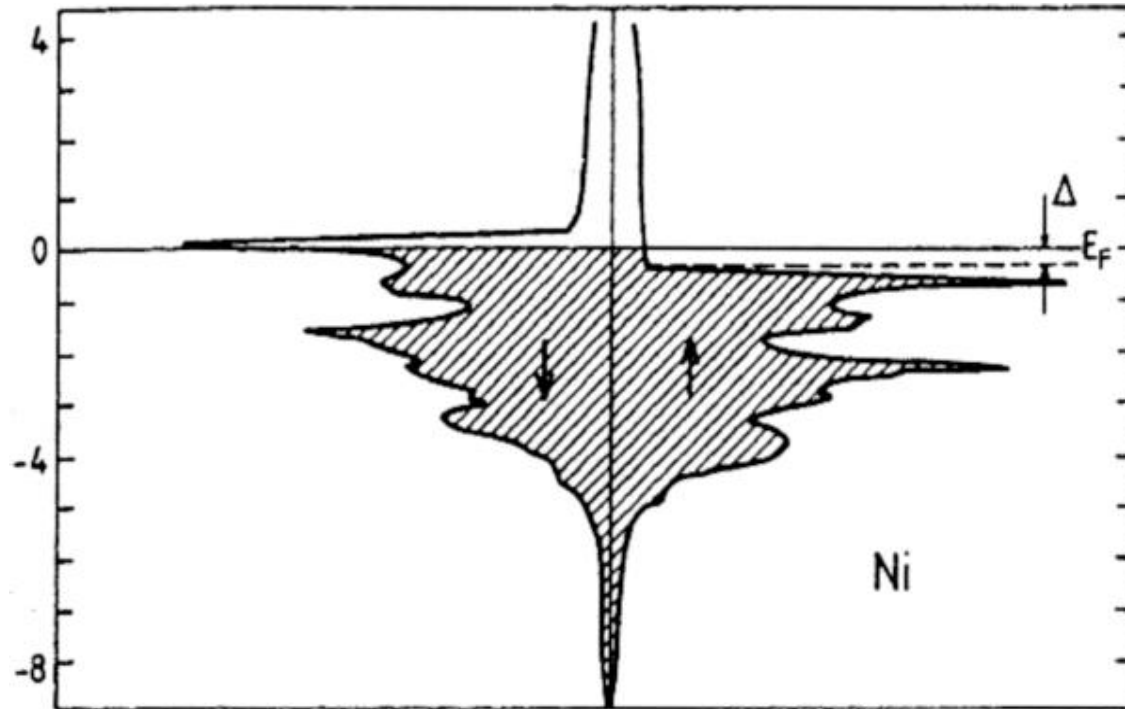


Bild 12.20: Zweidimensionales Modell zum Frustrationseffekt. Die dunkelblauen Kreise repräsentieren die unmagnetischen Ionen. **a)** Die beiden grau hinterlegten Spins S_1 und S_2 nehmen die energetisch tiefste Lage ein. **b)** Die Anwesenheit von Spin S_2 verhindert die ferromagnetische Ausrichtung von Spin S_1 . **c)** Diese Anordnung ist energetisch äquivalent zur Anordnung b) trotz der Drehung der beiden Spins.

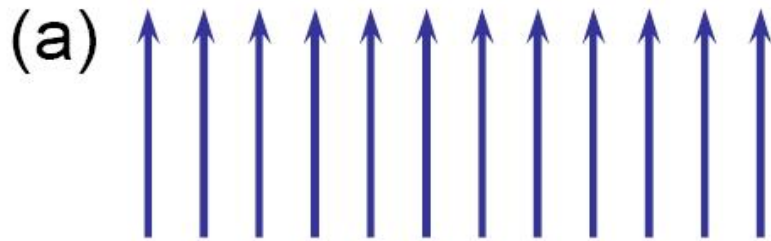
Spin reversal in the band model of ferromagnets



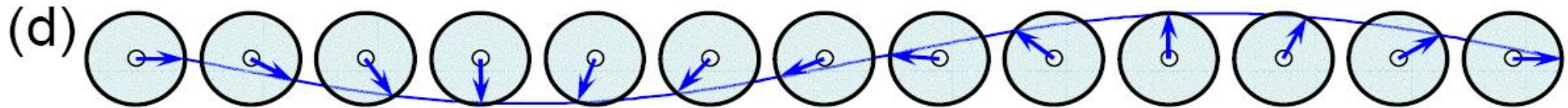
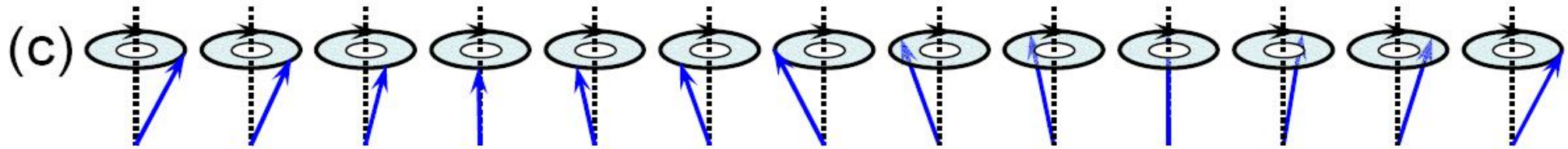
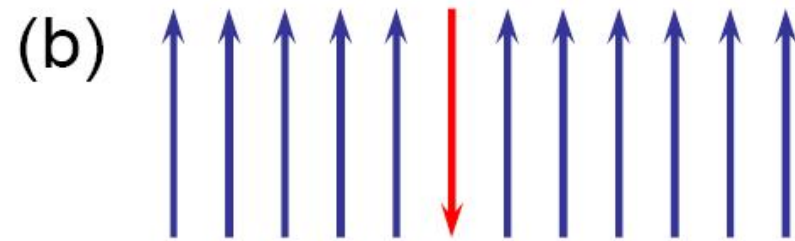
Stoner gap Δ

Magnetische Anregungen

Ferromagnet im
klassischen Grundzustand



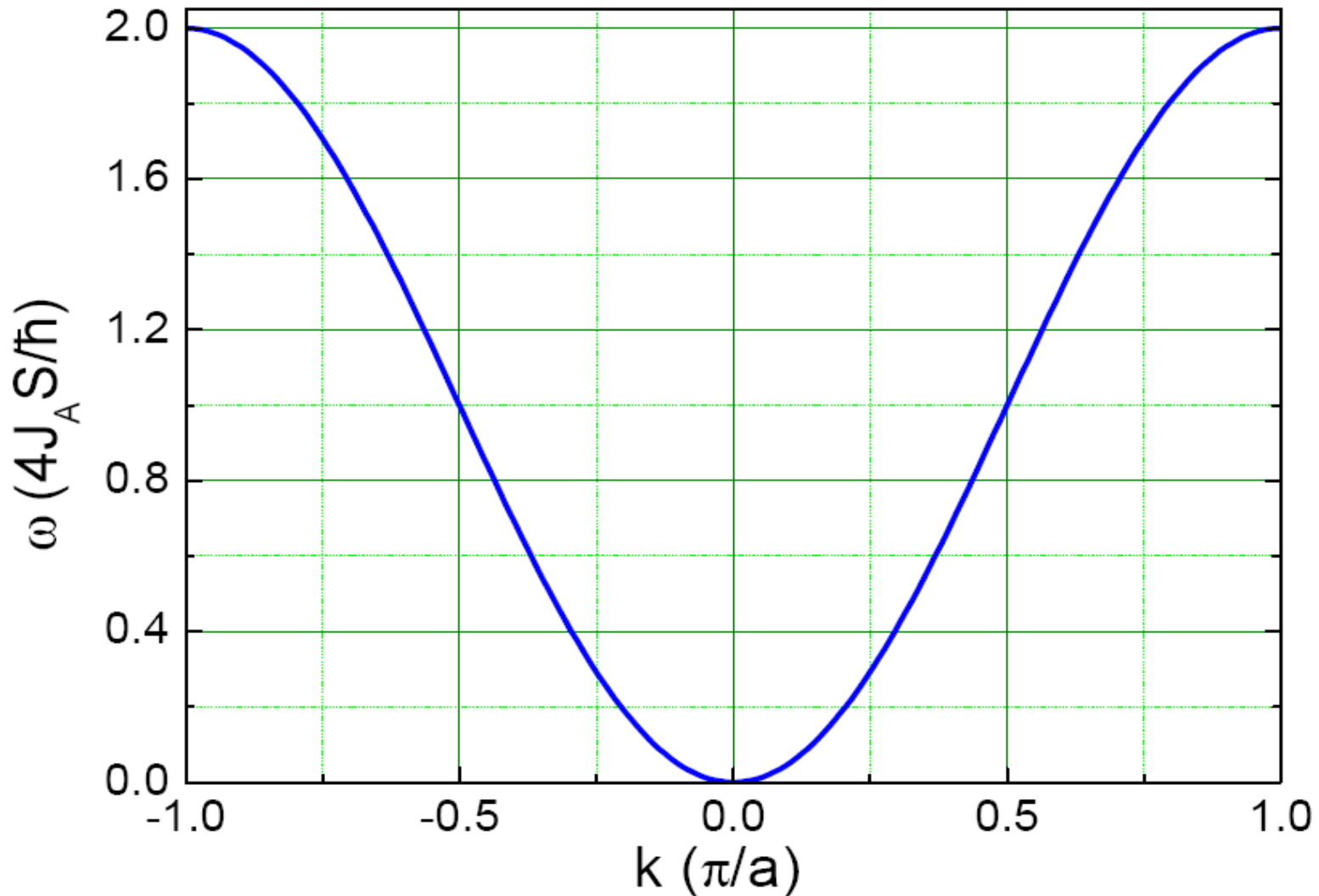
Umklappen eines
einzelnen Moments

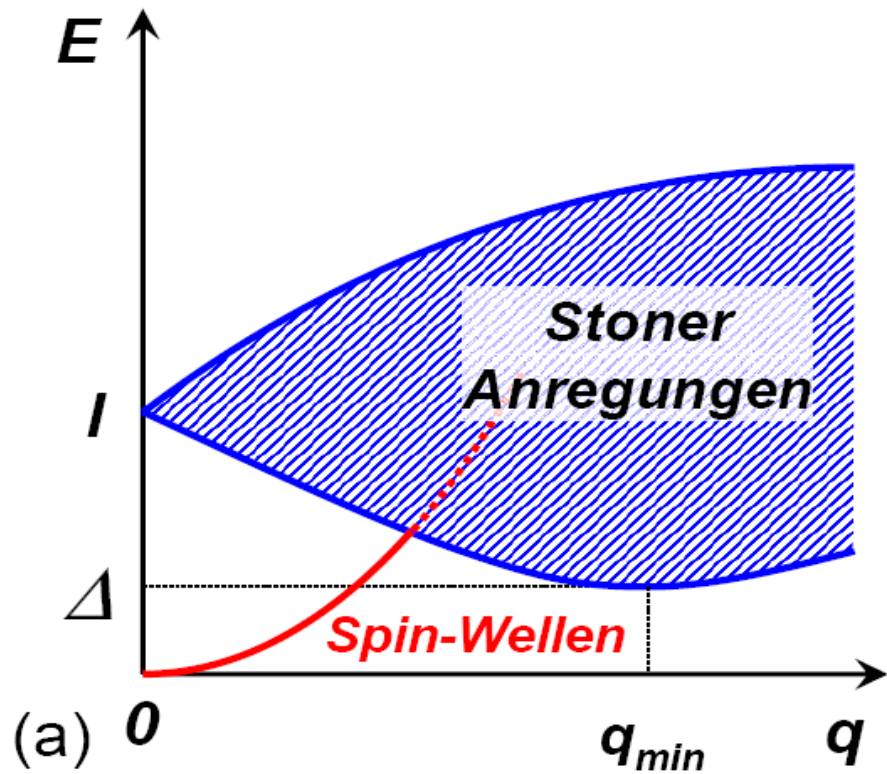


Spin-Welle in einer linearen Kette

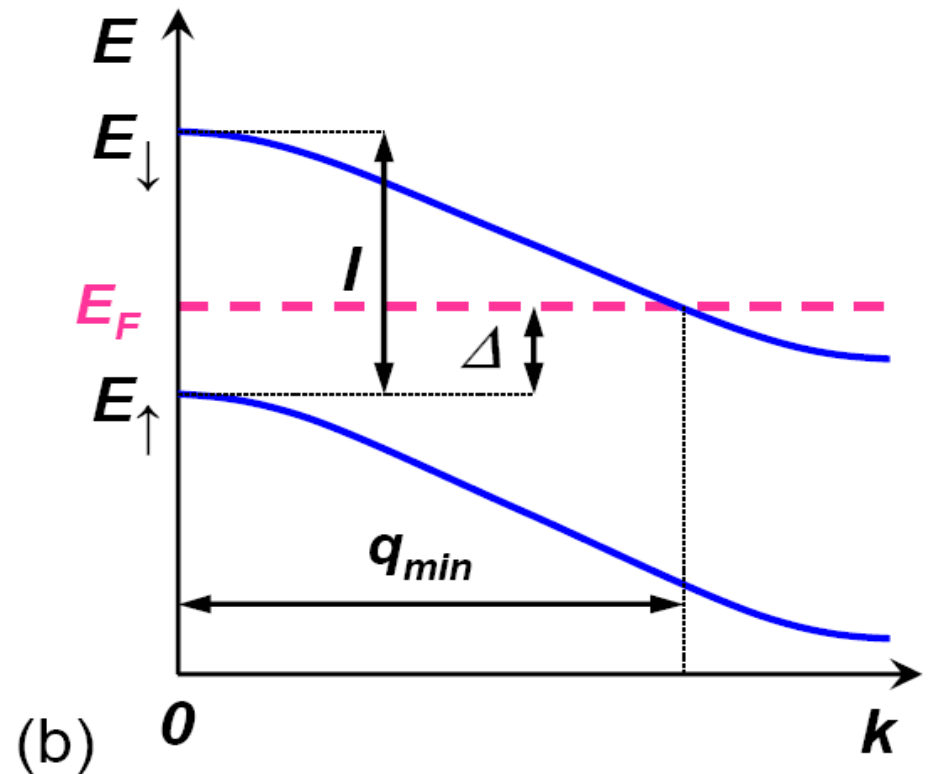
Dispersion ferromagnetischer Spinwellen

in einer 1D Spinkette, $B_{\text{ext}} = 0$



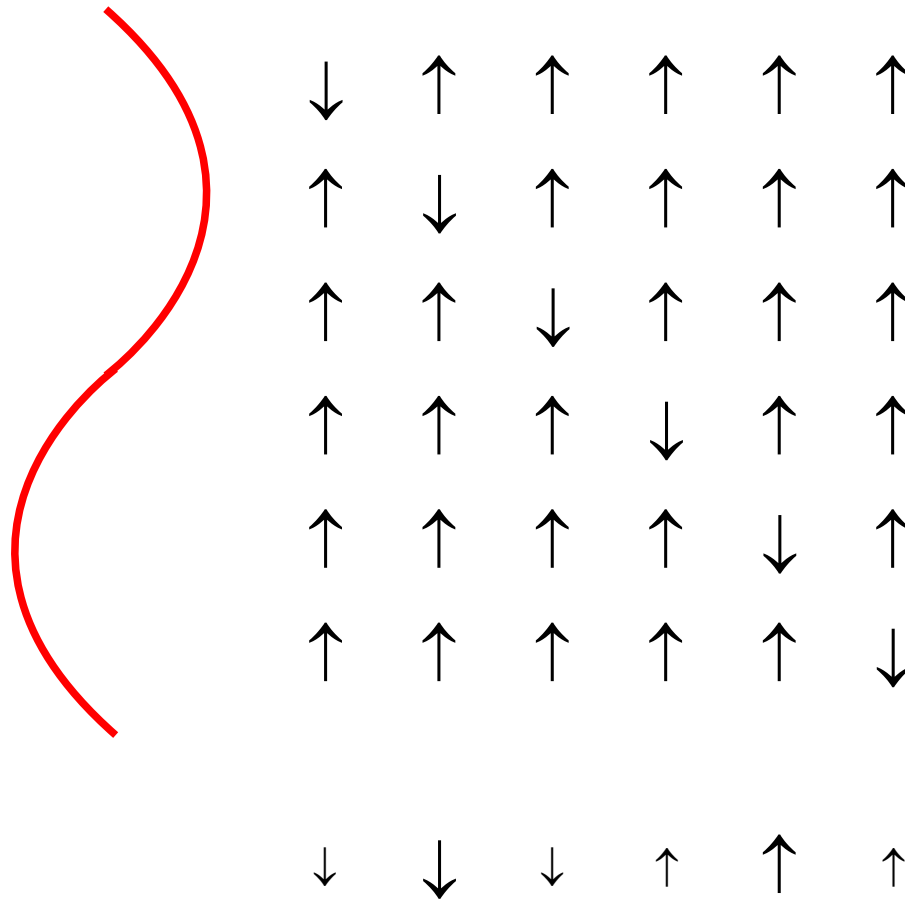


Dispersion von Spinwellen & Spektrum
der Eielektronen-Spinaanregungen
in einem Ferromagneten



Bandstruktur mit
Austauschspaltung I
und
Stoner-Lücke Δ : min. Energie
für spin flip

Spin reversal in the model of localised electrons: J



$$|\vec{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \exp(i\vec{k}\vec{r}_j) |\downarrow_j\rangle$$

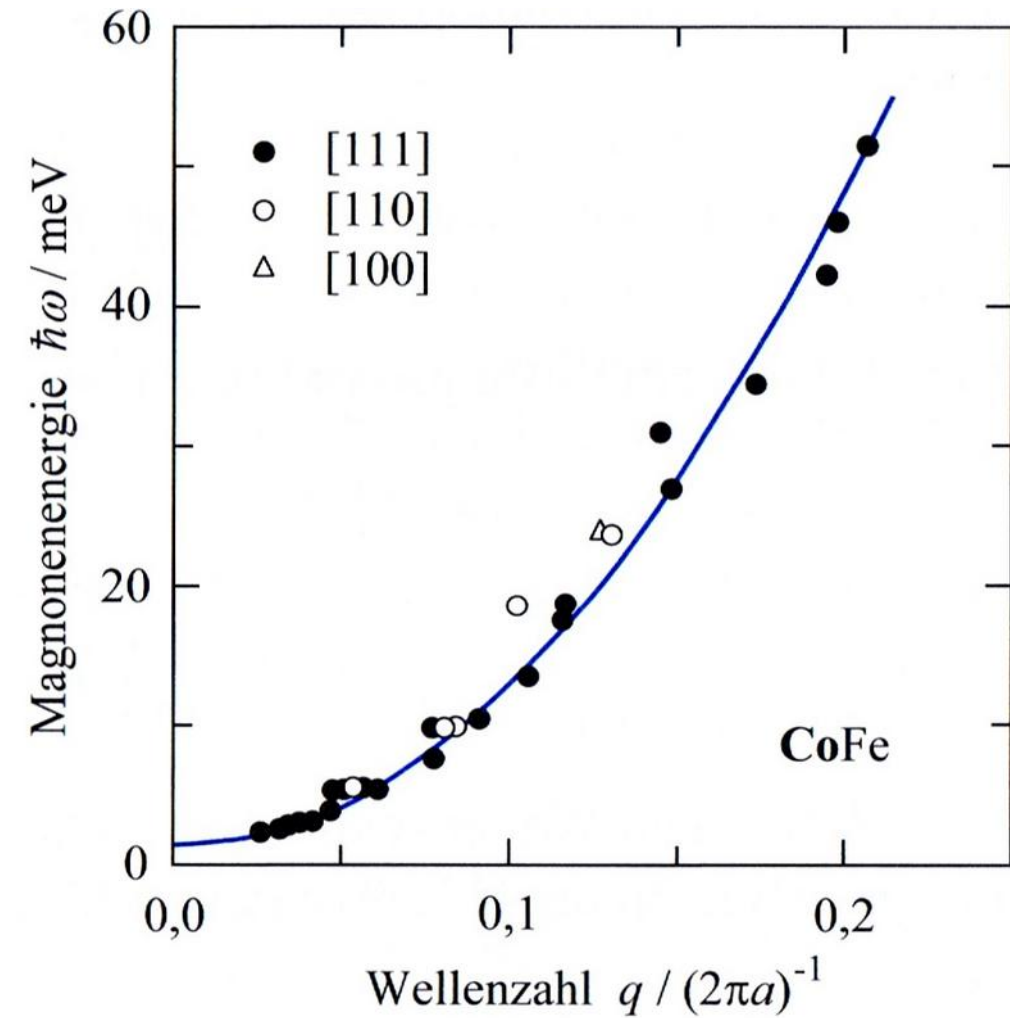


Bild 12.13: Magnonendispersionskurve von Kobalt legiert mit 8% Fe. Wie erwartet verläuft die Dispersionskurve parabelförmig. Die Lücke bei kleinen Energien beruht auf der Anisotropie der Austauschwechselwirkung. (Nach R.N. Sinclair, B.N. Brockhouse, Phys. Rev. **120** 1638 (1960).

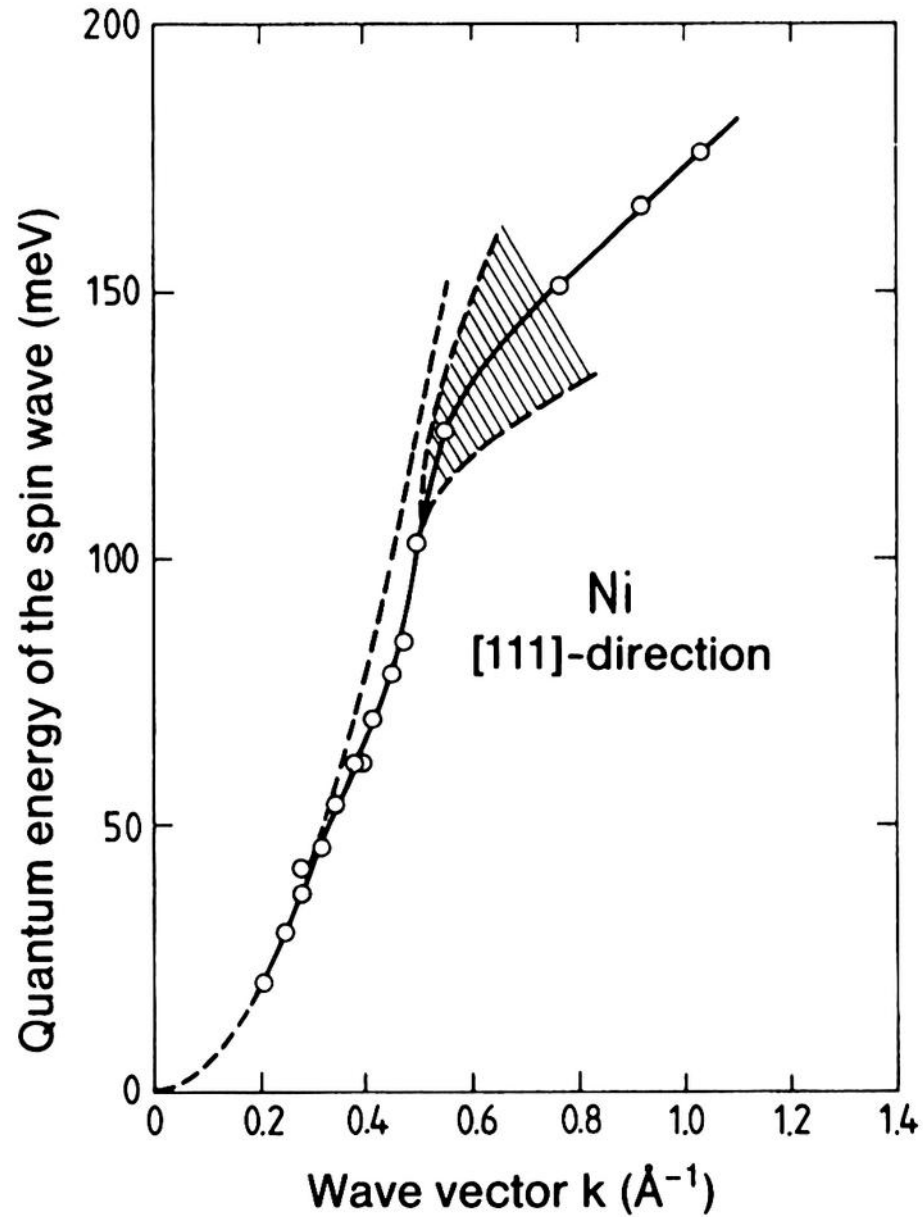
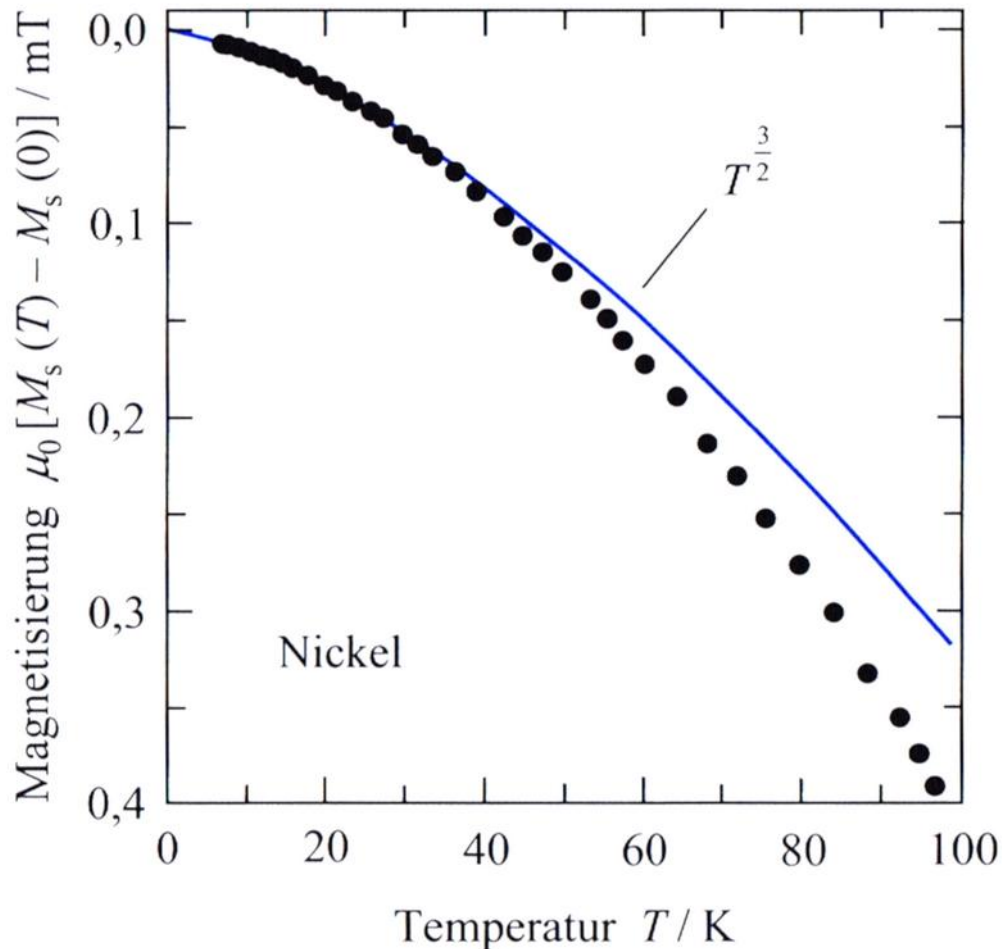


Fig. 8.13. Experimental dispersion relation for spin waves in nickel along the [111] direction [8.6]. The measurements were made at $T = 295$ K. The dashed line shows a dependence of the quantum energy proportional to k^2 . Deviations from this line are due firstly to the exchange interaction between more distant neighbors, and secondly to the onset of one-electron excitations. The latter cause a reduction in the lifetime of the spin waves, leading to a lifetime broadening of the spectra (*shaded region*)



Abweichung aufgrund
der Näherung kleiner
Wellenvektoren

Grossm Marx $T^{3/2}$

Bild 12.14: Spontane Magnetisierung von Nickel als Funktion der Temperatur. Bei tiefen Temperaturen folgt die Magnetisierung dem erwarteten $T^{3/2}$ -Verlauf. (Nach B.E. Argyle et al., Phys. Rev. **132**, 2051 (1963)).