

Magnetfelder und Materie

zur vollständigen Beschreibung:

externes Magnetfeld \mathbf{H} – von externen Stromquellen (bzw. Magneten)

Magnetisierung(sdichte) \mathbf{M} – von mikroskopische Quellen in Atomen

Beide addieren sich zur magnetschen Flußdichte \mathbf{B} $[\mathbf{H}] = \text{A/m}$; $[\mathbf{B}] = \text{T} = \text{Vs/m}^2$

$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}) \quad \text{bzw.} \quad \vec{H} = \frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M}$$

mit: $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \frac{\text{Vs}}{\text{Am}}$ Permeabilität des Vakuums

im Vakuum und ohne Materie (d.h. $M=0$), sind B und H aufeinander skalierbar:

$$B = \mu_0 H \rightarrow \mathbf{1 T} = \mathbf{800 kA/m}$$

mit Materie muß die Antwortfunktion, die Suszeptibilität χ , mit berücksichtigt werden

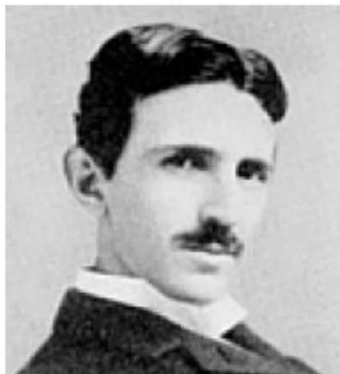
$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \bar{\chi} \mathbf{H}) = \underbrace{\mu_0 (1 + \bar{\chi})}_{\mu} \mathbf{H} = \mu \mu_0 \mathbf{H}$$

μ - magnetische Permeabilität

Ein Wort zu den Einheiten (SI versus cgs)

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}) \quad \mathbf{B} = \mathbf{H} + 4\pi\mathbf{M}$$

	SI-System	=	cgs-System
Magnetische Flussdichte \mathbf{B}	1 Vs/m ² = 1 T(esla)	=	10 ⁴ G(auß)
Vakuumpermeabilität μ_0	4 π ·10 ⁻⁷ Vs/Am	=	1 G/Oe(rsted)
Magnetfeld \mathbf{H}	1 A/m	=	4 π ·10 ⁻³ Oe = 1/80 Oe
Magnetisierung \mathbf{M}	1 A/m	=	10 ⁻³ G = 1 mG
Magnetisches Moment \mathbf{m}	(10 ²³ μ_B \approx) 1 J/T = 1 Am ²	=	10 ³ erg/G = 10 ³ emu



Links: NICOLA TESLA, geb. 10.7.1856 in Smiljan (Kroatien), gest. 7.1.1943 in New York

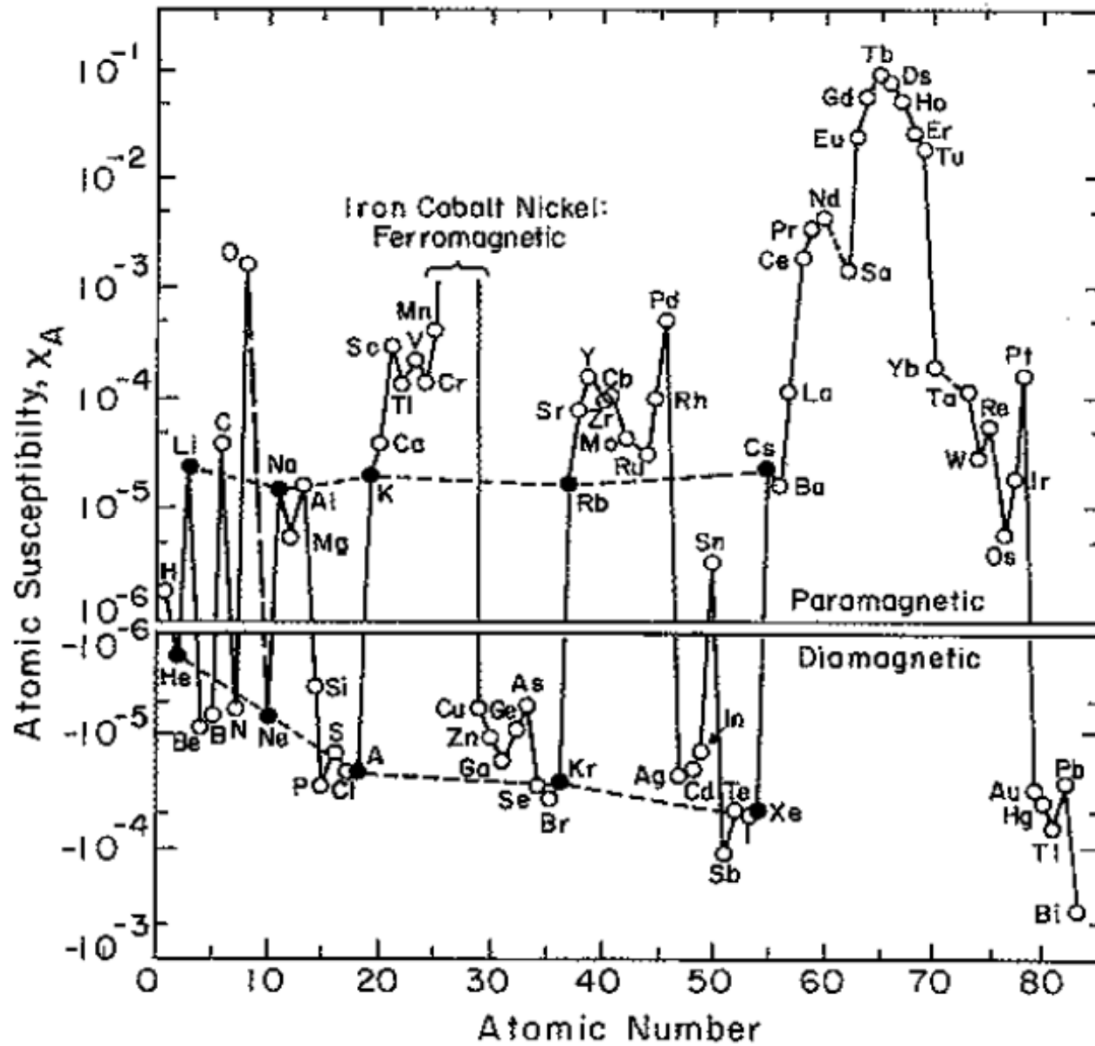
Mitte: CARL FRIEDRICH GAUß, geb. 30.4.1777 in Braunschweig, gest. 23.2.1855 in Göttingen

Rechts: HANS CHRISTIAN ØRSTED, geb. 14.8.1777 in Rudkøbing (Dänemark), gest. 9.3.1851 in Kopenhagen

Anmerkung: im cgs System existiert keine Vakuumpermeabilität, d.h. \mathbf{B} und \mathbf{H} können im Vakuum synonym verwendet werden.

Klassifizierung der Materialien durch χ bzw. μ

$$\chi_{ij} = \frac{\partial M_i}{\partial H_j}$$



Diamagnetismus

$$\chi < 0 \quad \text{bzw.} \quad \mu < 1$$

Kupfer: $\mu = 0,9999904$

Paramagnetismus

$$\chi > 0 \quad \text{bzw.} \quad \mu > 1$$

Platin: $\mu = 1,00026$

(Ferromagnetismus)

μ - wird sehr groß

($\text{Co}_{80}\text{Fe}_{20}$): $\mu \approx 50000$

Magnetisches Moment im externen Magnetfeld

Analog zum elektrischen Dipol gilt auch hier:

$$E_{pot} = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$$

d.h. das magnetische Moment richtet sich **parallel** zum Feld aus
(potentielle Energie wird minimal)

gilt nur für „feste“ magnetische Momente (ohne innere Freiheitsgerade)

Weiterhin wirkt ein Drehmoment **T**:

$$\mathbf{T} = \mathbf{m} \times \mathbf{B}$$

mit $\mathbf{m} = -\gamma \mathbf{L}$ und $\mathbf{T} = d\mathbf{L}/dt$ folgt daraus

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = -|\gamma| \mathbf{m} \times \mathbf{B}$$

Präzession eines magnetischen Moments im Feld

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = -|\gamma|\mathbf{m} \times \mathbf{B}$$

„Kreiselgleichung“

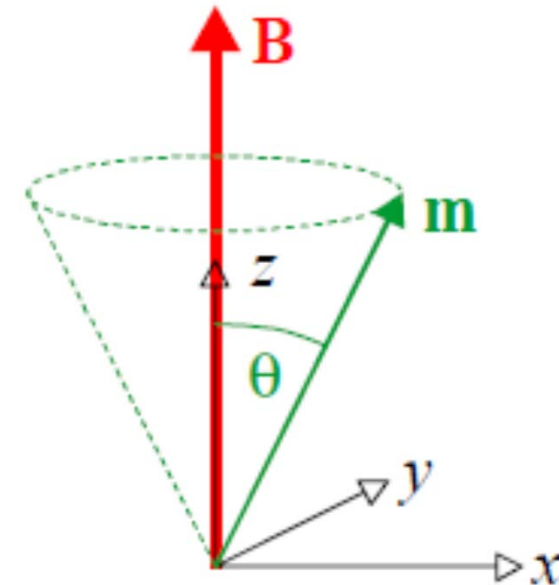
$$\dot{m}_x = -|\gamma|Bm_y$$

$$\dot{m}_y = |\gamma|Bm_x$$

$$\dot{m}_z = 0$$

Annahme:

$$\mathbf{B} = (0/0/B)$$



$$\begin{aligned} m_x(t) &= |\mathbf{m}| \sin \theta \cos(|\gamma|Bt) \\ m_y(t) &= |\mathbf{m}| \sin \theta \sin(|\gamma|Bt) \\ m_z &= |\mathbf{m}| \cos \theta \end{aligned}$$

mit

$$\omega_L = |\gamma|B$$

Larmor Frequenz

→ ein externes Magnetfeld ruft „komplizierte“ dynamische Prozesse hervor

Das Bohrsche Magneton

Betrachte das Wasserstoffatom klassisch:
 der Kreistrom I um den Kern ist gegeben durch:

$$I = -e/\tau \quad \text{wobei} \quad \tau = 2\pi r/v \quad \text{„Umrundungszeit“}$$

daraus folgt:
$$\mu_{\text{Wasserstoff}} = \pi r^2 I = -\frac{\pi r}{\tau} r e = -\frac{v r e}{2} = -\frac{e}{2m} m v r$$

$d\mathbf{m} = I dS$
↑
↓

Aus der Quantenmechanik wissen wir, daß der Drehimpuls im Grundzustand nicht =0, sondern \hbar ist.

$$\longrightarrow \mu_{\text{Wasserstoff}} = -\frac{e\hbar}{2m}$$

Damit wird das **Bohrsche Magneton** definiert als:

$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m} = 9,274 \cdot 10^{-24} \frac{\text{J}}{\text{T}} = 0,579 \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{T}} = 9,274 \cdot 10^{-21} \text{emu}$$

daraus folgt

$$\gamma = -\frac{e}{2m} \approx -10^{14} \text{ GHz/T} \quad \text{und} \quad \omega_L = eB/2m$$

Bahn- und Spinmoment, Hamiltonoperator

mit dem Bohrschen Magneton folgt somit der Zusammenhang zwischen magnetischem (Bahn-)Moment \mathbf{m}_L und kinetischen Bahndrehimpuls \mathbf{L}_{kin}

$$\mathbf{m}_L = -\mu_B \frac{\mathbf{L}_{\text{kin}}}{\hbar}$$

\mathbf{L} wird oft in Einheiten von \hbar angegeben, ohne es explizit zu erwähnen
 \mathbf{L} und \mathbf{m}_L sind antiparallel wegen negativer Ladung des Elektrons

Analog gilt für den (quantenmechanischen) Spin und das Spinmoment:

$$\mathbf{m}_S = -\mu_B g_e \frac{\mathbf{S}}{\hbar}$$

\mathbf{S} kein klassischer Drehimpuls!

wobei hier der Landé-Faktor g_e auftaucht

$$g_e = 2 \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + O(\alpha^2) \right) \approx 2,00023$$

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

→ Das durch den Spin hervorgerufene magnetische Moment ist also ungefähr doppelt so groß, wie das Bahnmoment

Feinstrukturkonstante

Bahn- und Spinmoment, Hamiltonoperator

insgesamt ergibt sich also für das magnetische Moment der Elektronen in der Atomhülle:

$$\mathbf{m} = \mathbf{m}_L + \mathbf{m}_S = -\mu_B (\mathbf{L}_{\text{kin}} + g\mathbf{S})$$

$$\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{L}} + \vec{\mathbf{S}}$$

Gesamtdrehimpuls

Kinetischer Energieoperator im Magnetfeld

$$\vec{p}_i \rightarrow \vec{p}_i + e\vec{A}(\vec{r}_i) = \vec{p}_i - \frac{e}{2} \vec{r}_i \times \vec{B}_0$$

mit Coulomb-Eichung: $\text{div}\mathbf{A} = 0$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})$$

→ Hamiltonoperator (nur Spin)

$$\Rightarrow \mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A} = B\mathbf{e}_z$$

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} (\mathbf{p}_i + e\mathbf{A}(\mathbf{r}_i))^2}_{\text{kinetische Energie}} + \underbrace{V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}_{\text{Coulomb-Energie}} + \underbrace{\sum_{i=1}^N g\mu_B \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{B}}_{\text{Zeeman-Energie}}$$

$$\longrightarrow \hat{\mathbf{m}} = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathbf{B}} \quad \text{Operator des magnetischen Moments}$$

Vollständiger Hamilton-Operator (Spin und Bahn)

nur Bahnmoment:

aus:
$$H = \frac{1}{2m} \sum_i [\vec{p}_i^2 + e\vec{A}(\vec{r}_i)]^2$$
 mit $\vec{B}_0 = B_0 \vec{e}_z$ und $\hbar \vec{L} = \hbar \sum_i \vec{l}_i = \sum_i \vec{r}_i \times \vec{p}_i$

folgt:
$$H = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 + \mu_B \vec{L} \cdot \vec{B}_0 + \frac{e^2}{8m} B_0^2 \sum_i (x_i^2 + y_i^2)$$

→ Spin und Bahn:

$$H = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 + \mu_B (\vec{L} + g_0 \vec{S}) \cdot \vec{B}_0 + \frac{e^2}{8m} B_0^2 \sum_i (x_i^2 + y_i^2)$$

1. Ordnung Störungsrechnung:
$$\Delta E_n = \langle n | H_{\text{int}} | n \rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n | H_{\text{int}} | n' \rangle|^2}{E_n - E_{n'}}$$

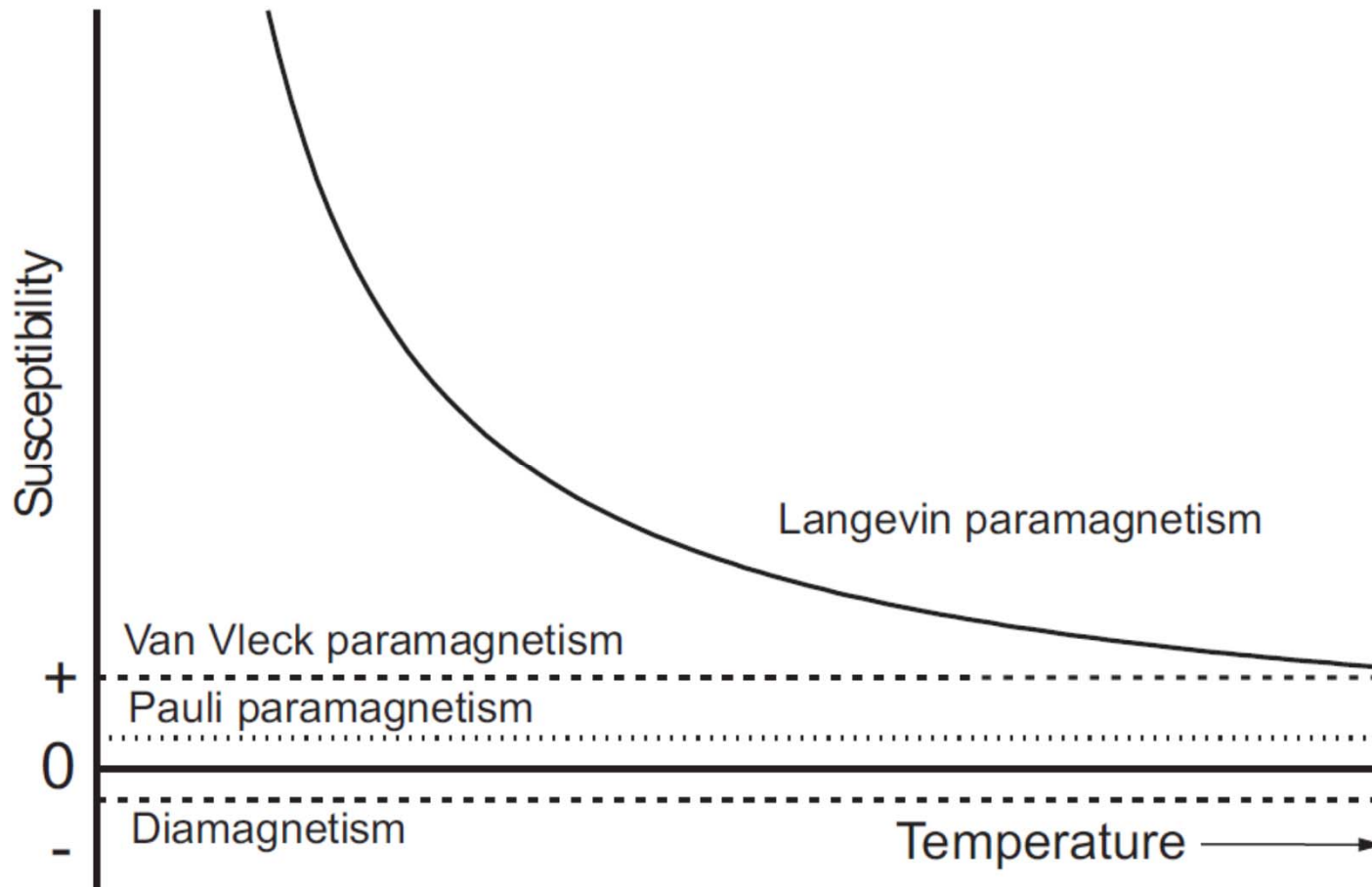
$$\Delta E_n = \mu_B \vec{B}_0 \cdot \langle n | \vec{L} + g_0 \vec{S} | n \rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n | \mu_B \vec{B}_0 \cdot (\vec{L} + g_0 \vec{S}) | n' \rangle|^2}{E_n - E_{n'}} + \frac{e^2}{8m} B_0^2 \langle n | \sum_i (x_i^2 + y_i^2) | n \rangle$$

Langevin
Paramagnetismus

van-Vleck
Paramagnetismus

Langevin
Diamagnetismus

Zusammenfassung von Dia- und Paramagnetismus



Pauli PM nur für „freie“ Elektronen
i.e. Leitungselektronen in Metallen

Diamagnetismus (I) ($-1 \leq \chi < 0$):

$$\chi_{ij} = \frac{\partial M_i}{\partial H_j}$$

Magnetisierung M schwächt das externe Magnetfeld H („Lenzsche Regel“)
allgemeine Materialeigenschaft, aber schwach

$$\chi_{DM} = \chi_c + \chi_L$$

χ_c – Diamagnetismus der Innerschalen-Elektronen (nächste Folie)
Temperaturabhängigkeit skaliert mit α^3 – sehr klein ($\sim 10^{-18}$)

χ_L – Diamagnetismus der Valenzelektronen
Temperaturabhängigkeit skaliert mit α – Größenordnung 10^{-6}

$$\chi_L = \frac{-Ne^2}{3mc^2} \langle b_i | (r - r_i)^2 | b_i \rangle$$

α – linearer thermischer Ausdehnungskoeffizient

„Langevin“ Diamagnetismus, praktisch **temperaturunabhängig** und **isotrop**

Diamagnetismus (I) ($-1 \leq \chi < 0$):

$$\chi_{ij} = \frac{\partial M_i}{\partial H_j}$$

Langevin Diamagnetismus der vollen Schalen ($J=S=L=0$)

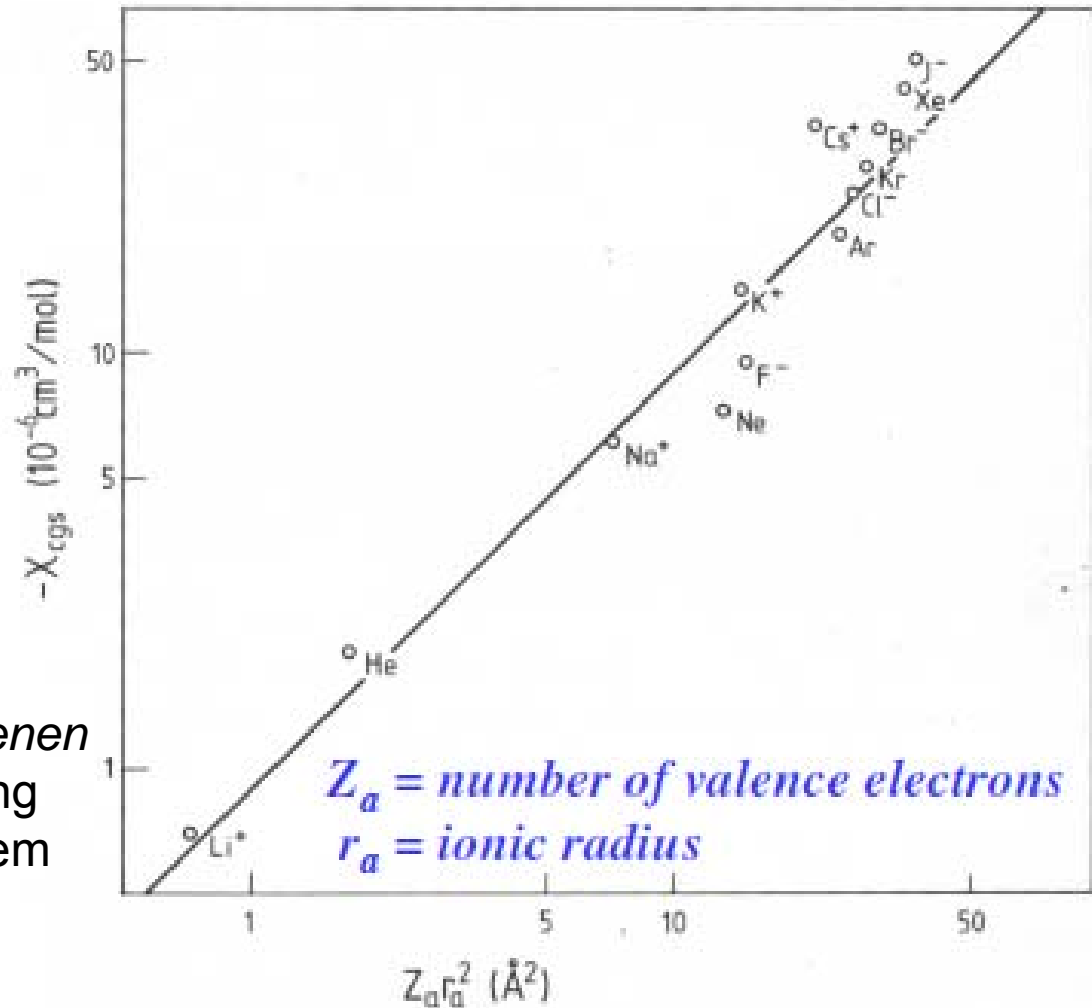
$$\Delta E = \frac{e^2}{8m} B_0^2 \langle 0 | \sum_i (x_i^2 + y_i^2) | 0 \rangle$$

$$\rightarrow \chi_{\text{dia}} = -\frac{\mu_0 e^2 N}{6m V} \langle 0 | \sum_i r_i^2 | 0 \rangle$$

$$= -\frac{\mu_0 Z e^2 N}{6m V} \langle r^2 \rangle$$

Z – Zahl der Elektronen

Diamagnetismus der *abgeschlossenen* Schalen skaliert mit der Ausdehnung der „Elektronenwolke“ $\langle r^2 \rangle$, also dem Ionenradius und mit der Zahl der Valenzelektronen



nach: Ibach & Lüth (Festkörperphysik, Springer, Berlin)

Diamagnetismus (II) ($-1 \leq \chi < 0$):

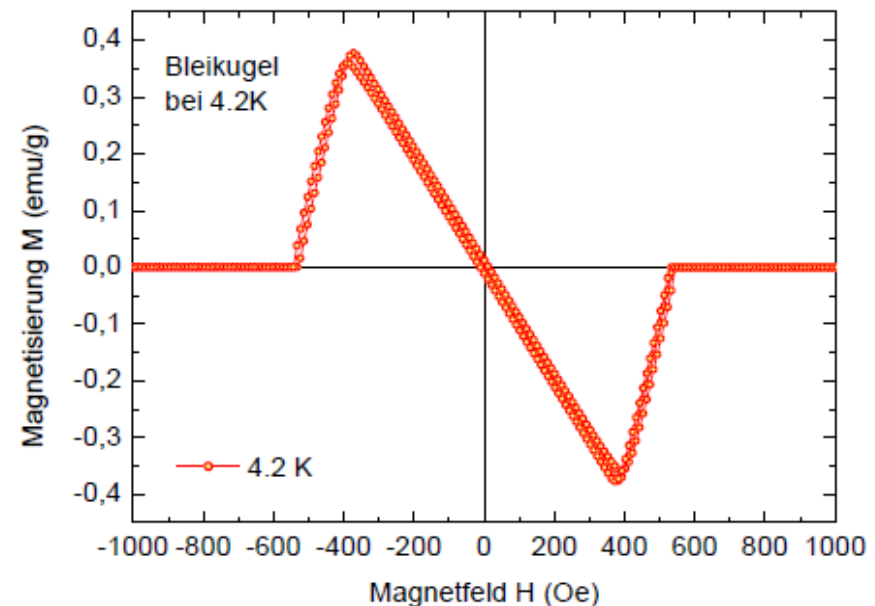
$$\chi_{ij} = \frac{\partial M_i}{\partial H_j}$$

idealer Diamagnet: Supraleiter ($\chi = -1$)

In der supraleitenden Phase wird der magnetische Fluß **vollständig** aus der Probe verdrängt
(**Meißner-Ochsenfeld-Effekt**)



Das gilt nur für Feldstärken unterhalb einer kritischen Feldes H_c oberhalb dessen die Supraleitung zusammenbricht.



Magnetisierung einer supraleitenden Bleikugel bei 4,2 K. Unterhalb des kritischen Feldes von knapp 400 Oe gilt $\chi \equiv -1$.

Paramagnetismus (I) ($\chi > 0$):

$$\chi_{ij} = \frac{\partial M_i}{\partial H_j}$$

Magnetisierung M verstärkt das externe Magnetfeld H

Van-Vleck Paramagnetismus

$$\Delta E_n = \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n | \mu_B \bar{B}_0 \cdot (\bar{L} + g_0 \bar{S}) | n' \rangle|^2}{E_n - E_{n'}}$$



JOHN HASBROUCK VAN VLECK, geb. 13.3.1899 in Middletown (USA), gest. 27.10.1980 in Cambridge/ Massachusetts

$$\rightarrow \chi = 2\mu_0 \mu_B^2 \frac{N}{V} \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle 0 | L_z + g_0 S_z | n \rangle|^2}{E_n - E_0}$$

Schwache Temperaturabhängigkeit (bei Halbleitern)

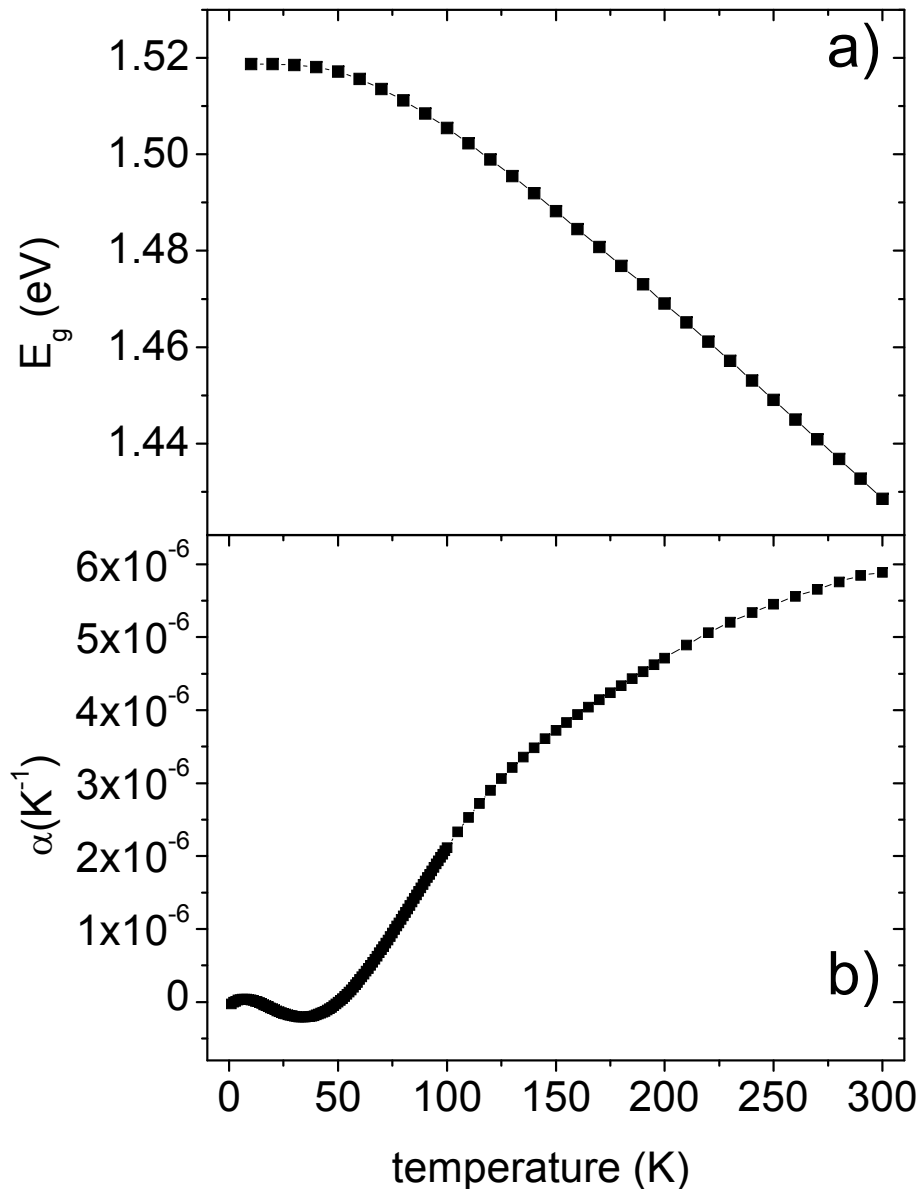
χ_p – Temperaturabhängigkeit skaliert mit $(E_n - E_0)^{-1} \sim 1/E_g$ – Größenordnung 10^{-4}
 E_g – Bandlücke

experimentell gefunden: $\chi_p = \frac{B}{\beta E_g}$

S. Hudgens et al., PRL **33**, 1552 (1974)
D.J. Chadi et al., PRL **35**, 1372 (1975)

B („Matrixelement“) und β (~ 1) materialabhängig Parameter

Temperaturabhängigkeit von α und E_g – Beispiel GaAs



Temperaturabhängigkeit der Bandlücke:

semi-empirische Formel jenseits von Varshni's Gleichung (tiefe T exponentiell statt quadratisch)

$$E_g(T) = E_B - a_B \left(1 + \frac{2}{\exp(\Theta/T) - 1} \right)$$

E. Grilli et al., PRB **45**, 1638 (1992)

Temperaturabhängigkeit des linearen thermischen Ausdehnungskoeffizienten:

zwei Vorzeichenwechsel (16 und 56 K)

S. Novikova, Sov. Phys. Solid State **3**, 129 (1961)

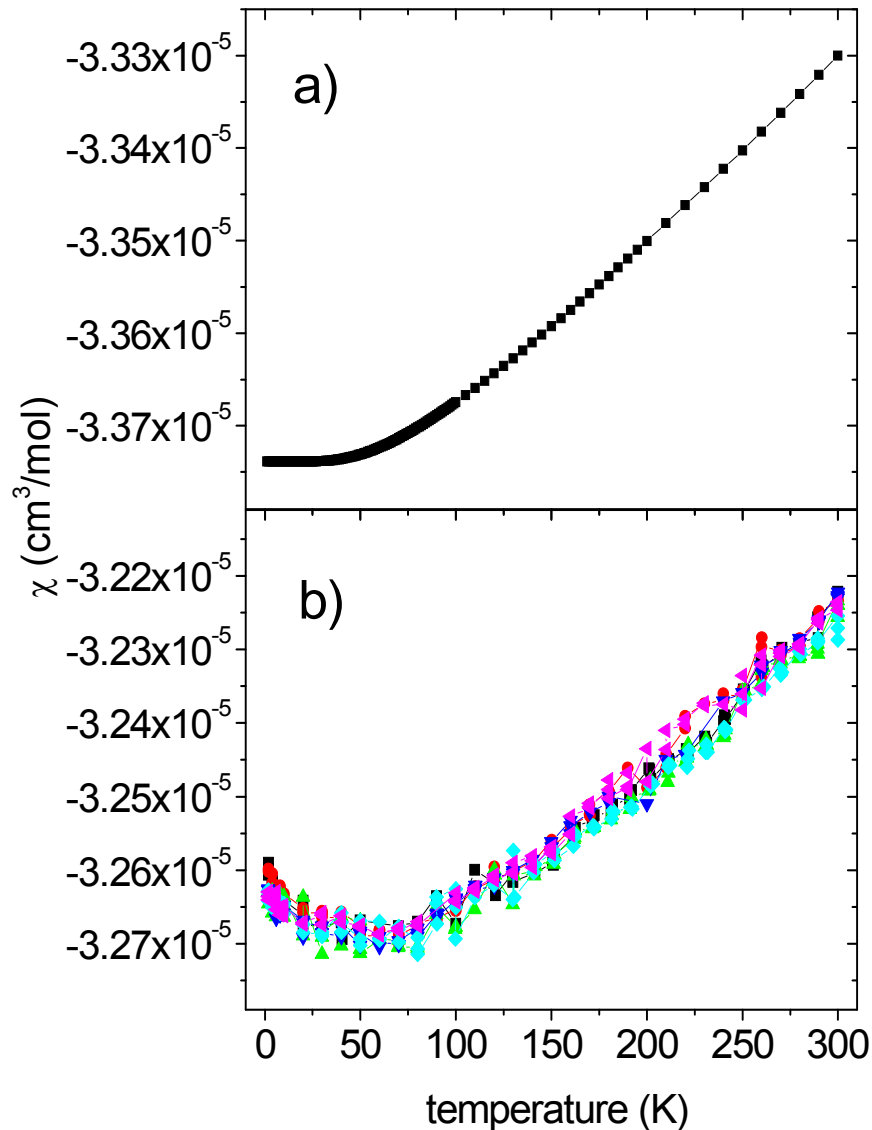
P.W. Sparks et al., Phys. Rev. **163**, 779 (1967)

T. F. Smith et al., J. Phys. C **8**, 2031 (1975)

Übersichtsartikel:

J.S. Blakemore, JAP **53**, R123 (1982)

Erwartung und Experiment für $\chi(T)$ an undotiertem GaAs



Nutze: $\chi_p = B / \beta E_g$

mit $\beta \sim 1$ und $B = 4.5 \cdot 10^{-5} \text{ eV cm}^3/\text{mol}$

und experimentelle Werte
für χ_L und χ_p aus:

S. Hudgens, M. Kastner, H. Fritzsche,
PRL **33**, 1552 (1974)

Nominal undotiertes GaAs Substrat
gemessen bei hohen mag. Feldern
und als Funktion der Temperatur
in verschiedenen Orientierungen mit SQUID

Sehr gute Übereinstimmung für $d\chi/dT$
und konsistent für χ (300 K)

Auch der „diamagnetische Untergrund“
(in SQUID Messungen) ist nicht trivial

Paramagnetismus (II) ($\chi > 0$):

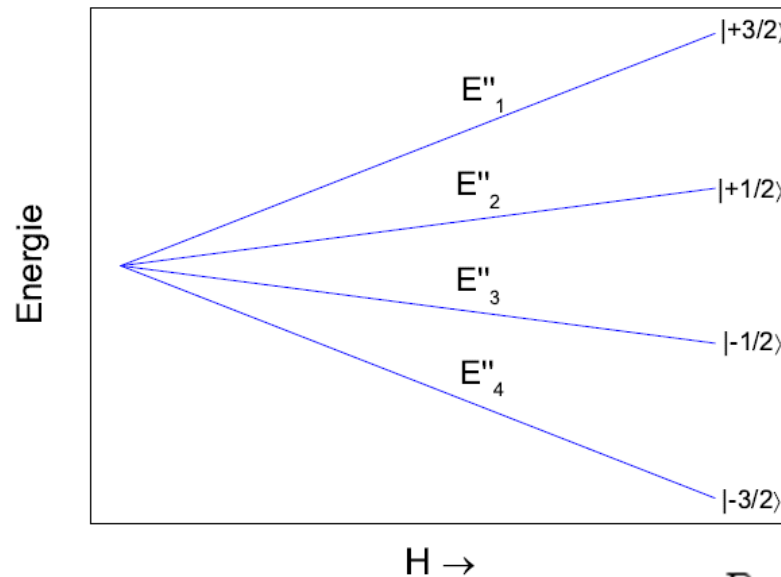
Ausrichten von unkompensierten magnetischen Momenten (ungepaarte Elektronen) durch H –
Langevin Paramagnetismus

„Einfachster“ Fall: nicht-entarteter, PM Grundzustand



Langevin

Brillouin



Thermische Population (Boltzmann-Statistik) von Zeeman-aufgespalteten Niveaus (hier: $S=3/2$)

Magnetisierung gegeben durch
Brillouinfunktion

$$M = N g_J \mu_B J B_J(x)$$

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J}x\right) - \frac{1}{2J} \coth\left(\frac{1}{2J}x\right)$$

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

$$x = (g \mu_B J H) / (k_B T)$$

g_J – Landé g-Faktor (bei reiner L-S Kopplung)

Paramagnetismus (II) ($\chi > 0$):

vom Hamiltonian zur Brillouin Funktion

Hamiltonian (nur Spin; Bahn in g-Faktor „versteckt“):

$$\hat{H}_{spin} = \mu_B g_{\parallel} H_z S_z$$

Erstelle Matrix:

$$[\mathcal{H}_{spin}] = \langle M_s | \mathcal{H}_{spin} | M_s \rangle$$

mit: $|M_s\rangle = | + 3/2\rangle, | + 1/2\rangle, | - 1/2\rangle$ & $| - 3/2\rangle$

$$\longrightarrow [\mathcal{H}_{spin}] = \begin{pmatrix} +\frac{3}{2}\mu_B g_{\parallel} H_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +\frac{1}{2}\mu_B g_{\parallel} H_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}\mu_B g_{\parallel} H_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{2}\mu_B g_{\parallel} H_z \end{pmatrix}$$

benutze:

$$S_z | + 3/2\rangle = +3/2 | + 3/2\rangle$$

$$S_z | + 1/2\rangle = +1/2 | + 1/2\rangle$$

$$S_z | - 1/2\rangle = -1/2 | - 1/2\rangle$$

$$S_z | - 3/2\rangle = -3/2 | - 3/2\rangle$$

und $|M_s\rangle$ orthonormiert

Diagonalelemente der Matrix $[H_{\text{spin}}]$:

$$E_1 = \frac{3}{2} \mu_B g_{\parallel} H_z \quad E_2 = \frac{1}{2} \mu_B g_{\parallel} H_z$$

$$E_3 = -\frac{1}{2} \mu_B g_{\parallel} H_z \quad E_4 = -\frac{3}{2} \mu_B g_{\parallel} H_z$$

Berechnung von M:

$$Z = \sum_{i=1..4} e^{-E_i''/k_B T} \quad \text{Zustandssumme}$$

$$F_s = -k_B T \log(Z) \quad \text{Freie Energie}$$

$$M_s(H, T) = -(\partial F_s / \partial H)_T$$

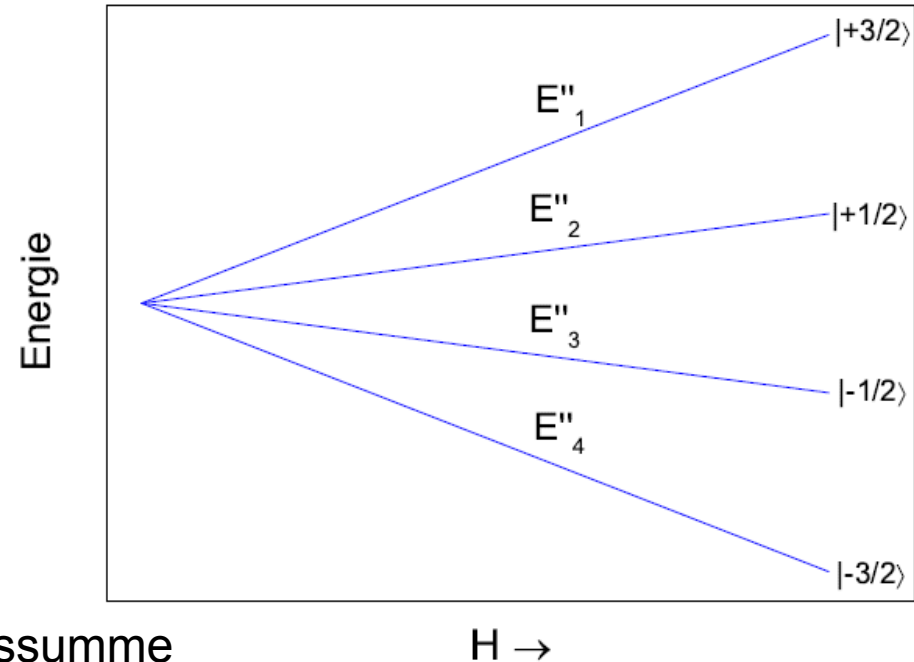
→

$$M = N g_J \mu_B J B_J(x)$$

Brillouinfunktion $B_J(x)$

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J}x\right) - \frac{1}{2J} \coth\left(\frac{1}{2J}x\right)$$

$$x = (g \mu_B J H) / (k_B T)$$



Paramagnetismus (II) ($\chi > 0$):

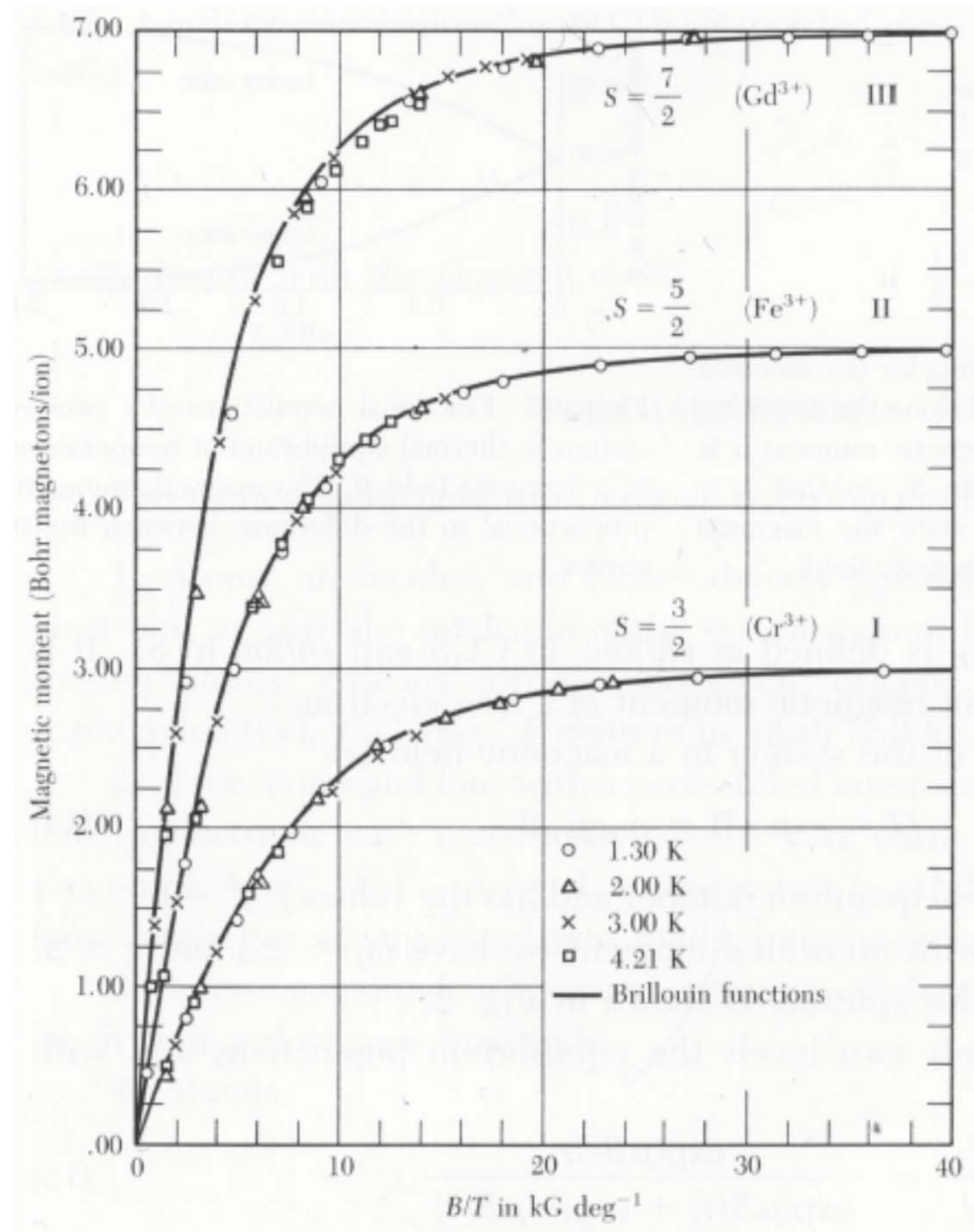
Brillouinfunktion

berechnete Kurven für
 $S = 7/2, 5/2$ und $3/2$

zusammen mit experimentellen
Daten verschiedener
paramagnetischer Ionen

Darstellung M über (H/T)

→ alle experimentellen Daten
jeder Temperatur fallen
aufeinander



nach: Ch. Kittel (Introduction to solid state physics, Wiley, New York)