

Bandferromagnetismus – Stoner Kriterium

Energiebilanz der magnetische Ordnung:

$$\Delta E_{\text{kin}} = \frac{g(E_F)\delta E}{2} \cdot \delta E \quad (\text{Energieschuld})$$

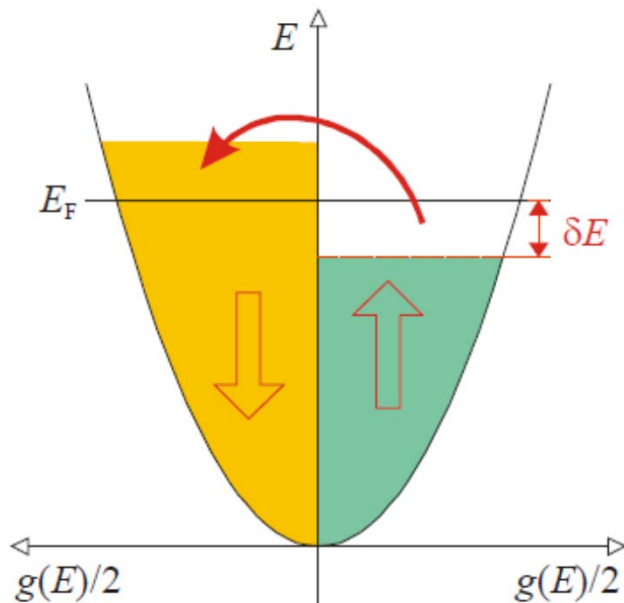
Energiegewinn durch Magnetisierung M

$$n^{\downarrow, \uparrow} = \frac{1}{2}(n \pm g(E_F) \cdot \delta E) \quad 1 \mu_B \text{ pro } e^-$$

$$M = \mu_B (n^{\downarrow} - n^{\uparrow}) = \mu_B g(E_F) \delta E$$



Edmund Clifton Stoner, engl. Physiker, *1899 Esher, Surrey, †1968 Leeds



$$dF = -MdB = -M\mu_0\lambda dM$$

$$\Delta E_{\text{pot}} = - \int_0^M M' \mu_0 \lambda dM' = -\frac{1}{2} \mu_0 \lambda M^2$$

$$= -\frac{1}{2} \underbrace{\mu_0 \mu_B^2 \lambda}_U (g(E_F) \delta E)^2 \quad \lambda - \text{Molekularfeld}$$

$$\Delta E_{\text{tot}} = \Delta E_{\text{pot}} + \Delta E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} g(E_F) (\delta E)^2 (1 - U g(E_F))$$

Energiegewinn (= Ferromagnetismus) für $\Delta E_{\text{tot}} < 0$

$$\longrightarrow U g(E_F) \geq 1$$

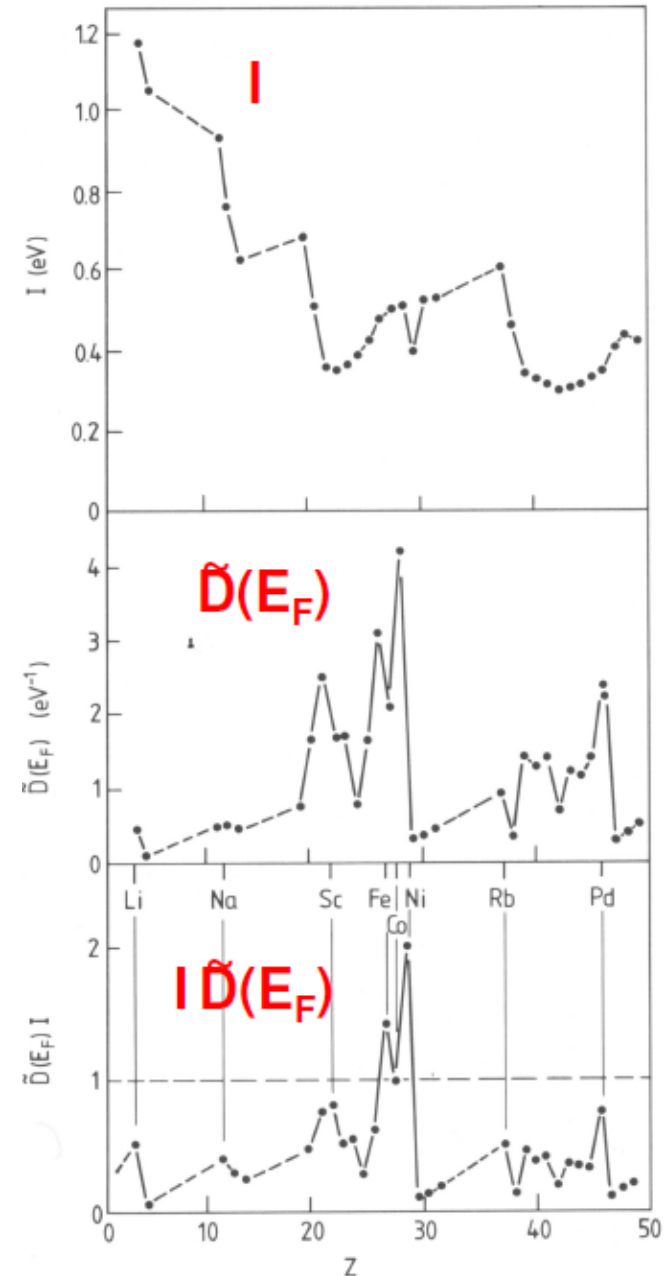
Stoner Kriterium – welche Materialien sind ferromagnetisch?

“Stoner” criterion $I \cdot D(E_F) > 1$

Austauschintegral I

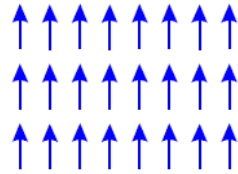
Zustandsdichte an der
Fermi-Kante $D(E_F)$

→ Stoner Kriterium erfüllt für Fe, Co, Ni



Welche Materialien ordnen tatsächlich magnetisch?

ferromagnetisch



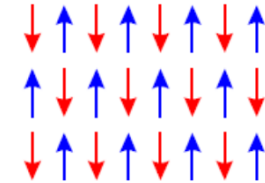
SELECTED FERROMAGNETS, WITH CRITICAL TEMPERATURES T_c AND SATURATION MAGNETIZATION M_0

MATERIAL	T_c (K)	M_0 (gauss) ^a
Fe	1043	1752
Co	1388	1446
Ni	627	510
Gd	293	1980
Dy	85	3000
CrBr ₃	37	270
Au ₂ MnAl	200	323
Cu ₂ MnAl	630	726
Cu ₂ MnIn	500	613
EuO	77	1910
EuS	16.5	1184
MnAs	318	870
MnBi	670	675
GdCl ₃	2.2	550

^a At $T = 0$ (K).

Source: F. Keffer, *Handbuch der Physik*, vol. 18, pt. 2, Springer, New York, 1966; P. Heller, *Rep. Progr. Phys.*, **30**, (pt. II), 731 (1967).

antiferromagnetisch

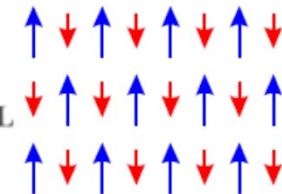


SELECTED ANTIFERROMAGNETS, WITH CRITICAL TEMPERATURES T_c

MATERIAL	T_c (K)	MATERIAL	T_c (K)
MnO	122	KCoF ₃	125
FeO	198	MnF ₂	67.34
CoO	291	FeF ₂	78.4
NiO	600	CoF ₂	37.7
RbMnF ₃	54.5	MnCl ₂	2
KFeF ₃	115	VS	1040
KMnF ₃	88.3	Cr	311

Source: F. Keffer, *Handbuch der Physik*, vol. 18, pt. 2, Springer, New York, 1966.

ferrimagnetisch



SELECTED FERRIMAGNETS, WITH CRITICAL TEMPERATURES T_c AND SATURATION MAGNETIZATION M_0

MATERIAL	T_c (K)	M_0 (gauss) ^a
Fe ₃ O ₄ (magnetite)	858	510
CoFe ₂ O ₄	793	475
NiFe ₂ O ₄	858	300
CuFe ₂ O ₄	728	160
MnFe ₂ O ₄	573	560
Y ₃ Fe ₅ O ₁₂ (YIG)	560	195

^a At $T = 0$ (K).

Source: F. Keffer, *Handbuch der Physik*, vol. 18, pt. 2, Springer, New York, 1966.

Stoner Kriterium – Stoner Verstärkung

$$\underbrace{\mu_0 \mu_B^2 \lambda}_{U}$$

U – Maß für die Stärke des Molekularfelds

Oft wird auch I (Austauschintegral) verwendet:

→ **„Stoner“ criterion** $I \cdot D(E_F) > 1$

→ hohe Zustandsdichte an der Fermikante favorisiert FM

Verstärkung: „fast“ ferromagnetisches Metall (z.B. Pt, Pd)

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{tot}} &= \frac{1}{2} g(E_F) (\delta E)^2 (1 - U g(E_F)) - MB && \text{Energieänderung im Feld} \\ &= \frac{M^2 (1 - U g(E_F))}{2 \mu_B^2 g(E_F)} - MB \end{aligned}$$

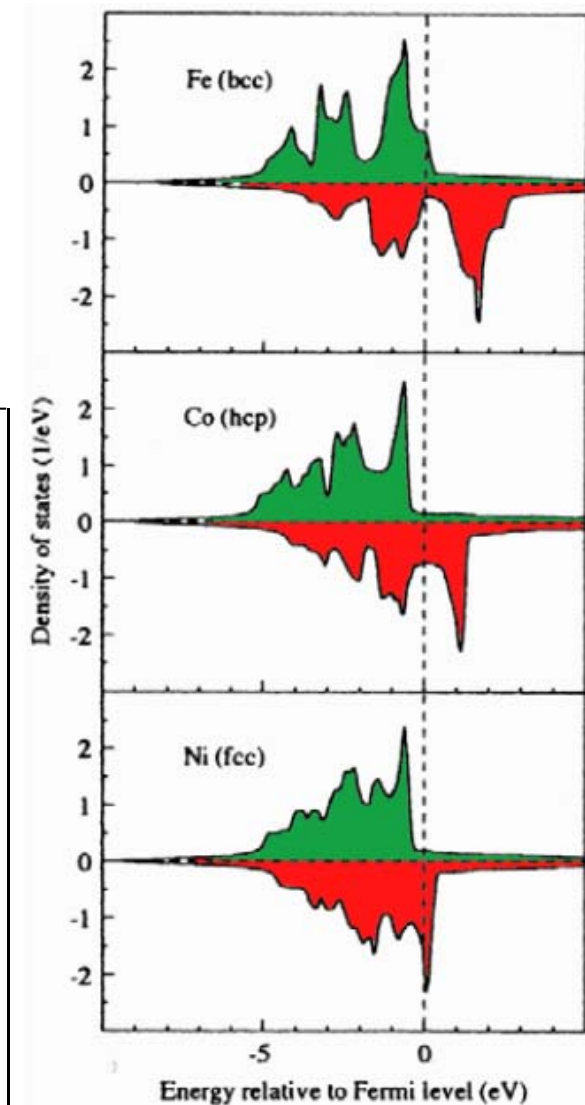
Energieänderung minimieren

$$\frac{\partial \Delta E_{\text{tot}}}{\partial M} = 0 \Leftrightarrow M = \mu_B^2 g(E_F) \frac{B}{1 - U g(E_F)}$$

→ Modifikation der Pauli-Suszeptibilität um $(1 - U g(E_F))^{-1}$

$$\chi = \mu_0 \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{\mu_0 \mu_B^2 g(E_F)}{1 - U g(E_F)} = \frac{\chi_{\text{Pauli}}}{1 - U g(E_F)}$$

„Reale“ Bandstruktur von Fe, Co, Ni



Molekularfeld – Austauschwechselwirkung

Molekularfeld der „Stäke“ λ

Anschaulich: Magnetisierung eines einzelnen (freien) Elektrons im Feld der anderen (magnetisierten) Elektronen (\leftrightarrow Pauli-Suszeptibilität)

→ „Henne – Ei Problem“

Erster Versuch: **Dipol-Dipol Wechselwirkung**

Zwei magnetische Dipole μ_1 und μ_2 im Abstand r

$$E = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left(\mu_1 \cdot \mu_2 - \frac{3}{r^2} (\mu_1 \cdot \mathbf{r})(\mu_2 \cdot \mathbf{r}) \right)$$

Abschätzung für Parallelstellung, Moment $\sim \mu_B$, Abstand \sim Angstrom

$$\longrightarrow E = -\frac{2\mu_0\mu_B^2}{4\pi r^3} \approx 1,6 \cdot 10^{-23} \text{ J} \approx 100 \text{ } \mu\text{eV}$$

Das entspricht ca. **1.2 K**

→ nur bei sehr tiefen Temperaturen relevant

→ Molekularfeld muß andere Ursachen haben

Molekularfeld – Austauschwechselwirkung

Zweiter Versuch: **Heisenbergmodell** $\hat{H}^{\text{Heisenberg}} = -2 \sum_{i < j} J_{ij} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j$

Austauschintegral $J = \int \psi_a^*(\mathbf{r}_1) \psi_b^*(\mathbf{r}_2) \hat{H} \psi_a(\mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$ Überlapp der Wellenfkt.

Häufige Näherungen: nur nächste-Nachbar-Wechselwirkung; $J_{ij} = J = \text{const.}$

→ $H_{\text{Heis}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j$ mit i, j nächste Nachbarn

Betrachte nun die mittlere WW eines Spins j mit dem restlichen Ensemble $\langle S \rangle$

$$\langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N \vec{S}_i \quad \text{„mean field“ Näherung}$$

$\langle S \rangle$ wirkt auf einen Spin wie ein effektives Magnetfeld

$$\hat{H} = - \sum_j g\mu_b \hat{S}_j \vec{B} - \sum_{i,j} J_{ji} \hat{S}_j \hat{S}_i \quad \longrightarrow \quad \hat{H} = - \sum_j g\mu_b \hat{S}_j \left(\vec{B} + \frac{1}{g\mu_b} J_j \langle \vec{S} \rangle \right)$$

Oder ersetze \mathbf{B} durch $\vec{B}_{\text{eff}} = \left(\vec{B} + \frac{1}{g\mu_b} J \langle \vec{S} \rangle \right)$ ← **Molekularfeld**
(Korrelationen werden vernachlässigt)

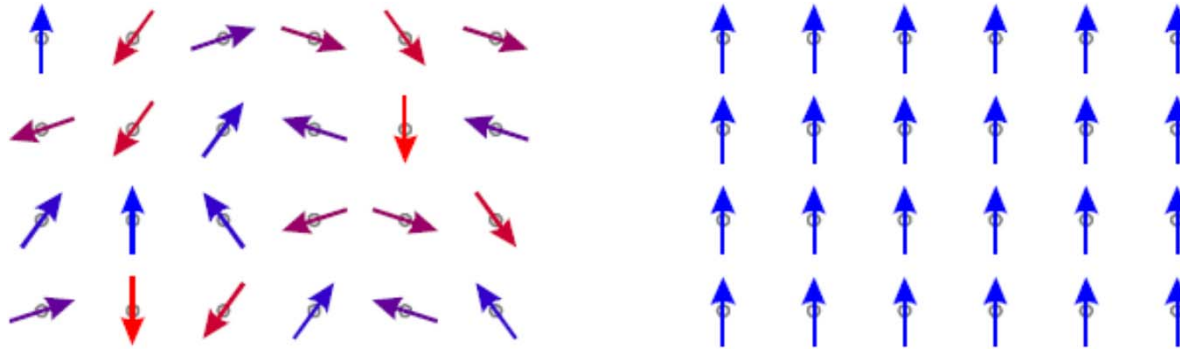
Weißsches Molekularfeld $\sim 10^3$ T

$$\langle S_1 S_2 \rangle = \langle S_1 \rangle \langle S_2 \rangle$$

Ferromagnetisch – Paramagnetisch: Phasenübergang

(a) $T > T_c$: paramagnetisch

(b) $T < T_c$: ferromagnetisch



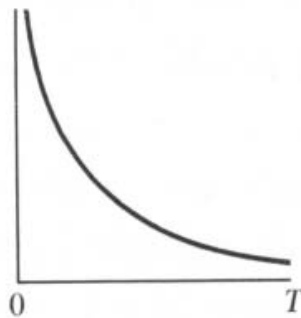
Unordnung – Ordnung

Paramagnetism

Ferromagnetism

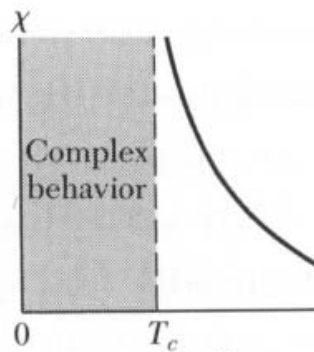
Antiferromagnetism

Susceptibility χ



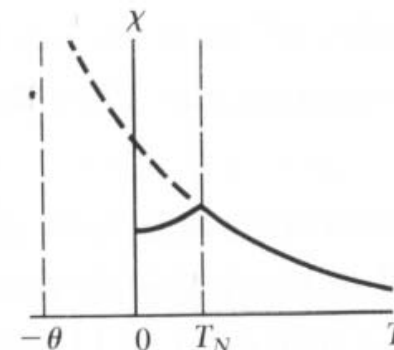
$$\chi = \frac{C}{T}$$

Curie law



$$\chi = \frac{C}{T - T_c}$$

Curie-Weiss law
($T > T_c$)



$$\chi = \frac{C}{T + \theta}$$

($T > T_N$)

Kann man T_C
berechnen oder
vorhersagen?

Divergenz (Maximum) der Suszeptibilität am FM(AFM)–PM Phasenübergang

Ursache der magnetischen Ordnung – mean field Modell

$$H_{\text{spin}} = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + g\mu_B \vec{S}_i \cdot \vec{B}_0 = -\vec{S}_i \cdot \left(\sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_j + g\mu_B \vec{B}_0 \right)$$

Heisenberg Hamiltonian
mit externem Magnetfeld

Heisenberg

Zeeman

$$\vec{B}_{\text{eff}} = \vec{B}_0 + \frac{1}{g\mu_B} \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_j$$

effektives Magnetfeld
(sehr komplizierter Operator)

mean field Annahme: $\langle \vec{S}_i \rangle = \frac{V}{N} \frac{\vec{M}}{g\mu_B}$

$$\sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_j = \langle \vec{S}_j \rangle \sum_{i \neq j} J_{ij} = J_0 \langle \vec{S}_j \rangle$$

$$\vec{B}_{\text{eff}} = \vec{B}_0 + \lambda \mu_0 \vec{M} \quad \text{mit} \quad \lambda = \frac{V}{N} \frac{J_0}{(g\mu_B)^2} \quad \text{und} \quad J_0 = \sum_{i \neq j} J_{ij}$$

Vergleich mit Curie-Weiss Gesetz:

$$\vec{M} = \frac{1}{\mu_0} \chi_p \vec{B}_{\text{eff}} = \frac{1}{\mu_0} \frac{C}{T} (\vec{B}_0 + \lambda \mu_0 \vec{M})$$

$$\chi_p = \frac{C}{T} \quad \text{mit} \quad C = \mu_0 \frac{N}{V} \frac{p^2 \mu_B^2}{3k}$$

$$\vec{M} \mu_0 (T - C\lambda) = C \vec{B}_0$$

$$\chi_{\text{cw}} = \frac{C}{T - T_C}$$

$$T_C = C\lambda$$

$$\lambda = \frac{T_C}{C} = \frac{3k_B V T_C}{N g^2 S(S+1) \mu_B^2}$$

bzw.

$$T_C = \frac{S(S+1)}{3k_B} J_0$$

mean field Curie Temp.

mean field Modell – Überschätzen der Curie Temperatur

RATIO OF THE EXACT CRITICAL TEMPERATURES TO THOSE PREDICTED BY MEAN FIELD THEORY (MFT) FOR SEVERAL NEAREST NEIGHBOR ISING MODELS^a

LATTICE	DIMENSIONALITY	COORDINATION NUMBER	T_c/T_c^{mft}
Honeycomb	2	3	0.5062173
Square	2	4	0.5672963
Triangular	2	6	0.6068256
Diamond	3	4	0.67601
Simple cubic	3	6	0.75172
Body-centered cubic	3	8	0.79385
Face-centered cubic	3	12	0.8162

^a The two-dimensional values of T_c are known in closed form; the values in three dimensions have been computed by extrapolation techniques to the accuracy quoted. Source: M. E. Fisher, *Repts. Prog. Phys.* **30** (pt. II), 615 (1967).

das mean field Modell
vernachlässigt
Korrelationen

→ die Proportionalität

$$T_C = \frac{S(S+1)}{3k_B} J_0$$

überschätzt T_C

je höher die Koordination, desto besser wird mean field

	μ (solid)	μ_L (solid)	μ_L / μ_s (atom)	T_C	T_C Stoner	I
Fe	$2.2\mu_B$	$0.09\mu_B$	$2\mu_B / 4\mu_B$	1044 K	6200 K	0.92eV
Co	$1.7\mu_B$	$0.14\mu_B$	$3\mu_B / 3\mu_B$	1388 K	4800 K	0.99eV
Ni	$0.6\mu_B$	$0.05\mu_B$	$2\mu_B / 3\mu_B^*$	627 K	2900 K	1.01eV

„mean field“

starke Unterschiede zum Experiment

Temperaturverhalten von M und χ

- oberhalb von T_C gilt im mean field Modell $\chi \sim (T-T_C)^{-1}$ (Curie-Weiss-Gesetz)
- unterhalb von T_C existiert eine **spontane Magnetisierung** M (Ordnungsparameter)

M zeichnet eine bestimmte Raumrichtung aus; das System kann nur durch Drehungen um Achsen parallel zu M in sich selbst überführt werden

Einfaches (mean field) Modell für M : **Landau Theorie**

$$F(M) = F_0 + a(T)M^2 + bM^4$$

Reihenentwicklung der freien Energie $F(M)$

nur gerade Exponenten, da Energie nicht von der Richtung von M abhängt

F_0 und $b > 0$ sind Konstanten; $a(T)$ temperaturabhängig

- Phasenübergang bei Vorzeichenwechsel von $a(T)$ bei T_C

Einfachster Fall: $a(T) = a_0(T - T_C)$

Grundzustand: freie Energie minimieren →

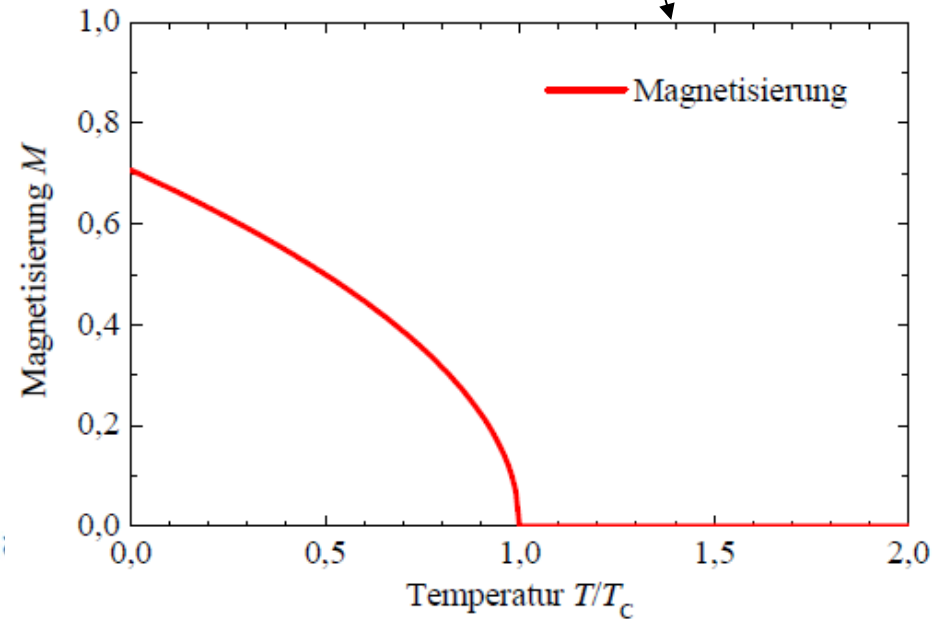
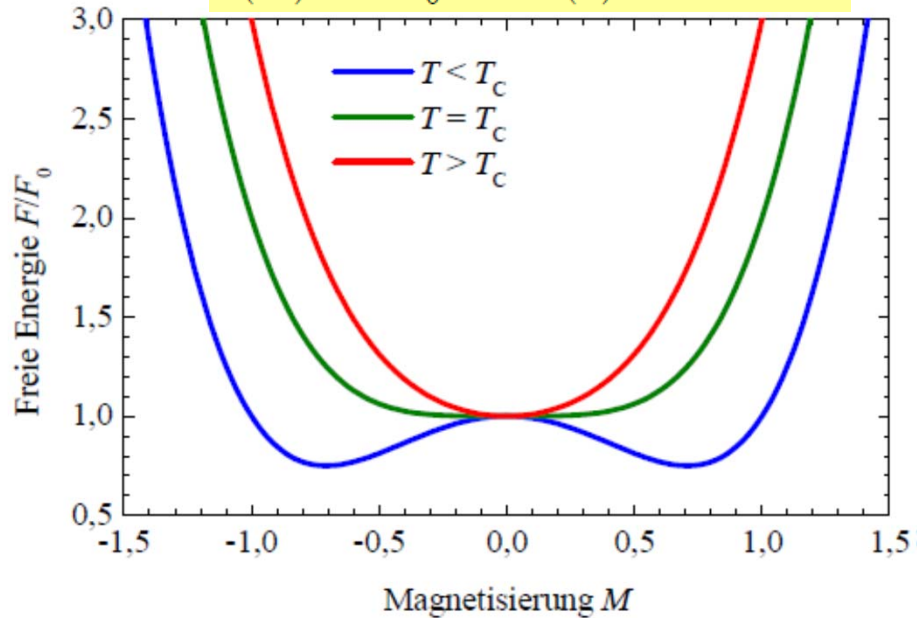
$$\frac{\partial F}{\partial M} \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow 2M [a_0(T - T_C) + 2bM^2] = 0$$

Temperaturverhalten von M: Landau Theorie

aus $\frac{\partial F}{\partial M} = 0 \Rightarrow 2M [a_0(T - T_C) + 2bM^2] = 0$ folgt $M = \begin{cases} 0 \\ \pm \sqrt{\frac{a_0(T_C - T)}{2b}}, T < T_C \end{cases}$

0 für $T < T_C$ nicht stabil, da $\frac{\partial^2 F}{\partial M^2} = 2a_0(T - T_C) + 12bM^2 < 0$

$F(M) = F_0 + a(T)M^2 + bM^4$



Korrelationslänge $\xi \rightarrow$ Fluktuationen auf den Längenskalen von ξ

Bei $T \rightarrow T_C$ geht $\xi \rightarrow \infty$

Anschaulich: F flach bei $T = T_C \rightarrow$ Grundzustand nicht wohldefiniert

$\rightarrow M \sim (T_C - T)^{1/2}$