

## 8. Magnetismus itineranter Elektronen

Magnetismus in Metallen = Instabilität der Fermiflüssigkeit

Unsere Beschreibung: Stoner - Ferromagnetismus

[Magnetismus lokalisierte Elektronen  $\rightarrow$  Mott-Isolatoren, Hubbard-Modell; später].

Bekannte Beispiele für Ferromagnetismus in Metallen:

Eisen (Fe), Kobalt (Co), Nickel (Ni)

$\rightarrow$  3d-Ubergangsmetalle

$\rightarrow$  tight-binding - Systeme mit relativ geringem Überlapp (hoher DOS)

$\rightarrow$  Effekt der Coulomb-W. wichtiger

Im Vergleich sind die meisten 4d und 5d Ubergangsmetalle nicht magnetisch.

Art des magnetischen Phasenübergangs: System nicht magnetisch oberhalb  $T_C$  = Curie-Temperatur.

Kontinuierlicher Phasenübergang zweiter Ordnung.

## 8.1 Stoner - Instabilität

Zentrale Idee eines Phasenübergangs: Divergenz der zugehörigen Suszeptibilität. Im Folgenden Beschreibung mit Mean-Field-Theorie.

### 8.1.1 Stoner-Modell in Mean-Field-Theorie

Betrachte folgendes Modell für Leitungselektronen mit repulsiver Kontaktwechselwirkung

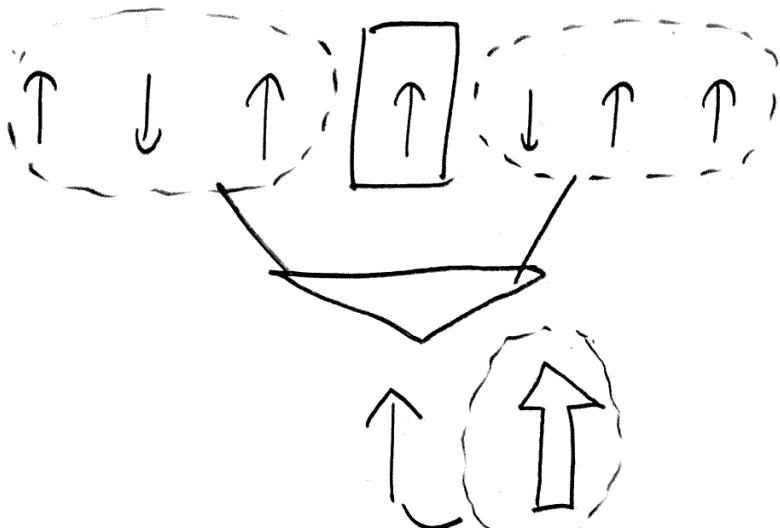
$$H = \sum_{ks} E_k c_{ks}^+ c_{ks} + U \int d^3r d^3r' \varrho_p(r) \delta(r-r') \varrho_v(r')$$

Mit Elektronendichte für spin  $s$ ,  $\varrho_s(r) = \psi_s^+(r) \psi_s(r)$

Kontakt-WW approximiert Coulomb-WW, wegen Pauli-Prinzip nur WW mit  $\uparrow, \downarrow$ .  
( $\rightsquigarrow$  Anstausch-Loch).

Idee zur Beschreibung symmetriegebrochener Zustände: Mean-Field-Theorie.

Ersetze alle umgebenden Elektronen durch ein effektives Magnetfeld ("mean field").

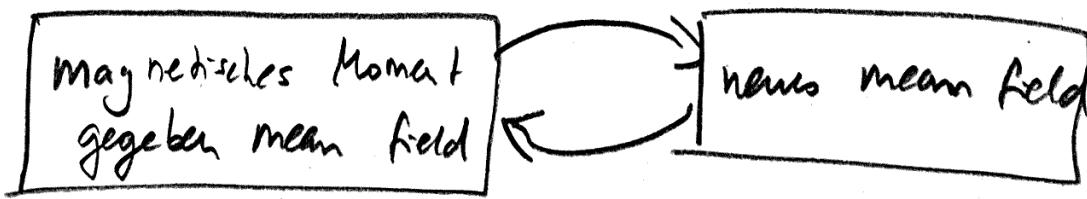


Kopplung des zentralen Spins an effektives Mean Field.

Woher kennen wir den Wert des Mean Fields?

- Berechne das magnetische Moment des zentralen Spins für gegebenes Mean Field  
= effektives Einzelpartikelproblem (Slater-Determinante),  
thermischer Erwartungswert (Fermi-Direc)
- bestimme daraus das neue Mean Field
- Neu berechnung des zentralen Spins  
usw. bis Konvergenz erreicht.

Selbstkonsistenzschleife



Schreibe

$$S_s(r) = n_s + [s_s(r) - n_s] \quad (*)$$

mit

$$n_s = \langle s_s(r) \rangle = \frac{\text{Tr} [s_s e^{-\beta H}]}{\text{Tr} e^{-\beta H}}.$$

Sei die Abweichung vom mean field  $n_s$  klein:

$$\langle [s_\uparrow(r) - n_\uparrow][s_\downarrow(r) - n_\downarrow] \rangle \ll n_\uparrow n_\downarrow.$$

Einsetzen von (\*) in H ergibt

$$\begin{aligned} H_{mf} &= \sum_{ks} \epsilon_k c_{ks}^+ c_{ks} + U \int d^3r [s_\uparrow(r) n_\downarrow + s_\downarrow(r) n_\uparrow - n_\uparrow n_\downarrow] \\ &= \sum_{ks} (\epsilon_k + Un_\downarrow) c_{ks}^+ c_{ks} - U \Omega n_\uparrow n_\downarrow \end{aligned}$$

Mean-Field-Hamiltonian: Hier wurden Terme

$$\underbrace{\langle [s_\uparrow - n_\uparrow][s_\downarrow - n_\downarrow] \rangle}_{\text{Fluktuationen.}} \text{ vernachlässigt.}$$

Berechne  $n_\uparrow$  mittels  $H_{mf}$ :

$$n_\uparrow = \langle s_\uparrow(r) \rangle = \frac{1}{\Omega} \sum_k \langle c_{k\uparrow}^+ c_{k\uparrow} \rangle = \frac{1}{\Omega} \sum_k f(\epsilon_k + Un_\downarrow)$$

$$= \int d\epsilon \frac{1}{\Omega} \sum_k \delta(\epsilon - \epsilon_k - Un_\downarrow) f(\epsilon)$$

$$= \int d\epsilon \frac{1}{2} N(\epsilon - Un_\downarrow) f(\epsilon).$$

Analog für  $n_{\downarrow}$ :

Zudem müssen wir die korrekte Teilchendichte  $n_0$  implementieren. Die Magnetisierung  $M = \mu_B m$  ist proportional zu  $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$  und damit

$$n_s = \frac{1}{2} [(n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) + s(n_{\uparrow} - n_{\downarrow})] = \frac{n_0 + s \cdot m}{2}$$

$$\Rightarrow n_0 = \frac{1}{2} \int d\epsilon (N(\epsilon - Un_0) + N(\epsilon - Un_{\uparrow})) f(\epsilon)$$

$$m = \frac{1}{2} \int d\epsilon (N(\epsilon - Un_{\downarrow}) - N(\epsilon - Un_{\uparrow})) f(\epsilon)$$

bzw. äquivalent dazu

$$n_0 = \frac{1}{2} \sum_s \int d\epsilon N\left(\epsilon - \frac{Un_0}{2} - s \frac{Um}{2}\right) f(\epsilon)$$

$$m = -\frac{1}{2} \sum_s s \int d\epsilon N\left(\epsilon - \frac{Un_0}{2} - s \frac{Um}{2}\right) f(\epsilon)$$

→ muss i. A. numerisch gelöst werden.

### 8.1.2 Stoner-Kriterium

Eine genäherte Lösung kann gefunden werden für  $M \ll n_0$ .

Entwicklung des chemischen Potentials

$$\mu(m, T) = \epsilon_F + \Delta\mu(m, T),$$

wobei  $\epsilon_F$  den konstanten Shift  $-U_{n_0/2}$  enthält.

Fermi-Dirac:  $f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta[\epsilon - \mu(m, T)]} + 1}$

mit  $\beta = (k_B T)^{-1}$ .

Entwicklung der Gleichung für  $n_0$  für kleine  $m$  mittels Sommerfeld-Entwicklung:

$$n_0 \approx \int d\epsilon f(\epsilon) \left[ N(\epsilon) + \frac{1}{2} \left( \frac{Um}{2} \right)^2 N''(\epsilon) \right]$$

$$\approx \underbrace{\int_0^{\epsilon_F} d\epsilon N(\epsilon) + N(\epsilon_F) \Delta\mu}_{= n_0} + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 N'(\epsilon_F) + \frac{1}{2} \left( \frac{Um}{2} \right)^2 N'(\epsilon_F)$$

$$\Rightarrow \Delta\mu(m, T) \cong - \frac{N'(\epsilon_F)}{N(\epsilon_F)} \left[ \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{Um}{2} \right)^2 \right].$$

Analoge Entwicklung der Gleichung für  $m$ :

$$m \approx \int d\epsilon f(\epsilon) \left[ N'(\epsilon) \frac{Um}{2} + \frac{1}{3!} N'''(\epsilon) \left( \frac{Um}{2} \right)^3 \right]$$

$$\approx \left[ N(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 N''(\epsilon_F) + \frac{1}{3!} \left( \frac{Um}{2} \right)^2 N''(\epsilon_F) + \Delta\mu N'(\epsilon_F) \right] \left( \frac{Um}{2} \right)$$

Durch Einsetzen des Resultats für  $\Delta\mu$  finden wir:

$$(*) \quad m = N(\epsilon_F) \left[ 1 - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \Lambda_1^2(\epsilon_F) \right] \left( \frac{U_m}{2} \right) - N(\epsilon_F) \Lambda_2^2(\epsilon_F) \left( \frac{U_m}{2} \right)^3$$

mit

$$\Lambda_1^2(\epsilon_F) = \left( \frac{N'(\epsilon_F)}{N(\epsilon_F)} \right)^2 - \frac{N''(\epsilon_F)}{N(\epsilon_F)}$$

$$\Lambda_2^2(\epsilon_F) = \frac{1}{2} \left( \frac{N'(\epsilon_F)}{N(\epsilon_F)} \right)^2 - \frac{N''(\epsilon_F)}{3! N(\epsilon_F)}.$$

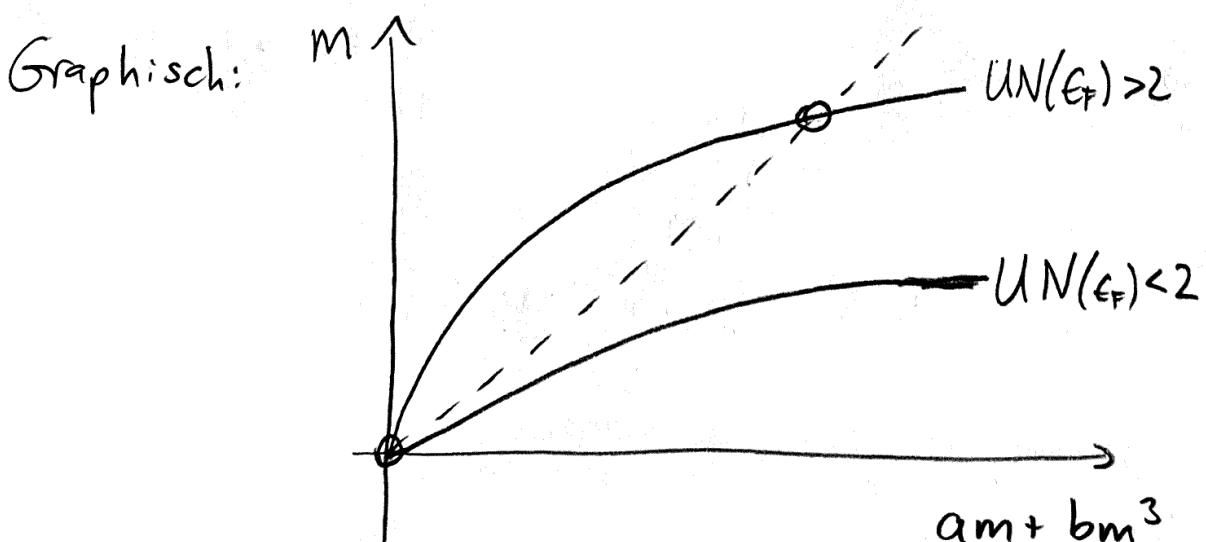
Struktur von (\*):

$$m = am + bm^3$$

mit  $b < 0$ .

$$\Rightarrow \text{zwei Lösungen: } m^2 = \begin{cases} 0 & a < 1 \\ \frac{1-a}{b} & a \geq 1. \end{cases}$$

$\Rightarrow$  kritischer Punkt bei  $a=1$ .



Die Bedingung  $a=1$  entspricht hier:

$$1 = \frac{1}{2} U N(\epsilon_F) \left[ 1 - \frac{\pi^2}{6} \left( k_B T_c \right)^2 - L_1^2(\epsilon_F) \right]$$

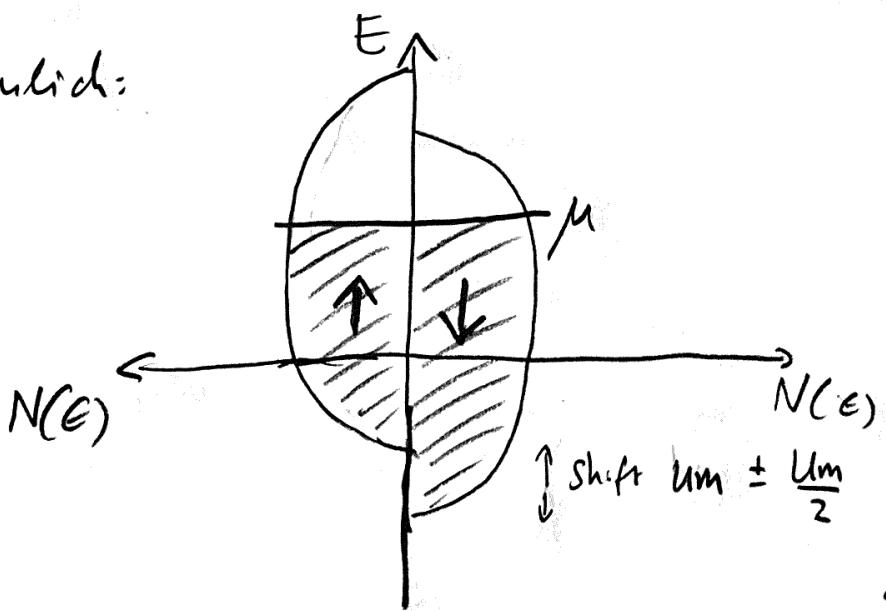
Stoner-Kriterium  
für  
 $T > 0$

$$\Rightarrow k_B T_c = \frac{\sqrt{6}}{\pi L_1(\epsilon_F)} \sqrt{1 - \frac{2}{U N(\epsilon_F)}} \propto \sqrt{1 - \frac{U_c}{U}}$$

für  $U > U_c = \frac{2}{N(\epsilon_F)}$  "Stoner-Kriterium"

$\Rightarrow$  Instabilitätsbedingung für die paramagnetische Fermiflüssigkeit.  $T_c$  = Curie-Temperatur.

Anschaulich:

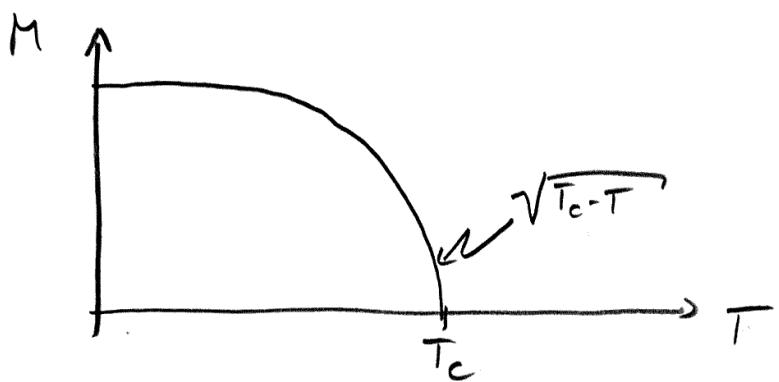


Temperaturabhängigkeit der spontanen Magnetisierung:

$$M(T) = \mu_B m(T) \propto \sqrt{T_c - T}$$

$(T \leq T_c)$

$T_c - T \ll T_c$

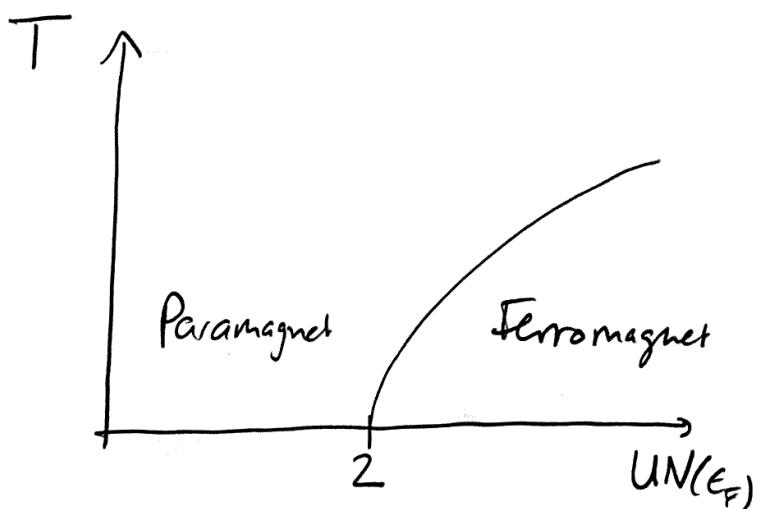


Es gilt:

$$T_c > 0 \quad \text{für} \quad UN(\epsilon_F) > 2$$

$$T_c = 0 \quad \text{für} \quad UN(\epsilon_F) = 2^+$$

$$T_c = 0 \quad \text{für} \quad UN(\epsilon_F) < 2 \rightarrow \text{kein Phasenübergang}$$



$T=0$ : Quantenphasenübergang versus  $UN(\epsilon_F)$   
 (kann im Experiment durch Druck kontrolliert werden)

Quanten  $UN(\epsilon_F)$  fest: thermischer Phasenübergang als Funktion  
 fluktuationen der Temperatur

Entropie, thermische Fluktuationen

Beispiel: Ni ist ferromagnetisch,  
Cu nicht ferromagnetisch

Grund:  $UN(\epsilon_F)$  unterschiedlich — Ni  
hat höheres  $N(\epsilon_F)$ .

(3d versus 4s Band an Fermikante.)

### 8.1.3 Spinsuszeptibilität für $T > T_c$

Idee: Betrachte Spin-Response im paramagnetischen Zustand bei  $T > T_c$ .

Lege kleines Zeeman-Feld an:

$$H_Z = -g\mu_B \int d^3r H \frac{1}{2} \left\{ \hat{S}_p(r) - \hat{S}_d(r) \right\}$$

Wir wissen bereits (Selbstkonsistenzgl.):

$$m = -\frac{1}{2} \int d\epsilon f(\epsilon) \sum_s s N(\epsilon - \mu_B sH - \frac{Um}{2})$$

$$\propto \int d\epsilon f(\epsilon) N'(\epsilon) \left[ \frac{Um}{2} + \mu_B H \right]$$

$$= N(\epsilon_F) \left[ 1 - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \sum_n (\epsilon_F)^2 \right] \left[ \frac{Um}{2} + \mu_B H \right].$$

$$\Rightarrow M = M_0 m = \frac{\chi_0(T)}{1 - U\chi_0(T)/2\mu_B^2} H \quad \text{und daraus}$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{\chi_0(T)}{1 - 4\chi_0(T)/\mu_B^2}$$

mit  $\chi_0(T) = \mu_B^2 N(E_F) \left[ 1 - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \Lambda_1(E_F)^2 \right]$ .

$\Rightarrow$  Nenner von  $\chi$  wird genau dann = 0,  
wenn da. Stoner - Kriterium erfüllt ist  
(für  $T > 0$ )

### Die Suszeptibilität

$$\chi(T) \propto \frac{\chi_0(T_c)}{\frac{T_c^2}{T^2} - 1} \text{ divergiert bei } T_c$$

und zeigt an, dass es einen Phasen-  
übergang gibt:  $\chi \xrightarrow[T \approx T_c]{} |T_c - T|^{-\gamma}$   
kritischer Exponent  $\gamma = 1$   
(“mean-field-artig”).

Übung: Antiferromagnetische Instabilität  
im Hubbard - Modell (Slater - Antiferro-  
magnetismus).