TT 10.44

Mikroskopische Ursachen des Ferromagnetismus

N. Blümer, K. Held, M. Kollar, J. Schlipf, M. Ulmke, D. Vollhardt und J. Wahle

Universität Augsburg

Einleitung

Auf der Suche nach den mikroskopischen Mechanismen des metallischen Ferromagnetismus hat es in den letzten Jahren erhebliche Fortschritte gegeben: Es wurde gezeigt, daß das Hubbard–Modell unter bestimmten Voraussetzungen an die kinetische Energie, insbesondere einer asymmetrischen Zustandsdichte mit hohem spektralen Gewicht in der Nähe der Bandkanten, Ferromagnetismus zeigt. Für reale Ferromagnete kann man erwarten, daß weitere Mechanismen, insbesondere Hundsche Kopplung und Nächst–Nachbar–Wechselwirkungen, eine Rolle spielen.
Auf diesem Poster werden diese mikroskopischen Mechanismen getrennt behandelt, um Unterschiede und Gemeinsamkeiten herauszuarbeiten.

Modelle

Ausgangspunkt für die mikroskopische Beschreibung des Ferromagnetismus sind kinetische Energie und Coulomb–Wechselwirkung. Diese werden –stark vereinfacht– in einem Mehr–Band–Hubbard–Modell beschrieben:

$$\hat{H}^{M-\mathrm{Band}}_{\mathrm{Hubbard}} = \sum_{\nu=1}^{M}\sum_{ij\sigma} t_{ij}\, \hat{c}^{\dagger}_{i\nu\sigma}\hat{c}_{\,j\nu\sigma} + U\sum_{\nu=1}^{M}\sum_{i} \hat{n}_{i\nu\uparrow}\hat{n}_{i\nu\downarrow}.$$

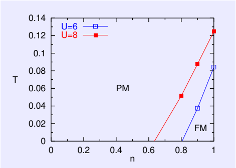
Hinzu kommen gegebenenfalls Hundsche Kopplung und Nächst–Nachbar–Wechselwirkungen.

Methoden

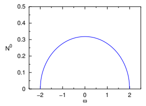
Ferromagnetismus tritt bei mittleren bis starken Coulomb–Wechselwirkungen auf. Störungstheoretisch zugänglich ist bei starker Kopplung ist dabei der Mechanismus der Nächst–Nachbar–Austausch–Wechselwirkung bei halber Füllung und der Mechanismus der Hundschen Kopplung im orbital entarteten 2–Band–Modell bei Viertelfüllung. Bei diesen ganzzahligen Füllungen erhält man jedoch ferromagnetische Isolatoren. Daher werden hier im Rahmen der dynamischen Mean–Field–Theorie die entsprechenden Modelle numerisch mit Quanten–Monte–Carlo–Simulationen gelöst. Der Einfluß des dichteabhängigen Hüpfens wird in der Gutzwiller-Approximation abgeschätzt.

Nächst-Nachbar-Wechselwirkung

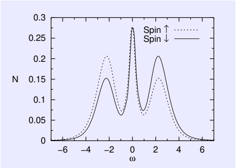
$$\hat{H} = \hat{H}^{1-\mathrm{Band}}_{\mathrm{Hubbard}} - 2F\sum_{\langle ij\rangle} \hat{\mathbf{S}}_i\cdot\hat{\mathbf{S}}_j + X\sum_{\langle ij\rangle\,\sigma}(\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}_{\,j\sigma} + \mathrm{h.c.})(\hat{n}_{i,-\sigma}+\hat{n}_{j,-\sigma})$$



Magnetisches T–n–Phasendiagramm für $F^*=ZF=0.5$ und $X^*=\sqrt{Z}X=0$.

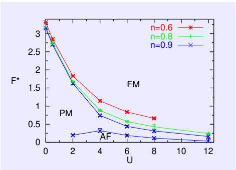


Bethe-DOS
$t^* = t\sqrt{Z} \equiv 1$

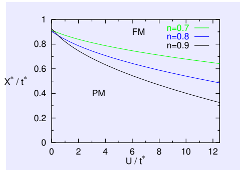


Wechselwirkende DOS für $n=1$, $U=6$, $F^*=0.5$, $X=0$ und $T=0.07$.

Die Coulomb-Wechselwirkung enthält immer auch einen direkten Austausch-Term $F \ll U$ zwischen benachbarten Gitterplätzen, die naturgemäß zum Ferromagnetismus führen kann. Ferner tritt ein korreliertes Hüpfen X auf, das zu einer spinabhängigen Renormierung des Bandes führt. Nahe halber Füllung erhält man in Störungstheorie ein effektives t–J–Modell mit $J_{\mathrm{eff}} = 4(X-t)^2/U - 2F$.



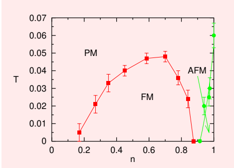
Magnetisches Phasendiagramm für $T=0$ und $X=0$ (QMC-Simulation mit $T\to 0$ Extrapolation). Für $n \leq 0.8$ tritt kein Antiferromagnetismus auf.



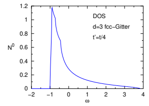
Magnetisches Phasendiagramm für $T=0$ und $F=0$ in Gutzwiller-Approximation (AF- und SL-Phasen werden nicht betrachtet). Bei sehr großen $U \gtrsim 25$ wird die Gutzwiller-Wellenfunktion unzuverlässig, weil sie die Energie des Paramagneten überschätzt.

Asymmetrische Zustandsdichte

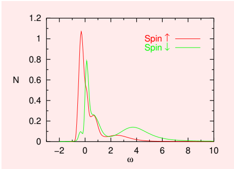
$$\hat{H} = \hat{H}^{1-\mathrm{Band}}_{\mathrm{Hubbard}} \quad \text{mit fcc-DOS}$$



Magnetisches T–n–Phasendiagramm für asymmetrische fcc-DOS $t'=t/4$, $U=6$.



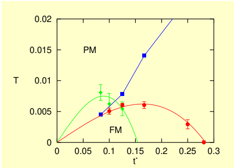
"$d=3$" fcc-DOS mit $t'=t/4$



Wechselwirkende DOS für $U=4$, $n=0.58$, $T=0.04$.

Im 1-Band-Hubbard-Modell bewirkt der Hubbard-Term die Bildung fluktuierender, lokaler Momente. Unter bestimmten Voraussetzungen an die kinetische Energie, insbesondere bei einem hohen spektralen Gewicht in der Nähe der Bandkanten, können diese Momente ferromagnetisch ordnen.

Qualitative Abhängigkeit vom Gitterabstand



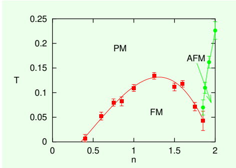
Änderung der Curie-Temperatur mit dem Überlapp der Wellenfunktionen $q \propto t^*$. Blau: Nächst-Nachbar-Wechselwirkung F; rot: asymmetrische DOS; grün: Hundsche Kopplung $F_0=0.25$ ($V_0=0.75$).

Verringert man den Gitterabstand, so steigt der Überlapp q der Wellenfunktionen zwischen benachbarten Gitterplätzen. Dieser Effekt wird qualitativ analysiert unter der einfachen Annahme, daß der Hüpfterm t linear und die Nächst-Nachbar-Wechselwirkung F quadratisch mit dem Überlapp q wächst, d.h. $F^* \propto t^{*2}$.

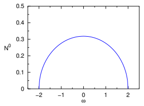
$U \equiv 1$ setzt die Energieskala
$F^* = 3t^{*2}$ $\approx 10^{-1}\cdot U$ für typische t^*

Hundsche Kopplung

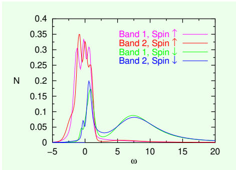
$$\hat{H} = \hat{H}^{2-\mathrm{Band}}_{\mathrm{Hubbard}} + \sum_{i\sigma\sigma'}(V_0 - \delta_{\sigma\sigma'}F_0)\,\hat{n}_{i,\,\nu=1,\,\sigma}\hat{n}_{i,\,\nu'=2,\,\sigma'}$$



Magnetisches T–n–Phasendiagramm für $F_0=4$, $U=9$ und $V_0=5$.



Zwei entartete Bänder mit Bethe-DOS
$t^* = t\sqrt{Z} \equiv 1$



Wechselwirkende DOS für $U=9$, $V_0=5$, $F_0=4$, $n=1.25$ und $T=0.09$.

In einem Mehrband-Modell (z.B. bei zwei entarteten Bändern) kann die Hundsche Kopplung F_0 Ursache des Ferromagnetismus sein.

Zusammenfassung

Die beiden mikroskopischen Mechanismen für den Ferromagnetismus, die auf einer asymmetrischen Zustandsdichte und der Hundschen Kopplung F_0 beruhen, zeigen ein erstaunlich ähnliches Verhalten. Starke Unterschiede findet man zwischen diesen beiden Mechanismen und der Nächst–Nachbar–Austausch–Wechselwirkung F. So stabilisiert der F–Term (wie auch der X-Term) Ferromagnetismus in der Nähe halber Bandfüllung. Hundsche Kopplung und asymmetrischen Zustandsdichte zeigen dagegen die stärkste Tendenz zum Ferromagnetismus abseits halber Füllung und Antiferromagnetismus bei halber Füllung (auch Fe, Co und Ni sind im Gegensatz zu Cr und Mn gerade nicht halb–gefüllt). Der F–Term sagt bei einem steigenden Überlapp der Wellenfunktion eine stark wachsende Tendenz zum Ferromagnetismus voraus. Auch dies entspricht nicht der experimentellen Situation.

Hundsche Kopplung oder asymmetrische Zustandsdichte (oder beide Mechanismen zusammen) sind die mikroskopische Ursache für metallischen Ferromagnetismus. Der Nächst–Nachbar–Austausch kann nicht die treibende Kraft hierfür sein.