

# Magnetische Anisotropie und Magnetostriktion (Theorie)

Stefan Blügel[\*]  
Institut für Festkörperforschung  
Forschungszentrums Jülich

## 1 Einleitung

Ferromagnetismus, Antiferromagnetismus und Ferrimagnetismus sind Erscheinungsformen des Magnetismus, die durch eine *spontane kollektive Ordnung* der permanenten magnetischen Momente – der Magnetisierung  $\mathbf{M}$  – des Festkörpers für Temperaturen unterhalb einer kritischen Temperatur  $T^*$  (Curie-Temperatur  $T^* = T_c$  für Ferro- und Ferrimagnete und der Néel-Temperatur  $T^* = T_N$  für Antiferromagnete) gekennzeichnet sind. Oberhalb der kritischen Temperatur verhalten sich die Materialien wie normale Paramagnete. Dirac und Heisenberg haben 1926, unabhängig voneinander, die quantenmechanische Austauschwechselwirkung als entscheidende Ursache für den kollektiven Magnetismus erkannt. Die Austauschwechselwirkung beruht auf dem Pauli-Prinzip und der Coulomb-Wechselwirkung: das Pauli-Prinzip verhindert, daß zwei Elektronen mit gleichem Spin den gleichen Orbitalzustand besetzen, so daß die effektive elektrostatische Coulombabstoßung für ein Paar von Elektronen gleichen Spins schwächer ist als für Elektronen antiparallelen Spins und somit die Gesamtenergie durch Aufhebung der energetischen Entartung bezüglich der relativen Spineinstellung der Atome des Festkörpers verringert werden kann. Die Energien und magnetischen Felder, die bei der Austauschwechselwirkung involviert sind kann man mit folgender einfacher Überlegung abschätzen:  $E_x \approx \mu_B B_x \approx k_B T^*$ . Berücksichtigt man für das Bohr'sche Magneton  $\mu_B = e\hbar/2mc = 0.579 * 10^{-4}$  eV/T und für die Boltzmannkonstante  $k_B = 0.862 * 10^{-4}$  eV/K, dann erhält man für die üblichen Ferromagnete:

**Tabelle 1:** Kritische Temperaturen  $T_c$ , entsprechende Energien  $k_B T_c$  und Austauschfelder  $B_x$  einiger wichtiger Ferromagnete.

	$T_c$ [K]	$k_B T_c$ [meV]	$B_x$ [T]
Fe	1043	89.907	1552.79
Co	1393	120.077	2073.86
Ni	631	54.392	939.42
Gd	290	24.998	431.74

Zum Vergleich sei darauf hingewiesen, daß 1 Tesla bereits ein starkes Labormagnetfeld ist, 10-20 Tesla bereits sehr hohe Laborfelder sind und 300 Tesla nur für Bruchteile einer Sekunde in Extremmagnetfeldlabors erzeugt werden können. Austauschfelder sind also verglichen zu Laborfelder riesig. Eine akzeptable Beschreibung der Austauschwechselwirkung wird durch das Heisenberg Modell geliefert. Der entsprechende Modellhamiltonoperator mit klassischen Spins des Betrags  $S$ , lokalisiert an den Atomorten  $i, j$  und der Austauschkonstanten  $J_{ij}$ , die die interatomare Austauschwechselwirkung zwischen den Spins beschreibt, lautet:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j. \quad (1)$$

Offensichtlich hängt die Heisenberg'sche Austauschwechselwirkung vom Skalarprodukt  $\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j$  ab. Ein Skalarprodukt ist invariant bezüglich der Wahl des Koordinatensystems und die Energie ist nur eine Funktion des Betrages der Magnetisierung  $M = g\mu_B \langle S_z \rangle$  aber nicht eine Funktion der Richtung der Magnetisierung  $\widehat{\mathbf{M}} = \mathbf{M}/M$ , d.h. die Austauschwechselwirkung ist isotrop. Isotrop sind auch die kritische Temperatur und die Sättigungsmagnetisierung.

Auf der anderen Seite ist es eine wohlbekannte Tatsache aus dem Alltag, daß die Magnetisierung im allgemeinen in eine bevorzugte Richtung weist (siehe Kompaßnadel). Diese Brechung der Isotropie – die magnetische Anisotropie – ist das Thema dieses Vortrages. Der Magnetismus spielt sich im kristallinen Festkörper ab, und tatsächlich liegt die Magnetisierung bevorzugt entlang gewisser Kristallachsen, aber auch in Richtungen, die bestimmt sind durch die makroskopische Form des Körpers. Den erstgenannten Beitrag zur Anisotropie nennt man die *Kristallanisotropie* oder *magnetokristalline Anisotropie* und den zweitgenannten *Formanisotropie* oder *Entmagnetisierungsanisotropie*. D.h. die magnetische Anisotropie wird sowohl bestimmt durch intrinsische Eigenschaften des Materials als auch extrinsische Eigenschaften.

Verallgemeinert bezeichnet die magnetische Anisotropieenergie den Beitrag der magnetischen Energie, der von der Richtung der Magnetisierung  $\widehat{\mathbf{M}}$  abhängt. Die Energie, die benötigt wird, die Magnetisierung von der Richtung minimaler Energie (leichte Magnetisierungsachse) in die Richtung maximaler Energie (schwere Magnetisierungsachse) zu drehen, beträgt für Übergangsmetalle größenordnungsmäßig zwischen  $10^{-3}$  meV/Atom (z.B. für die kubischen Volumenmaterialien Fe, Ni) und 0.1–1 meV/Atom für Multilagen, entsprechend zwischen  $10^{-2}$  K und 10 K (siehe auch Vergleich in Tabelle (2)). Sie ist winzig verglichen zu den übrigen magnetischen Energien. Außer im Bereich tiefer Temperaturen spielt sie keine Rolle für die Thermodynamik magnetischer Volumensysteme. Die, dieser Energie entsprechenden, externen Magnetfelder liegen in der Größenordnung von 0.01 bis 10 T. Dies sind Felder, die unter normalen Laborbedingungen zu erreichen sind.

Die magnetische Anisotropie hat auf die theoretischen Physiker/innen von Beginn an eine große Faszination ausgeübt und die theoretische Erforschung begann in den 30-

**Tabelle 2:** Vergleich magnetischer Anisotropieenergien (MAE) pro Volumeneinheit der idealen Übergangsmetallvolumensysteme Fe, Co, Ni, mit Übergangsmetallmultilagensystemen und anderen Verbindungen. Man sieht, bei Übergangsmetallen (TM) in unterschiedlichen Strukturen können sich deren MCA Werte um Größenordnungen ändern.

System		MAE [MJ/m <sup>3</sup> ]	MAE [ $\mu$ eV/TM atom]
Bulk	Fe	0.017	1.4
	Co	0.042	2.7
	Ni	0.85	65
Multilagen	Co/Ni	2	
	Co/Pd, Co/Pt	5	300
Permanentmagnete	YCo <sub>5</sub>	7	760
	Nd <sub>2</sub> Fe <sub>14</sub> B	12	
	SmCo <sub>5</sub>	30	

iger und 40-iger Jahren des 20. Jahrhunderts, direkt nachdem die Ursache des Ferromagnetismus als Folge der Austauschwechselwirkung durch Heisenberg erklärt wurde. 1937 veröffentlichte van Vleck [1] eine theoretische Arbeit zur magnetischen Anisotropie von kubischen, ferromagnetischen Kristallen. Er erkannte, daß relativistische Effekte die mikroskopische Ursache für den Bruch der Rotationsinvarianz bezüglich der Spinquantisierungsachsen sind und daß relativistische Korrekturen zur ansonsten nichtrelativistischen Beschreibung des Magnetismus die Anisotropie qualitativ beschreiben. Diese relativistischen Korrekturen sind (i) die klassische *Dipol-Dipol*-Wechselwirkung und (ii) die *Spin-Bahn* Kopplung. Dabei ist die Dipol-Dipol-Wechselwirkung die Ursache für die Formanisotropie und die Spin-Bahn Kopplung, die den Spin an das Kristallgitter koppelt, ist die Ursache für die magnetokristalline Anisotropie. Da die Spin-Bahn Wechselwirkung in 3d Übergangsmetallen eine sehr kleine Größe ist, erhält man die magnetokristalline Anisotropieenergie durch Anwendung der Störungsrechnung. Die vierte Ordnung Störungstheorie liefert den ersten von Null verschiedenen Beitrag für kubische Metalle. Brooks [2] und Fletcher [3] erweiterten das Modell von van Vleck, indem sie ein itinerantes Elektronenmodell zur Beschreibung der magnetokristallinen Anisotropie zugrunde legten und die Tatsache, daß der orbitale Drehimpuls in kubischen Kristallen unterdrückt ist, berücksichtigten. Trotz dieser anfänglichen Erfolge und der langen Zeitskala verharret die Beschreibung der magnetokristallinen Anisotropie itineranter ferromagnetischer Metalle (z.B. Fe, Co, Ni), bei denen der Magnetismus auf den lokalisierten aber itineranten 3d Elektronen beruht, auf einem qualitativen und teilweise phänomenologischen Niveau. Die Fortschritte bezüglich einer quantitativen Beschreibung der magnetokristallinen Aniso-

tropie im Volumen magnetischer Übergangsmetallen sind sehr langsam. Jüngste Arbeiten auf der Basis der parameterfreien Dichtefunktionaltheorie stimmen aber hoffnungsvoll. Interessanterweise ist die Theorie für ionische Verbindungen wie Ferrite und Garnets, viel weiter fortgeschritten, da die Elektronen nicht itinerant sondern auf die Ionen beschränkt sind. Sie sind lokalisiert in Orbitalen, die sich nur wenig von den Orbitalen freier Atome unterscheiden, was die qualitative und quantitative Beschreibung sehr vereinfacht.

Auch wenn es nicht das zentrale Thema dieses Vortrages ist, sei an dieser Stelle doch erwähnt, daß relativistische Effekte im Falle von  $3d$  Übergangsmetallen im allgemeinen unbedeutend sind, im Zusammenhang mit Magnetismus aber eine wichtige Rolle spielen. Sie sind von fundamentaler Bedeutung für die Magnetooptik, den magnetischen Zirkulardichroismus und den anomalen Hall-Effekt.

Wenn eine ferro- oder ferrimagnetische Probe magnetisiert wird, kann eine Kristalldeformation beobachtet werden. Die Deformation wird typischerweise ausgedrückt als Änderung einer Länge gemessen entlang einer bestimmten Richtung. Die Deformation hängt sowohl von der Richtung der Magnetisierung als auch von der Richtung der Beobachtung ab. Dieses *magnetoelastische* Phänomen wird *Magnetostriktion* genannt und wurde von Joule 1842 entdeckt. Relative Längenänderungen  $\delta\ell/\ell$  betragen größenordnungsmäßig zwischen  $10^{-5}$  und  $10^{-7}$ . Die Existenz dieses Effektes bedeutet, daß es eine Wechselwirkung zwischen Magnetismus und elastischen Freiheitsgraden gibt. Aus Gründen der thermodynamischen Reziprozität erwarten wir, daß die Aufprägung einer externen Spannung zu einer Änderung der Magnetisierung führt. Dieser Effekt ist tatsächlich beobachtet worden und wird gelegentlich *Villari* Effekt genannt. Wie wir noch sehen werden, hat die Magnetostriktion die gleichen Ursachen wie die magnetische Anisotropie.

Für stark anisotrope Materialien, Materialien mit Oberflächen und/oder Grenzflächen, wie z.B. für ultradünne Filme oder für magnetische Schichtsysteme, hat Néel [4] bereits darauf hingewiesen, daß die Reduktion der Symmetrie verknüpft mit der Änderung der lokalen Bindungsverhältnissen, verglichen zum Volumen, zu einem stark modifizierten Beitrag der Anisotropieenergie führt: der *Oberflächenanisotropie* bzw. der *Grenzflächenanisotropie*. Sie ist einige Größenordnungen größer als die *Volumenanisotropie* der kubischen Volumenkristallen Eisen oder Nickel. Magnetoelastische Effekte aufgrund der Verzerrung, verursacht durch die Gitterfehlpassung zwischen Film und Substrat, leisten weitere wichtige Beiträge zur Anisotropie ultradünner Filme. Die magnetische Anisotropie ist von grundsätzlicher Bedeutung für die thermodynamischen Eigenschaften zweidimensionaler magnetischer Systeme. Sie ist verantwortlich für die von Null verschiedene kritische Temperatur  $T_{2D}^* > 0$  K zweidimensionaler magnetischer Schichten. Gemäß dem Mermin-Wagner Theorem erwarten wir für eine kurzreichweitige (d.h. eine, als Funktion des Abstands  $i - j$  schneller als nach einem Potenzgesetz abklingende, Wechselwirkung  $J_{i,j}$ ), isotrope Wechselwirkung, wie sie beim Heisenberg Modell vorliegt, keine spontane Magnetisierung für  $T > 0$  K. Die magnetische Anisotropie führt zu einer Ising-artigen

$$\mathcal{H}_A = -K \sum_i S_{z,i}^2, \quad (2)$$

hier dargestellt für den Fall der Ein-Ionen-Anisotropie, und damit zu einer Stabilisierung der magnetischen Ordnung bei endlichen Temperaturen. Nach Bander und Mills [5], ergibt sich für Spins der Länge  $S = 1$  die Übergangstemperatur

$$T_{2D} = 2 T_{3D} \ln(\pi^2 J/K), \quad (3)$$

wobei  $T_{3D}$  die kritische Temperatur des isotropen Heisenbergmodells in drei Dimensionen ist. Die Tatsache, daß ein kleiner relativistischer Effekt für die langreichweitige Ordnung in ultradünnen Filmen verantwortlich ist, weist auf die physikalische Breite des Gebietes der ultradünnen magnetischen Filme hin. Die magnetische Anisotropie und deren Bedeutung für die magnetischen Eigenschaften von realen ultradünnen Filmen mit Rauigkeiten oder weiteren strukturellen Anisotropien wie Stufenkanten, Clustern, Inseln oder lateralen Strukturierungen sind wichtige aktuelle Forschungsthemen.

Dadurch, daß die magnetische Anisotropie die Magnetisierung im Raum fixiert, ist sie trotz der geringen Energetik eine der technologisch wichtigsten Größen des Magnetismus. Sie ermöglicht den Permanentmagneten und magnetische Materialien als Speichermedien, in denen die Bits "0" und "1" durch zwei verschiedene Richtungen der Magnetisierung definiert sind. Sie ist eine bestimmende Größe im Bereich des Mikromagnetismus und nimmt Einfluß auf die Größe der magnetischen Domänen, der Domänenwände und entscheidet damit über das Ummagnetisierungsverhalten von Stoffen, über die Koerzitivfeldstärke, über hart- und weichmagnetische Materialien, über die Magnetisierungsrichtung relativ zur Oberfläche des Speichermediums und damit über magnetische Speicherdichten und über den Einsatz von Schreib- und Lesemethoden in der magnetischen und magnetooptischen Speichertechnologie.

Das zentrale Anliegen dieser Vorlesung ist die Diskussion der physikalischen Grundlagen der magnetischen Anisotropie und der Magnetostriktion. Der Schwerpunkt liegt auf der magnetischen Anisotropie itineranter, magnetischer  $3d$  Übergangsmetalle (Fe, Co, Ni) und hier verstärkt auf ultradünne Filme und Schichtsysteme. Oxidische oder ionische Magnete oder Seltene-Erd Magnete sowie Seltene-Erd/Übergangsmetallverbindungen, wie  $\text{SmCo}_5$ , die sehr große Anisotropieenergien aufweisen, sind nicht Thema dieser Vorlesung.

Die Vorlesung ist wie folgt aufgeteilt: In Kapitel 2 wird die phänomenologische Beschreibung der magnetischen Anisotropie behandelt, die eine einfache physikalische Beschreibung experimenteller Beobachtungen erlaubt und eine Interpretation auf der Basis von Symmetrieargumenten ermöglicht. Auf gleichem Niveau diskutieren wir in Kapitel 3 die Magnetostriktion. In Kapitel 4 führen wir die Dipolwechselwirkung ein. Wir diskutieren deren Beiträge zur magnetokristallinen Anisotropie von Oberfläche und Volumen und deren Bedeutung für die Formanisotropie. In Kapitel 5 diskutieren wir die Spin-Bahn-Wechselwirkung als Ursache der magnetokristallinen Anisotropie. Wir stellen ein einfaches

Modell vor, erläutern kurz den störungstheoretischen Zugang und stellen ein *ab initio* Resultat vor.

## 2 Phänomenologische Beschreibung der Magnetischen Anisotropie

### 2.1 Thermodynamische Beschreibung

Wir betrachten eine magnetische Probe mit der Magnetisierung  $\mathbf{M} = M\widehat{\mathbf{M}}$ . Die Probe sei einkristallin und magnetisch einkristallin. Diese Einschränkung an die Probe garantiert, daß der Betrag der Magnetisierung  $M$  über der ganzen Probe konstant ist und daß der Einheitsvektor der Magnetisierung  $\widehat{\mathbf{M}}$  über der ganzen Probe unidirektional ist. Relativwinkel zwischen verschiedenen Magnetisierungsrichtungen treten nicht auf und die Austauschwechselwirkung kann bei der folgenden Beschreibung unberücksichtigt bleiben.

Die Stärke der magnetischen Anisotropie kann man durch Messung von Magnetisierungskurven bestimmen. Unter einer Magnetisierungskurve  $M_H(H)$  versteht man die Komponente der Magnetisierung  $\mathbf{M}$  in Richtung des angelegten Feldes  $\mathbf{H}$ , dargestellt als Funktion von  $H$ . Das angelegte Feld  $\mathbf{H}$  ist uniform und homogen und das Experiment wird bei konstanter Temperatur  $T$  durchgeführt. Ohne angelegtes Feld liegt die Magnetisierung entlang der Richtung minimaler Energie (leichte Richtung der Magnetisierung oder oft auch abkürzend leichte Richtung oder leichte Achse). Um die Magnetisierung aus der leichten Achse herauszudrehen, muß das äußere Feld Arbeit leisten, die im magnetischen Kristall gespeichert wird. Dies ist die magnetische Anisotropieenergie. Sie ist definiert durch die Arbeit  $W = \int \mathbf{H} d\mathbf{M}$ , die benötigt wird, die Magnetisierung der Probe entlang einer gewissen Richtung, relativ zur leichten Richtung, auszurichten.

Wird diese Arbeit bei konstanter Temperatur durchgeführt, so ist die Anisotropieenergie gerade die Differenz freier Energien  $F$ . Wir sehen dies, indem wir zuerst die Definition der freien Energie  $F$  hinschreiben:

$$F = U - TS. \quad (4)$$

Unter Berücksichtigung des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik

$$dU = dQ - dW \quad (5)$$

erhalten wir die Änderung der freien Energie:

$$dF = -dW - SdT \quad (6)$$

und als Folge konstanter Temperatur folgt:

$$F = \int -dW \quad (7)$$

wobei die freie Energie des Anfangszustandes als Nullpunkt der Energieskala gewählt wurde. Die freie Energie ist dann verknüpft mit der mikroskopischen Wechselwirkung, beschrieben durch den Hamiltonoperator  $\mathcal{H}$ , in bekannter Weise

$$F = -k_B T \ln \text{Spur} \left[ \exp \left( - \frac{\mathcal{H}}{k_B T} \right) \right]. \quad (8)$$

Ganz allgemein ist die freie Energiedichte  $F(T, M, \widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon})$  eine Funktion der Temperatur  $T$ , des Betrages der Magnetisierung  $M$ , der Magnetisierungsrichtung  $\widehat{\mathbf{M}}$ , des Verzerrungstensors  $\boldsymbol{\varepsilon}$  und noch vieler weiterer Größen, auf die wir hier nicht eingehen können. Allerdings ist die freie Energie nicht die optimale thermodynamische Funktion. In typischen experimentellen Situationen kann man die Magnetisierung und die Dehnung nicht extern kontrollieren, sondern das externe Magnetfeld  $H$  und die Spannung  $\sigma$  in Betrag und Richtung. Fährt man eine Magnetisierungskurve durch, so ändert sich der Betrag der Magnetisierung in Richtung des Feldes  $M_H$ . Deshalb ist es günstiger, mit der Gibbs'schen freien Energiedichte bzw. dem thermodynamischen Potential  $G$  zu arbeiten, bei dem statt mit der Magnetisierung mit dem externen Magnetfeld und statt mit der Dehnung mit der Spannung als natürliche Variablen gearbeitet wird. Die Gibbs'sche freie Energiedichte ist durch die Legendre Transformation

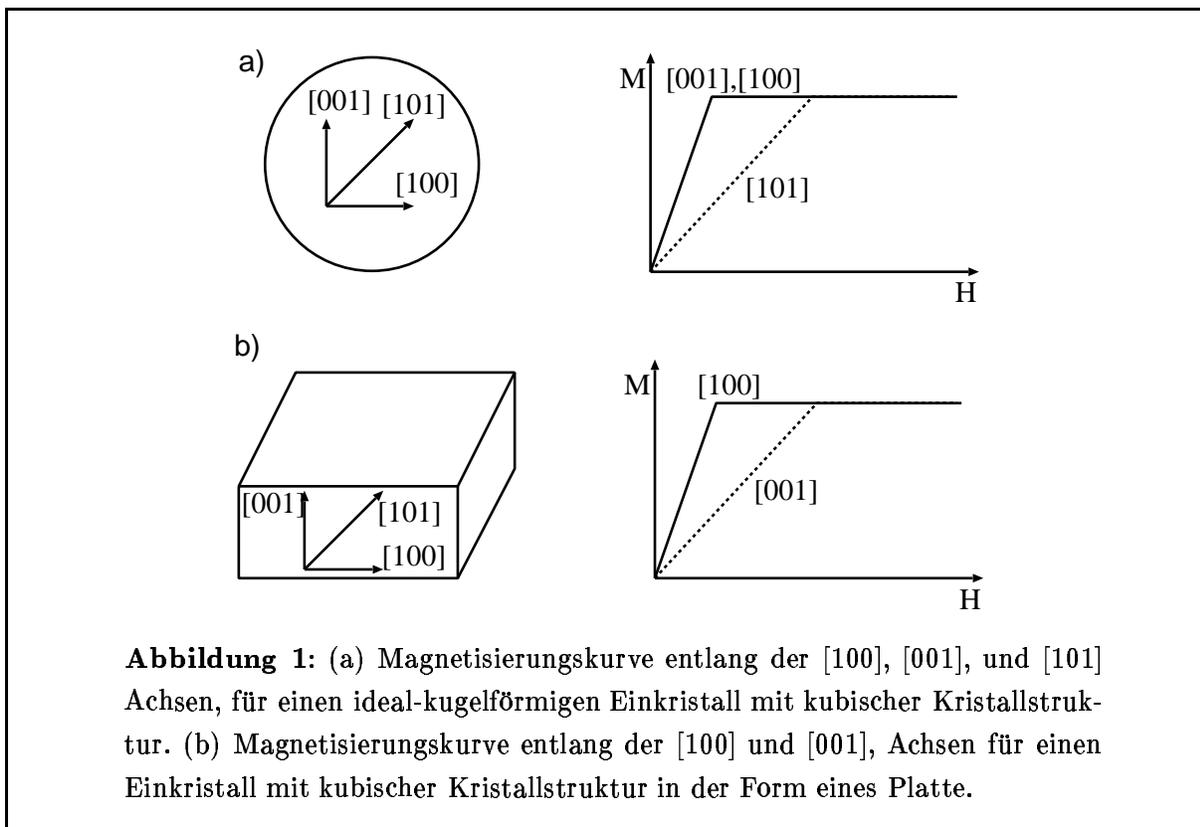
$$G(T, H_M, \widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\sigma}) = F(T, M, \widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon}) - H_M M - \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\varepsilon} \quad (9)$$

mit der freien Energiedichte verknüpft, wobei  $H_M$  das, auf die Richtung von  $\widehat{\mathbf{M}}$  projizierte, externe Magnetfeld ist.

## 2.2 Formanisotropie und magnetokristalline Anisotropie

In der Einleitung wurde schon erwähnt, daß die Energiedichte, respektive das thermodynamische Potential  $G(\widehat{\mathbf{M}})$ , als Funktion der Magnetisierungsrichtung  $\widehat{\mathbf{M}}$ , sowohl von der Richtung der Magnetisierung relativ zu den Kristallachsen als auch von der Richtung relativ zur Form bzw. Gestalt des ferromagnetischen Körpers abhängt.

Um diese zwei Beiträge zur Anisotropie herauszuarbeiten, betrachten wir die folgenden zwei Beispiele: (i) Wir betrachten eine Fe-Kugel (siehe Abb. (1)). Die Form ist isotrop und es gibt keinen Beitrag zur magnetischen Anisotropie durch die Form des Körpers. Für Fe ist die  $[100]$  Richtung (bzw. die 5 weiteren äquivalenten Richtungen  $[010]$ ,  $[001]$ ,  $[\bar{1}00]$ ,  $[0\bar{1}0]$ ,  $[00\bar{1}]$ ) die *leichte Achse* der Magnetisierung. Kleine externe Felder reichen aus, die Kugel entlang dieser Richtungen zu magnetisieren. Für Magnetisierungen entlang anderer Richtungen sind größere Magnetfelder nötig. Maximale Felder werden für die  $[101]$  Richtung benötigt. Dies sind dann die *schweren Achsen* der Magnetisierung. In diesem Beispiel hängt die Energie nur von der Richtung der Magnetisierung relativ zum Kristallgitter ab und man nennt sie die *magnetokristalline Anisotropie* oder *Kristallanisotropie*.



**Abbildung 1:** (a) Magnetisierungskurve entlang der [100], [001], und [101] Achsen, für einen ideal-kugelförmigen Einkristall mit kubischer Kristallstruktur. (b) Magnetisierungskurve entlang der [100] und [001], Achsen für einen Einkristall mit kubischer Kristallstruktur in der Form eines Platte.

(ii) Zum zweiten betrachten wir eine Fe-Platte, die entlang der kristallographischen Achsen geschnitten wurde. Mißt man die Magnetisierungskurven für Richtungen senkrecht zur Platte [001] oder parallel zur Platte [100], so werden unterschiedliche Ergebnisse beobachtet, obwohl die beiden Achsen kristallographisch äquivalent sind. Es gibt also einen zweiten Beitrag zur Anisotropie, der von der relativen Orientierung der Magnetisierung zur Form der Probe abhängt. Dies ist die *Form-* oder *Gestaltsanisotropie*, die der Kristallanisotropie überlagert ist. Die Gesamtanisotropie kann deshalb als Summe beider Beiträge zusammengefaßt werden:

$$G(\widehat{\mathbf{M}}) = G_{\text{Krist.}}(\widehat{\mathbf{M}}) + G_{\text{Form}}(\widehat{\mathbf{M}}). \quad (10)$$

Es ist klar, daß die magnetokristalline Anisotropie eine rein intrinsische Materialeigenschaft des betrachteten magnetischen Materials ist, während die Formanisotropie geometrischen Charakters ist. Die Formanisotropie ist eine reine Folge der klassischen Dipol-Dipol-Wechselwirkung, während die Kristallanisotropie eine Folge der Spin-Bahn-Wechselwirkung ist und in höherer Ordnung von den dipolaren Wechselwirkungen bestimmt ist.

### 2.3 Volumenanisotropie

Der russische Physiker Akulov [6] zeigte 1929, daß die Gibbs'sche freie Energiedichte für die Kristallanisotropie in Form einer Potenzreihenentwicklung nach Komponenten ( $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ ,

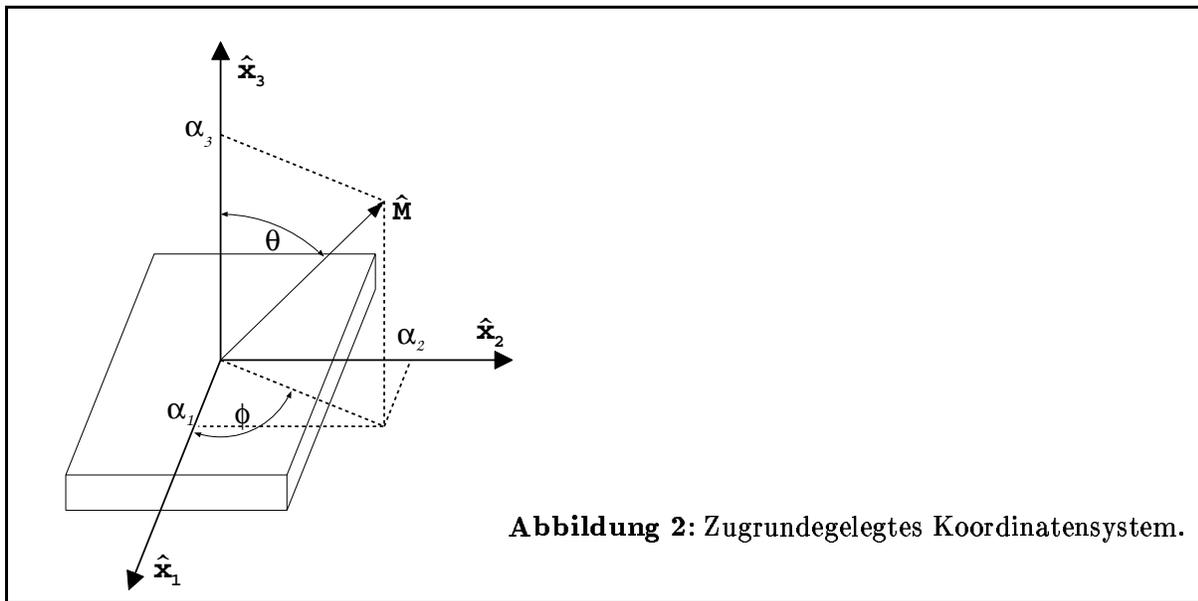


Abbildung 2: Zugrundegelegtes Koordinatensystem.

$\alpha_3$ ) der Magnetisierungsrichtung  $\widehat{\mathbf{M}} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$  relativ zu den Kristallachsen  $(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)$  angegeben werden kann:

$$G_{\text{Krist.}}(T, H_M, \widehat{\mathbf{M}}) = b_0(T, H_M) + \sum_i b_i(T, H_M) \alpha_i + \sum_{i,j} b_{ij}(T, H_M) \alpha_i \alpha_j + \sum_{i,j,k} b_{ijk}(T, H_M) \alpha_i \alpha_j \alpha_k + \sum_{i,j,k,l} b_{ijkl}(T, H_M) \alpha_i \alpha_j \alpha_k \alpha_l + \dots \quad (11)$$

Für die Richtungskosinusse  $\alpha_i$  gilt aufgrund der Normierung:  $\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2 = 1$ . Sie sind mit der üblichen Definition des rechtwinkligen Koordinatensystems (siehe Abb. (2)) nach der bekannten Beziehung  $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$  mit dem Polarwinkel  $\theta$  und dem Azimutwinkel  $\phi$  verknüpft. Es ist natürlich möglich, die Reihe für steigende Potenzen von  $\alpha_i$  unendlich fortzusetzen, aber hohe Potenzen beschreiben schnelle Oszillationen der Anisotropie mit der Änderung des Richtungswinkels  $\widehat{\mathbf{M}}$ . Dies ist aber experimentell nicht beobachtet worden und man kann davon ausgehen, daß diese Terme klein und vernachlässigbar sind.

Die Anzahl der Koeffizienten kann durch Anwendung von Symmetrieargumenten stark reduziert werden:

(i) *Zeit inversionssymmetrie*: Die Komponenten  $\alpha_i$  sind die Komponenten eines axialen Vektors,  $G$  ist eine skalare Größe und deshalb sind alle Tensoren ungerader Stufe,  $b_i, b_{i,j,k}, \dots$ , axiale Tensoren. Da die magnetokristalline Anisotropie eine statische Eigenschaft ist, gilt die Zeit inversionssymmetrie und alle Tensoren ungerader Stufe sind identisch Null.

(ii) *Kristallsymmetrie*: Die Form der restlichen Tensoren und die Verknüpfung ihrer Koeffizienten  $b_{ij\dots}$  sind vollkommen bestimmt durch die Symmetriebedingungen des Kristalls.

**1.) Kubische Systeme:** Betrachten wir zuerst die kubischen Systeme Eisen und Nickel. Aufgrund der kubischen Symmetrie gilt, (i) daß  $G(\alpha_i) = G(-\alpha_i)$ . Deshalb treten keine

ungeraden Terme  $\alpha_i$  oder Kreuzterme  $\alpha_i\alpha_j$  ( $b_{i,j} = 0$  für  $i \neq j$ ) auf. (ii) Die Indizes  $i = 1, 2, 3$  sind ununterscheidbar. Aus diesen Bedingungen folgt:

(1) Für den Term 2-ter Ordnung:

$$\sum_{i,j} b_{ij} \alpha_i \alpha_j = b_{11} (\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2) = b_{11}. \quad (12)$$

(2) Für den Term 4-ter Ordnung:

$$\sum_{i,j,k,l} b_{ijkl} \alpha_i \alpha_j \alpha_k \alpha_l = b_{1111} (\alpha_1^4 + \alpha_2^4 + \alpha_3^4) + 6b_{1122} (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2). \quad (13)$$

(3) Für den Term 6-ter Ordnung:

$$\begin{aligned} \sum_{i,j,k,l,m,n} b_{ijklmn} \alpha_i \alpha_j \alpha_k \alpha_l \alpha_m \alpha_n &= b_{111111} (\alpha_1^6 + \alpha_2^6 + \alpha_3^6) \\ &+ 15 b_{111122} (\alpha_1^4 \alpha_2^2 + \alpha_2^4 \alpha_3^2 + \alpha_3^4 \alpha_1^2 + \alpha_1^2 \alpha_2^4 + \alpha_2^2 \alpha_3^4 + \alpha_3^2 \alpha_1^4) \\ &+ 90 b_{112233} \alpha_1^2 \alpha_2^2 \alpha_3^2. \end{aligned} \quad (14)$$

Nutzt man weiter die Normierung der  $\alpha_i$ 's aus, so erhält man den bekannten Ausdruck für die Gibbs'sche freie Energiedichte der Anisotropie kubischer Systeme explizit bis zur sechsten Ordnung in  $\alpha$ :

$$G_{\text{Krist.}}(T, \widehat{\mathbf{M}}) = K_0(T) + K_1(T) (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) + K_2(T) \alpha_1^2 \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \dots \quad (15)$$

Die Koeffizienten  $K_1(T)$  und  $K_2(T)$  sind die sogenannten ersten und zweiten Anisotropiekonstanten für kubische Kristalle und sind einfache Linearkombinationen der  $b_{11}$ ,  $b_{1111}$ ,  $b_{111111}$ ,  $b_{1122}$ ,  $b_{111122}$ ,  $b_{112233}$ . Wir sehen, für kubische Systeme tritt kein Term zweiter Ordnung auf. Der erste von Null verschiedene Term ist vierter Ordnung. Das diffizile Temperaturverhalten der Anisotropie wird dadurch berücksichtigt, daß die Anisotropiekonstanten temperaturabhängig sind. Gewöhnlicherweise wird der sechste-Ordnungsterm benötigt, um die experimentellen Ergebnisse bei tiefer Temperatur befriedigend zu beschreiben. Analog zu Gl. (15) kann man auch den Betrag der Magnetisierung  $M$  als Funktion der Magnetisierungsrichtung  $\widehat{\mathbf{M}}$  darstellen:

$$M(\widehat{\mathbf{M}}) = M_0 + M_1 (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) + M_2 \alpha_1^2 \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \dots \quad (16)$$

**2.) Hexagonale Systeme:** Bei analoger Vorgehensweise erhalten wir für hexagonale Systeme wie Kobalt bis in sechster Ordnung in  $\alpha$ :

$$\begin{aligned} G_{\text{Krist.}}(\widehat{\mathbf{M}}) &= K_0 + K_1 (\alpha_1^2 + \alpha_2^2) + K_2 (\alpha_1^2 + \alpha_2^2)^2 + K_3 (\alpha_1^2 + \alpha_2^2)^3 \\ &+ K_4 (\alpha_1^2 - \alpha_2^2) (\alpha_1^4 - 14\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^4) + \dots \end{aligned} \quad (17)$$

Wenn wir die sphärischen Polarkoordinaten  $(\theta, \phi)$  statt der Richtungskosinusse  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ , benutzen um die Richtung  $\widehat{\mathbf{M}}$  zu spezifizieren, können wir Gl. (17) in der für hexagonale

Systeme üblichen Form der Gibbs'schen freien Energiedichte für die magnetokristalline Anisotropie ausdrücken:

$$G_{\text{Krist.}}(\widehat{\mathbf{M}}) = K_0 + K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta + K_3 \sin^6 \theta + K_4 \sin^6 \theta \cos 6\phi + \dots, \quad (18)$$

wobei  $\phi$  und  $\theta$  die Winkel bezüglich der  $a$  und  $c$  Achsen des hexagonalen Kristalls sind. Analog läßt sich der Betrag der Magnetisierung darstellen:

$$M(\widehat{\mathbf{M}}) = M_0 + M_1 \sin^2 \theta + M_2 \sin^4 \theta + M_3 \sin^6 \theta + M_4 \sin^6 \theta \cos 6\phi + \dots. \quad (19)$$

Die Koeffizienten  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $K_3$ , und  $K_4$  sind die Anisotropiekonstanten hexagonaler Systeme.  $K_4$  bezeichnet man auch gelegentlich als  $K'_3$ . Die Notation der Konstanten  $K_1$ ,  $K_2$  usw. ist stark traditionell geprägt und teilweise sehr inkonsistent. Zum Beispiel ist die Konstante  $K_1$  eine Konstante vierter Ordnung für kubische Systeme, aber eine Konstante zweiter Ordnung für hexagonale Systeme. Für hexagonale Systeme enthält der Ausdruck  $G_{\text{Krist.}}(\widehat{\mathbf{M}})$  bereits Beiträge in zweiter Ordnung von  $\alpha$ . Bis zu Termen vierter Ordnung ist der Ausdruck Gl. (18) zylindrischer statt hexagonaler Symmetrie und hängt nur vom Winkel  $\theta$  zwischen der Magnetisierung und einer Achse, der  $c$ -Achse ab. Diese Eigenschaft nennt man auch uniaxial. Der Azimutwinkel  $\phi$  (welcher die Position der Projektion von  $\widehat{\mathbf{M}}$  auf die Ebene senkrecht zur Symmetrieachse definiert) beschreibt die Grundebenenanisotropie, das ist die freie Energie die benötigt wird, um die Magnetisierung in der Ebene senkrecht zur  $c$ -Achse zu drehen. Der Term  $\cos 6\phi$  reflektiert die sechszählige  $c$ -Achse.

Für alle uniaxialen Systeme (zylindrischer Symmetrie: hexagonal, tetragonal, rhomboedrisch) ist es nützlich und üblich, die Gibbs'sche freie Energie als Funktion der Polarkoordinaten anzugeben.

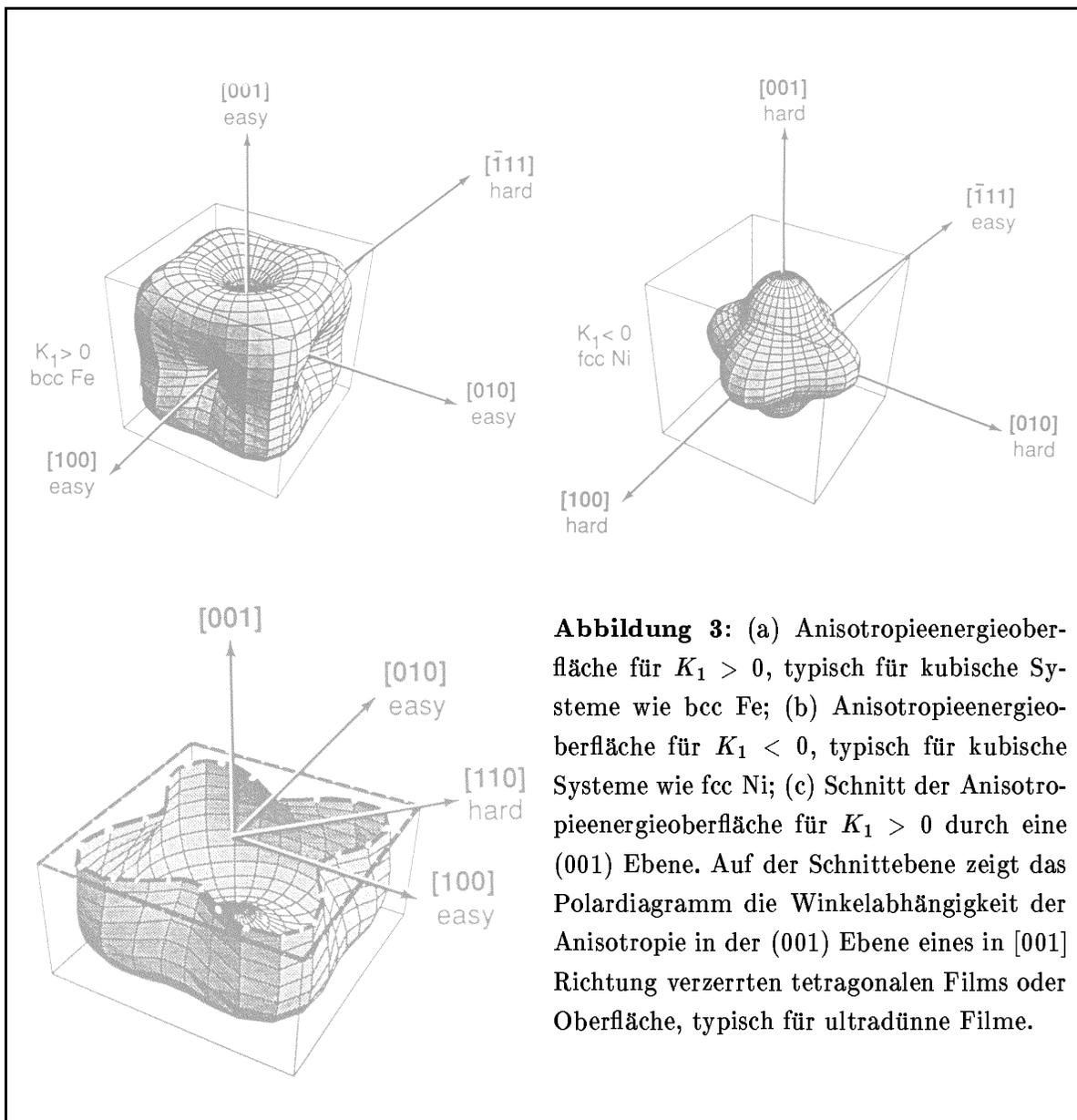
**3.) Tetragonale Systeme:** Tetragonale Systeme spielen im Zusammenhang mit ultradünnen Filmen eine bedeutende Rolle und deshalb geben wir vollständigkeithalber noch für tetragonale Systeme die Gibbs'sche freie Energiedichte als Funktion sphärischer Polarkoordinaten an.

$$G_{\text{Krist.}}(\widehat{\mathbf{M}}) = K_0 + K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta + K_3 \sin^4 \theta \cos 4\phi + \dots, \quad (20)$$

$K_3$  bezeichnet man auch gelegentlich als  $K'_2$ . Hier reflektiert der Term  $\cos 4\phi$  die vierzählige  $c$ -Achse der tetragonalen Kristallsymmetrie, die in der vierzähligen Symmetrie der Anisotropie in der Grundebene zum Ausdruck kommt. Analog erhalten wir für den Betrag der Magnetisierung:

$$M(\widehat{\mathbf{M}}) = M_0 + M_1 \sin^2 \theta + M_2 \sin^4 \theta + M_3 \sin^4 \theta \cos 4\phi + \dots. \quad (21)$$

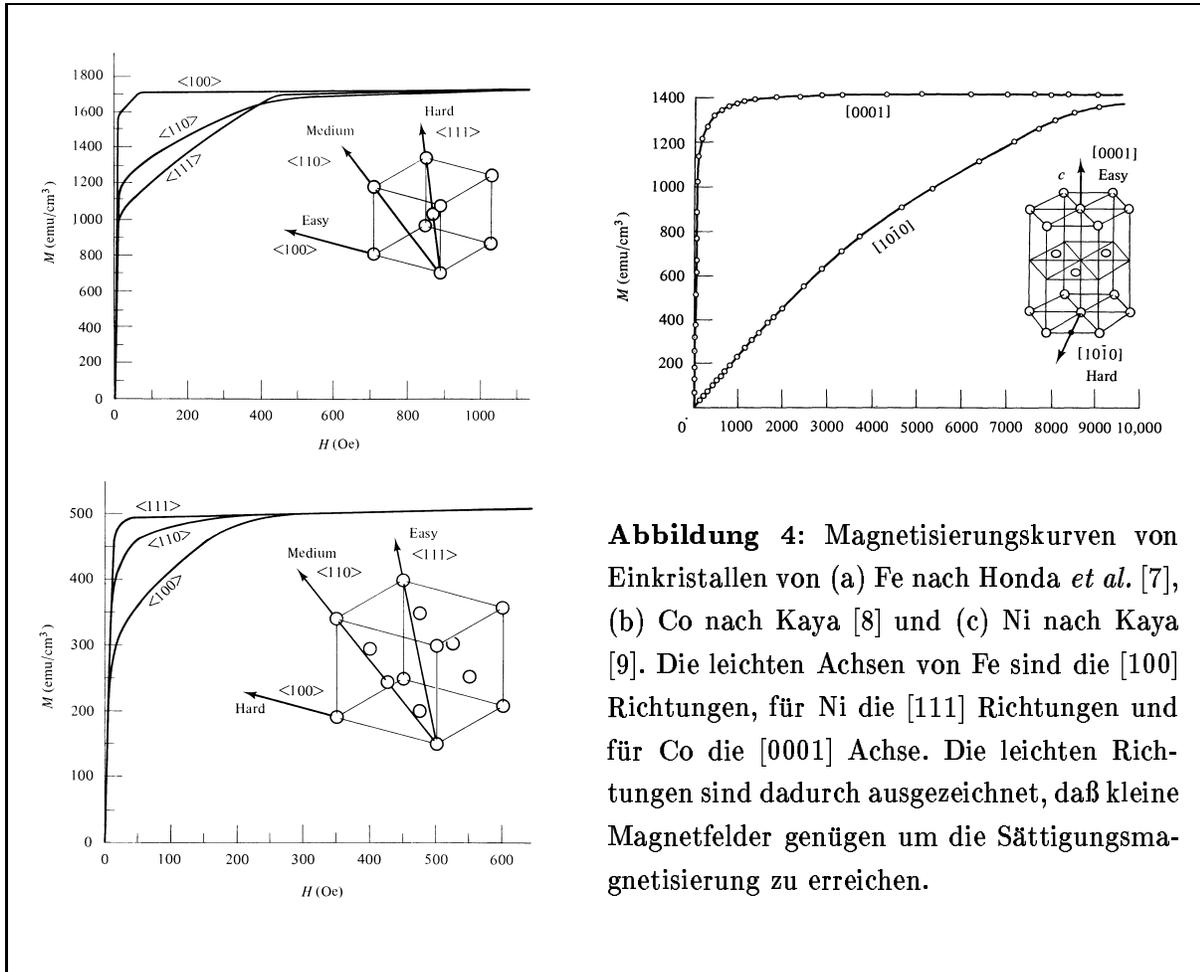
Abb. (3) stellt die Energieoberfläche der ersten zwei Terme der Gl. (15) dar, der isotropen Energieoberfläche dargestellt durch eine Kugel und zusätzlich der kubische Anisotropie vierter Ordnung ( $\sim K_1$ ). Abb. (3a) ist charakteristisch für bcc Eisen ( $K_1 > 0$ )



**Abbildung 3:** (a) Anisotropieenergieoberfläche für  $K_1 > 0$ , typisch für kubische Systeme wie bcc Fe; (b) Anisotropieenergieoberfläche für  $K_1 < 0$ , typisch für kubische Systeme wie fcc Ni; (c) Schnitt der Anisotropieenergieoberfläche für  $K_1 > 0$  durch eine (001) Ebene. Auf der Schnittebene zeigt das Polardiagramm die Winkelabhängigkeit der Anisotropie in der (001) Ebene eines in [001] Richtung verzernten tetragonalen Films oder Oberfläche, typisch für ultradünne Filme.

und man sieht Energieminima entlang der [001], [010], und [100] Richtungen. Dies sind die leichten magnetischen Achsen von Eisen. Das heißt, in Abwesenheit eines angelegten Magnetfeldes, wird die Magnetisierung entlang dieser Richtungen liegen. Tatsächlich werden im Volumen eines Einkristalls, in Abhängigkeit des Streufeldes an der Oberfläche der Probe, im allgemeinen unterschiedliche Teile der Probe entlang einer dieser Richtungen magnetisiert sein (d.h. es bilden sich magnetische Domänen aus), so daß die Probe unter Umständen kein makroskopisches Gesamtmoment hat. Für den Fall  $K_1 < 0$ , dargestellt in Abb. (3b) und charakteristisch für Nickel, sieht man, daß die [111] Richtungen die Minima der Energieoberfläche darstellen. Im Gegensatz zu den Energieminima, werden die Richtungen der Energiemaxima als schwere Achsen bezeichnet, da es die Anwendung eines äußeren magnetischen Feldes bedarf, um  $M$  in diese Richtung zu drehen. Wenn

wir ultradünne Filme untersuchen, spielt die tetragonale Symmetrie eine wichtige Rolle. Die Anisotropieenergie für Magnetisierungsrichtungen in der Filmebene ist in Abb. (3c) dargestellt, in der wir die Figur (a) mittels der Ebene parallel zur Filmebene geschnitten haben. Abb. (4) zeigt Ergebnisse von Magnetisierungsexperimenten zur Bestimmung der leichten und schweren Richtungen.



**Abbildung 4:** Magnetisierungskurven von Einkristallen von (a) Fe nach Honda *et al.* [7], (b) Co nach Kaya [8] und (c) Ni nach Kaya [9]. Die leichten Achsen von Fe sind die [100] Richtungen, für Ni die [111] Richtungen und für Co die [0001] Achse. Die leichten Richtungen sind dadurch ausgezeichnet, daß kleine Magnetfelder genügen um die Sättigungsmagnetisierung zu erreichen.

Die Werte der Anisotropiekonstanten von Fe, Co und Ni sind in Tabelle (3) zusammengefaßt. Man beachte, daß die Anisotropiekonstante  $K_1$  von Co, die eine Konstante zu einem zweiten Ordnungsterm ist, eine Größenordnung größer ist als für die kubischen Systeme, für die  $K_1$  Vorfaktor eines vierten Ordnungsterms ist. Man beachte auch, daß das Vorzeichen von  $M_1$  umgekehrt zu dem von  $K_1$  ist, was bedeutet, daß der Betrag der Magnetisierung entlang der leichten Achse größer ist als entlang der schweren Achse. Dies werden wir genauer in Abschnitt 5.1 behandeln.

Die Anisotropiekonstanten  $K$  haben *a priori* keine physikalische Bedeutung und korrelieren, abgesehen von der Symmetrie, nicht mit mikroskopischen Charakteristika des Systems. Nichtsdestoweniger ist es durch die Beschreibung der Anisotropie mittels Anisotropiekonstanten in einer einfachen – und phänomenologischen – Art und Weise ermöglicht

**Tabelle 3:** Anisotropiekonstanten von Fe, Co, und Ni, bei  $T = 4.2$  K. <sup>(a)</sup>Ref. [10], <sup>(b)</sup>Ref. [11], <sup>(c)</sup>Ref. [12], <sup>(d)</sup>Ref. [13].

		Fe (bcc)	Co (hcp)	Ni (fcc)
$K_1$	[erg/cm <sup>3</sup> ]	$5.48 \times 10^5$ <sup>(a)</sup>	$7.66 \times 10^6$ <sup>(b)</sup>	$-12.63 \times 10^5$ <sup>(a)</sup>
	[meV/atom]	$4.02 \times 10^{-3}$	$5.33 \times 10^{-2}$	$-8.63 \times 10^{-3}$
$K_2$	[erg/cm <sup>3</sup> ]	$1.96 \times 10^3$ <sup>(a)</sup>	$1.05 \times 10^6$ <sup>(b)</sup>	$5.78 \times 10^5$ <sup>(a)</sup>
	[meV/atom]	$1.44 \times 10^{-5}$	$7.31 \times 10^{-3}$	$3.95 \times 10^{-3}$
$K_3$	[erg/cm <sup>3</sup> ]	$0.9 \times 10^3$ <sup>(a)</sup>	–	$3.48 \times 10^4$ <sup>(a)</sup>
	[meV/atom]	$6.6 \times 10^6$	–	$2.38 \times 10^{-4}$
$K_4$	[erg/cm <sup>3</sup> ]	–	$1.2 \times 10^5$ <sup>(c)</sup>	–
	[meV/atom]	–	$8.4 \times 10^{-4}$	$6.9 \times 10^{-4}$
$M_0$	[G]	$1749.7 \times 10^0$ <sup>(b)</sup>	$1459.5 \times 10^0$ <sup>(d)</sup>	$524.8 \times 10^0$ <sup>(b)</sup>
	[ $\mu_B$ /atom]	$2.215 \times 10^0$	$1.729 \times 10^0$	$0.615 \times 10^0$
$M_1$	[G]	$-4.3 \times 10^{-1}$ <sup>(a)</sup>	$-6.75 \times 10^0$ <sup>(d)</sup>	$5.1 \times 10^{-1}$ <sup>(a)</sup>
	[ $\mu_B$ /atom]	$-5.4 \times 10^{-4}$	$-8.0 \times 10^{-3}$	$6.0 \times 10^{-4}$

worden, viele physikalische Phänomene wie Spinreorientierungsübergänge, Magnetisierungsprozesse, nichtkollineare Phänomene und Wechselwirkungen zwischen Austausch- und Anisotropie termen zu beschreiben. Die unterschiedlichen Vorzeichen der  $K_i$  und die unterschiedlichen Verhältnisse der  $K_i$  zueinander definieren ein Phasendiagramm für die leichte Achse der Magnetisierung. Gemeinsam mit  $M$  und dem externen Magnetfeld  $H_M$  gibt es einen direkten Zusammenhang zwischen den Anisotropiekonstanten und der Form unterschiedlicher Bereiche der Magnetisierungskurven. Für bestimmte Systeme und unter bestimmten Bedingungen können die Anisotropiekonstanten mit physikalischen Parametern, die den mikroskopischen Ursprung der Anisotropie (siehe Kapitel (4) und (5.1)) beschreiben, verknüpft werden und die phänomenologische Vorgangsweise *a posteriori* rechtfertigen und stützen.

Offensichtlich ist die Entwicklung der Gibbs'schen freien Energiedichte nach Termen der Form  $\sin^{2n}(\theta)$  eine Möglichkeit der Entwicklung, aber nicht die einzige. Bedenkt man, daß für den isotropen Austausch die Gibbs'sche freie Energiedichte als Kugel über  $\widehat{\mathbf{M}}$  dargestellt werden kann, sind die anisotropen Beiträge kleine Abweichungen von dieser. Dies legt eine Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen  $Y_{\ell,m}(\widehat{\mathbf{M}})$  (Produkte aus  $e^{i\phi m}$  und den verallgemeinerten Legendre Polynomen  $P_\ell^m(\theta)$ )

$$G_{\text{Krist.}}(T, H_M, \widehat{\mathbf{M}}) = \sum_{\ell=\text{gerade}} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \kappa_\ell^m(T, H_M) Y_{\ell,m}(\widehat{\mathbf{M}}) \quad (22)$$

nahe. Die  $\kappa_\ell^m$  werden auch als Anisotropiekoeffizienten bezeichnet. Wegen der Zeitinversionssymmetrie verschwinden alle  $\kappa_\ell^m$  für ungerade  $\ell$  und wurden in der Summe daher nicht berücksichtigt. Die Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen bietet die typischen Vorteile von vollständigen orthonormalen Funktionen, wie normierte Koeffizienten, die unabhängig von der Anzahl der noch folgenden Terme sind. Außerdem konnten Callen *et al.* [14] für die Anisotropiekoeffizienten  $\kappa_\ell^m$  ionischer Systeme (Einionenanisotropie) ein Potenzgesetz für die Temperaturabhängigkeit der Koeffizienten ableiten:

$$\kappa_\ell^0(T)/\kappa_\ell^0(0) = (M(T)/M(0))^{\ell(\ell+1)/2}. \quad (23)$$

Ein Nachteil der Anisotropiekoeffizienten gegenüber den Anisotropiekonstanten ist, daß der direkte Zusammenhang zwischen den Anisotropiekonstanten und der Form bestimmter Teile der Magnetisierungskurve verloren geht. Durch einfaches Umarrangement der einzelnen Terme kann man die Entwicklung nach Potenzen von  $\alpha$  eindeutig als Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen darstellen.

**1.) Kubische Systeme:** Entsprechend Gl. (15) schreibt sich die Gibbs'sche freie Energiedichte in der Darstellung nach Kugelflächenfunktionen:

$$\begin{aligned} G_{\text{Krist.}}(\widehat{\mathbf{M}}) &= K_0 + \frac{1}{105}(21K_1 + K_2)Y_{00} - \frac{1}{55}(11K_1 + K_2)Y_{40}(\theta) + \frac{2}{231}K_2Y_{60}(\theta) \\ &- \frac{1}{9240}(11K_1 + K_2)Y_{44}(\theta, \phi) - \frac{1}{41580}(11K_1 + K_2)Y_{64}(\theta, \phi) + \dots \end{aligned} \quad (24)$$

**2.) Hexagonale Systeme:** Für hexagonale Systeme erhalten wir:

$$\begin{aligned} G_{\text{Krist.}}(\widehat{\mathbf{M}}) &= K_0 + \frac{2}{105}(35K_1 + 28K_2 + 24K_3)Y_{00} - \frac{2}{21}(7K_1 + 8K_2 + 8K_3)Y_{20}(\theta) \\ &+ \frac{8}{385}(11K_2 + 18K_3)Y_{40}(\theta) - \frac{16}{231}K_3Y_{60}(\theta) - \frac{1}{10395}K_3'Y_{64}(\theta, \phi) + \dots \end{aligned} \quad (25)$$

Analog läßt sich auch der Betrag der Magnetisierung nach Kugelflächenfunktionen entwickeln:

$$M(T, H_M, \widehat{\mathbf{M}}) = \sum_{\ell=\text{gerade}} \sum_{m=-\ell}^{\ell} M_\ell^m(T, H_M) Y_{\ell,m}(\widehat{\mathbf{M}}). \quad (26)$$

## 2.4 Oberflächenanisotropie

Bisher haben wir nur Volumensysteme betrachtet, Systeme die so groß sind, daß Beiträge innerer und äußerer Oberflächen zur Anisotropieenergie vernachlässigbar sind. Dies ändert sich natürlich im Falle niedrig dimensionaler Systeme, wie magnetischer Schichtsysteme, ultradünner Filme, oder Nanodrähten, deren Eigenschaften gerade durch die Oberflächen oder Grenzflächen bestimmt sind. Deshalb erweitern wir das thermodynamische Gesamtpotential und schreiben es als Summe eines *Volumenanisotropieterms* und eines *Oberflächen- bzw. Grenzflächenanisotropieterms*

$$\mathcal{G}(\widehat{\mathbf{M}}) = \int_V dV G^V(\widehat{\mathbf{M}}) + \int_S dS G^S(\widehat{\mathbf{M}}), \quad (27)$$

wobei  $G^V(\widehat{\mathbf{M}})$  die im vorigen Abschnitt diskutierte freie Energie pro Volumeneinheit ist, und  $G^S(\widehat{\mathbf{M}})$  die Gibbs'sche freie Energie pro Flächeneinheit der Grenz- oder Oberfläche.  $G^S(\widehat{\mathbf{M}})$  hängt ab von den Materialien und den strukturellen und kristallographischen (z.B. Orientierung) Gegebenheiten der Grenzfläche.

Auf der Grundlage eines phänomenologischen Paarwechselwirkungsmodells hat Néel [4] als erster darauf hingewiesen, daß sich die Atome, die sich in der Umgebung einer Grenzfläche befinden, anderen Symmetriebedingungen und einer anderen lokalen Umgebung ausgesetzt sehen als die Volumenatome, und daß daraus zusätzliche Beiträge zur magnetischen Anisotropie erwachsen. Insbesondere führt eine Grenzfläche im Vergleich zum Volumen oftmals zu einer Symmetrierniedrigung und damit zu Anisotropietermen niedrigerer Ordnung in  $\alpha$ , die im Volumen verboten waren. Der Ausdruck für den Oberflächenbeitrag zur magnetokristallinen Anisotropie ist für die

**1.) Tetragonale Symmetrie:** (001) Oberfläche kubischer Kristalle

$$G_{\text{Krist.}}^S(\widehat{\mathbf{M}}) = K_1^S \sin^2 \theta + K_2^S \sin^4 \theta + K_3'^S \cos 4\phi \sin^4 \theta + \dots \quad (28)$$

**2.) Orthorhombische Symmetrie:** (011) Oberfläche kubischer Kristalle

$$G_{\text{Krist.}}^S(\widehat{\mathbf{M}}) = K_1^S \sin^2 \theta + K_1'^S \cos 2\phi \sin^2 \theta + \dots \quad (29)$$

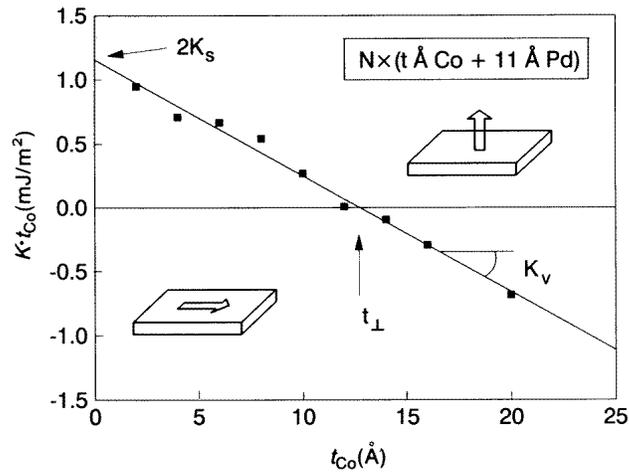
**3.) Hexagonale Symmetrie:** (111) Oberfläche kubischer Kristalle oder (0001) Oberfläche hexagonaler Kristalle

$$G_{\text{Krist.}}^S(\widehat{\mathbf{M}}) = K_1^S \sin^2 \theta + K_2^S \sin^4 \theta + K_3^S \sin^6 \theta + K_3'^S \cos 6\phi \sin^6 \theta + \dots, \quad (30)$$

mit den üblichen Definitionen der Winkel  $\theta$  und  $\phi$ .

In der Praxis wird oftmals nur der Term  $K_1^S$ , der dem zweiten Ordnungsterm in  $\alpha_3$  entspricht, berücksichtigt. Der Betrag von  $K_1^S$  ist typischerweise in der Größenordnung von 0.1 bis 1 erg/cm<sup>2</sup>. Dies entspricht 0.1 bis 1 meV/Grenzflächenatom in atomaren Einheiten und liegt in der Größenordnung moderner Permanentmagnete wie YCo<sub>5</sub> oder Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B, siehe Vergleich in Tab. (2). Dieser Betrag ist einige Größenordnungen größer als die Anisotropie durch Volumenatome und macht heute die Berechnung der Konstanten für die Grenzfläche mittels parameterfreien quantenmechanischen Konzepten wie der Dichtefunktionaltheorie möglich – viel leichter möglich als die Volumenanisotropie, obwohl die Geometrie komplexer ist (dazu mehr in Abschnitt 5.4).

Aus Gl. (23) folgt, daß es im Falle der Ein-Ionen-Anisotropie einen Zusammenhang zwischen der Temperaturabhängigkeit der Anisotropiekonstanten und der Magnetisierung gibt. Legen wir diesen Zusammenhang auch für die Anisotropiekonstanten der Oberfläche zugrunde und erinnern uns daran, daß die Temperaturabhängigkeit der Oberflächenmagnetisierung viel stärker als die der Volumenmagnetisierung ist, liegt nahe, daß es für die Anisotropiekonstante der Oberfläche ebenfalls ein sehr starkes Temperaturverhalten geben kann, so daß es leicht zu temperaturabhängigen Spinreorientierungsübergängen kommen kann.



**Abbildung 5:** Magnetische Anisotropie pro Einheitsfläche pro Co-Lage aufgetragen gegen die Co-Dicke einer Co/Pd Multilage. Die Steigung gibt den Volumenbeitrag der Anisotropie, der Schnittpunkt mit der  $y$ -Achse ist gleich zwei Mal der Oberflächenanisotropie. Daten aus Ref. [15] entnommen.

## 2.5 Der Spinreorientierungsübergang

**Schichtdickenabhängigkeit von Schichtsystemen:** Experimentell wird eine effektive Anisotropiekonstante  $K^{\text{eff}}$  bestimmt, die man sich im Sinne von Néel als Superposition der Anisotropiekonstanten der Oberfläche oder Grenzfläche ( $K^S$  pro Einheitsfläche) und der des Volumens ( $K^V$  pro Einheitsvolumen)

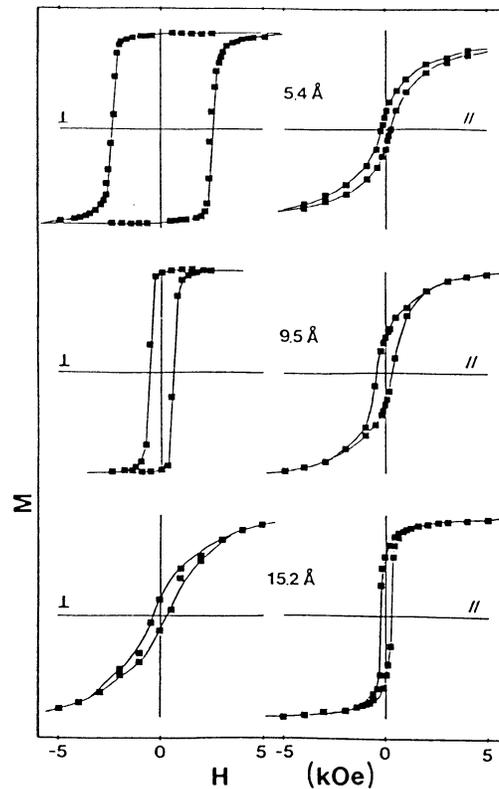
$$K^{\text{eff}} = K^V + 2K^S/t \quad (31)$$

vorstellt, wobei  $t$  die Dicke der magnetischen Probe ist und wir von 2 Oberflächen ausgehen.  $K^V$  und  $K^S$  werden dann bestimmt, indem man  $K^{\text{eff}} \cdot t$  gegen die Dicke  $t$  aufträgt. Die Steigung ergibt dann  $K^V$  und der Schnittpunkt mit der  $t = 0$  Achse  $K^S$  (siehe Beispiel in Abb. (5)).

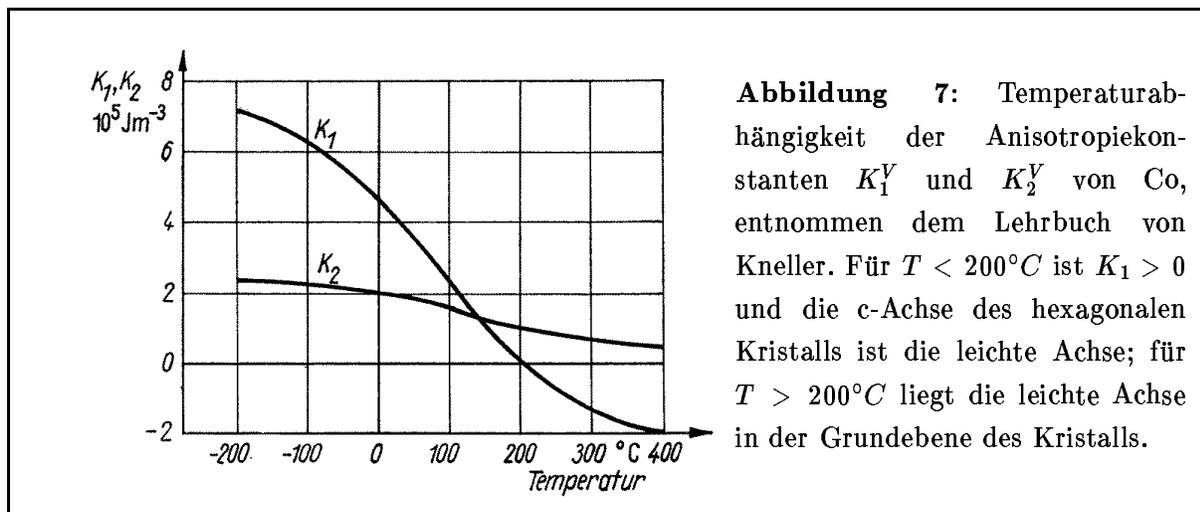
Das Vorzeichen der magnetokristallinen Oberflächenanisotropie kann in Abhängigkeit von Details der Grenzfläche positiv oder negativ sein. In diesem Zusammenhang ist ein positives  $K_1^S$ ,  $K_1^S > 0$  von besonderem Interesse auf dem Gebiet ultradünner Filme. Wie wir noch in Abschnitt (4.1) sehen werden, ist die Volumenanisotropie eines Filmes dominiert durch die Formanisotropie, die immer die Orientierung der Magnetisierung in der Filmebene bevorzugt. Ist nun  $K_1^S$  positiv, begünstigt die magnetokristalline Oberflächenanisotropie die Orientierung der Magnetisierung senkrecht zur Filmebene (senkrechte Magnetisierung). Dadurch entsteht eine filmdickenabhängige Konkurrenz zwischen senkrechter Magnetisierung und Magnetisierung in der Ebene. Das heißt, für dicke Filme

dominiert immer der Volumenbeitrag und die Magnetisierung liegt in der Ebene, wobei das relative Gewicht der Oberfläche bei abnehmender Schichtdicke des Filmes zunimmt und sich die Magnetisierung unter einer kritischen Schichtdicke von wenigen Atomlagen ( $\sim 10 \text{ \AA}$ ) schließlich in Richtung der Filmnormalen umorientiert. Filme mit senkrechter Magnetisierung haben ein hohes technologisches Anwendungspotential im Bereich magneto-optischer Speichermedien. In Abb. (6) zeigen wir ein Beispiel für dieses Verhalten am System Au/Co(0001)/Au(111).

**Temperaturabhängigkeit:** Wie schon in vorherigem Abschnitt erwähnt wurde, ist die Anisotropieenergie sehr empfindlich von der Temperatur abhängig. Diese Eigenschaft wird durch die Tatsache beschrieben, daß die Anisotropiekoeffizienten von der Temperatur abhängen und zwar mit einem unterschiedlichen Verhalten in Abhängigkeit von der Ordnung der Koeffizienten. Eine quantitative Behandlung dieser Phänomenologie wurde durch Callen *et al.* [14] für ionische Systeme gegeben, die der Einionenanisotropie genügen. Die relative Variation der Anisotropiekonstanten mit der Temperatur kann zu einer Änderung



**Abbildung 6:** Magnetisierungskurven von Au/Co(0001)/Au(111) Filmsystemen bei  $T = 10 \text{ K}$  für verschiedene Co Dicken  $t_{Co}$ , gemessen senkrecht (links) und parallel (rechts) zur Filmebene. Die leichte Achse ist senkrecht zur Filmebene für Dicken  $t_{Co} < t_c \approx 12 \text{ \AA}$ . Aus Ref. [16].



der leichten Achse führen. Dies ist der sogenannte Spinreorientierungsübergang. In diesem magnetischen Phasenübergang, der entweder erster oder zweiter Ordnung sein kann, ändert der Magnetisierungsvektor mehr oder weniger kontinuierlich seine Orientierung bezüglich der Kristallachsen. Dieses Phänomen wird gewöhnlicherweise in Systemen mit mehreren konkurrierenden Beiträgen zur Anisotropie beobachtet; d.h. bei Variation der Temperatur kann sich die relative Bedeutung der einzelnen Beiträge ändern, die Temperaturvariation kann zu einer Veränderung des Betrages und der Richtung der resultierenden Anisotropie führen und in gewissen Fällen eine Reorientierung der leichten Magnetisierungsrichtung bewirken. Im allgemeinen findet der Reorientierungsübergang immer dann statt, wenn die zweite Ordnungskonstante  $K_1$  als Funktion der Temperatur das Vorzeichen wechselt, wie z.B. im Falle von Co (Abb. (7)).

### 3 Magnetostriktion und Magnetoelastische Anisotropie

Bisher war stillschweigend angenommen worden, daß wir es mit einem *starr*en Festkörper zu tun haben, dessen Atome fest auf regulären Gitterplätzen mit unveränderlichen Gitterabstand sitzen. Tatsächlich muß man berücksichtigen, daß ein Kristall einen *elastischen Freiheitsgrad* hat: Sein Volumen und seine Form sind veränderlich (z.B. äußerer oder innerer Krafteinwirkung, oder bei Temperaturänderung) und seine Atome sitzen nicht fest auf ihren Gleichgewichtslagen, sondern führen kleine (temperaturabhängige) Schwingungen aus. Dies alles wirkt sich auf die magnetischen Eigenschaften des Festkörpers aus, und umgekehrt beeinflusst der magnetische Freiheitsgrad auch die elastischen Eigenschaften des Kristalls. Die dafür verantwortliche Wechselwirkung ist die sogenannte magnetoelastische Wechselwirkung  $\mathcal{H}_{\text{magn-el.}}$ . Man unterscheidet:

1. *Statische* (zeitunabhängige) *magnetoelastische Phänomene*: z.B. Magnetostriktion, Änderung der elastischen Konstanten, Änderung der magnetischen Ordnung, thermische Ausdehnung, äußere Spannungen.
2. *Dynamische* (zeitabhängige bzw. frequenzabhängige) *magnetoelastische Phänomene*: Änderung der Schallgeschwindigkeit und der Phononendispersion, Änderung der Magnonendispersion, Schalldämpfung, Spin-Gitter-Relaxation.

Wir beschränken uns hier auf die Magnetostriktion, sowie dehnungs- und spannungsinduzierte magnetokristalline Anisotropie.

### 3.1 Qualitative Überlegungen

In Kapitel 2.3 haben wir die Volumenanisotropie behandelt. Für kubische Systeme fanden wir, daß der erste richtungsabhängige Term in der freien Energie von vierter Ordnung in  $\alpha$  war. Für tetragonale Systeme gab es aber aufgrund erniedrigter Symmetrie bereits einen Term zweiter Ordnung  $E = K_1 \sin^2 \theta = K_1(1 - \alpha_3^2)$ , wobei die Anisotropiekonstanten zweiter Ordnung um Größenordnungen größer sind als die vierter Ordnung. Das heißt, eine kleine Verzerrung  $\varepsilon$ , die eine Symmetrierniedrigung von kubischer zu tetragonaler Symmetrie verursacht, sollte eine starke Änderung der Anisotropie zur Folge haben. Da die Verzerrung klein ist und in erster Näherung proportional zu  $\varepsilon$  sein muß, schreiben wir einfach  $E = K_1(1 - \alpha_3^2)\varepsilon_{33}$ . Dies ist die elementarste Form der magnetoelastischen Wechselwirkung. Nun wissen wir aber, daß solche Verzerrungen durch externe oder interne Spannungen  $\sigma$  verursacht werden können. Nach dem Hooke'schen Gesetz sind aber Spannungen und Verzerrung durch elastische Konstanten verknüpft  $\sigma = C\varepsilon$  und damit  $E = K_1 C^{-1} (1 - \alpha_3^2)\sigma_{33}$ . Dies zeigt, daß es einen wichtigen Beitrag durch mechanische Spannungen auf die Anisotropieenergiedichte gibt. Die verzerrungs- und spannungsinduzierten Anisotropien spielen eine wichtige Rolle in ultradünnen Filmen, wo erhebliche Verzerrungen und mechanische Spannungen beim epitaktischen Aufwachsen von Filmen auf Substraten mit unterschiedlichen Gitterkonstanten entstehen können. Wir können auf dieses Problem hier nicht näher eingehen. Eine Diskussion findet man in Ref. [16].

Auf der anderen Seite wird eine kubische Einheitszelle von Eisen spontan tetragonal für  $T < T_c$  verzerren, da sie magnetokristalline Anisotropieenergie gewinnen kann, bis die Verzerrung begrenzt wird durch die Zunahme an elastischer Energie  $E = 1/2C\varepsilon^2$ . Die Gesamtenergie schreibt sich dann

$$E = K_1 (1 - \alpha_3^2)\varepsilon_{33} + \frac{1}{2}C\varepsilon_{33}^2 \quad (32)$$

und die Minimierung bezüglich  $\varepsilon$  führt zur Gleichgewichtsverzerrung  $\lambda$

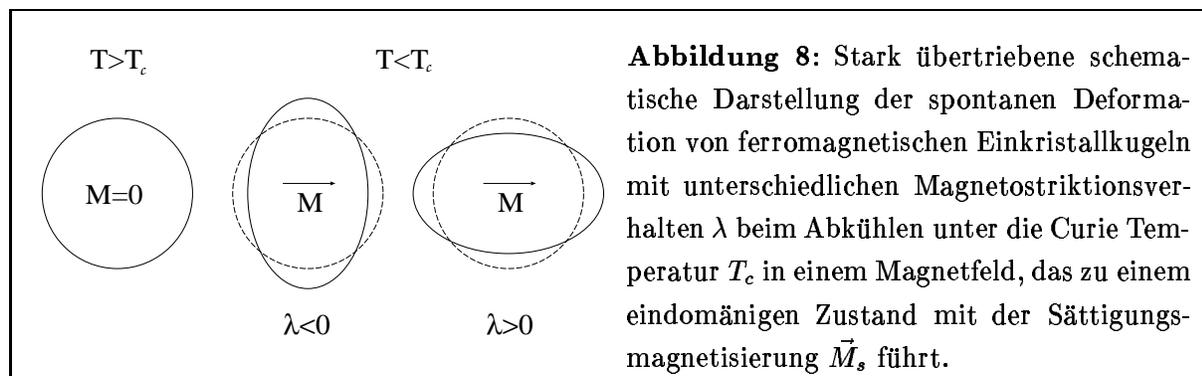
$$\lambda = -\frac{K_1}{C} (1 - \alpha_3^2). \quad (33)$$

Dies ist die spontane Magnetostriktion. Setzen wir Zahlenwerte ein, für die elastische Konstante  $C \approx 10^{11} \text{ N/m}^2$  und  $K_1 \approx 10^6 \text{ J/m}^3$ , erhalten wir eine relative Längenänderung  $\delta\ell/\ell$  von  $\lambda = \delta\ell/\ell \approx 10^{-5}$ . Da die magnetokristalline Anisotropie eine Folge der Spin-Bahn-Wechselwirkung ist, ist die Spin-Bahn-Wechselwirkung offensichtlich auch die Hauptursache der magnetoelastischen Effekte.

Natürlich waren dies nur qualitative Überlegungen. Im Festkörper arbeitet man mit tensoriellen Größen. Eine Herleitung der phänomenologischen Grundgleichungen wird in folgendem Kapitel gegeben.

### 3.2 Magnetostriktion

Magnetostriktion bezeichnet die Änderung der Dimensionen eines Körpers, wenn er einem Magnetfeld ausgesetzt ist. Greifen wir wieder auf unsere hypothetische einkristalline, exakte Eisenkugel zurück, die sich in einem externen Magnetfeld befindet, das hinreichend groß ist, den Kristall im ferromagnetischen Zustand zu sättigen; und kühlen diesen Kristall unterhalb die Curie Temperatur ab, dann verliert er, wie in Abb. (8) angedeutet seine Kugelgestalt und wird zum Ellipsoid.



Diese Verzerrung, ausgedrückt als Längenänderung  $\delta\ell$  relativ zur Einheitslänge  $\ell$ , bezeichnen wir im Gegensatz zu Verformungen  $\varepsilon$ , verursacht durch angelegte oder innere mechanische Spannungen  $\sigma$ , als  $\lambda = \delta\ell/\ell$ .  $\lambda(T, H, \widehat{\mathbf{M}})$  hängt ab von der Temperatur, dem angelegten Magnetfeld, der Magnetisierungsrichtung, der Chemie, usw. Der Wert  $\lambda$ , gemessen bei Sättigungsmagnetisierung nennt man Sättigungsmagnetostriktion, und das ist, was wir meinen, wenn das Wort Magnetostriktion hier benutzt wird. Die Gestaltmagnetostriktion, oder Kristallmagnetostriktion, oder die longitudinale Magnetostriktion, die wir gerade hier diskutiert haben, ist nicht der einzige magnetostriktive Effekt. Da die Formanisotropie von der Form des magnetischen Körpers abhängt, kann sich diese durch Veränderung der Form infolge von magnetoelastischen Verzerrungen ändern. Wir erwarten daher auch einen zusätzlichen magnetoelastischen Beitrag zur Formanisotropie, der auch *Formeffekt* genannt wird. Die durch diesen Beitrag induzierte Längenänderung ist erheblich kleiner als  $\delta\ell/\ell \ll 10^{-6}$  und bleibt in diesem Abschnitt unberücksichtigt. Da

die Volumenmagnetostriktion klein ist, bleibt das Volumen nahezu konstant. D.h. es gibt eine transversale Magnetostriktion  $\lambda_t$ , die nahezu die Hälfte der longitudinalen Magnetostriktion ist, aber mit entgegengesetzten Vorzeichen

$$\lambda_t = -\frac{1}{2}\lambda. \quad (34)$$

In diesem Abschnitt diskutieren wir den magnetoelastischen Beitrag zur Kristallanisotropie. Wir beschränken uns auf den Volumenterm und lassen den entsprechenden Index  $V$  weg.

**Longitudinale Dehnung:** Die Ausdehnung  $\lambda(\epsilon^\circ)$  ist verknüpft mit  $\epsilon^\circ(\widehat{M})$  nach den Regeln der Elastizitätstheorie: Betrachten wir einen Meßpunkt P auf der Probe, definiert durch den Vektor  $\mathbf{x}$  mit den Koordinaten  $x_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  des unverzerrten Gitters. Nach der Deformation hat der Aufpunkt P den neuen Wert  $\mathbf{x}'$  mit den Komponenten  $x'_i$ . Die Verschiebung des Aufpunktes durch die Deformation wird dann durch den Verschiebungsvektor  $\mathbf{u} = \mathbf{x}' - \mathbf{x}$  mit den Komponenten  $u_i = x'_i - x_i$  dargestellt. Die Koordinaten  $x'_i$  des verschobenen Punktes und des Verschiebungsvektors  $u_i$  sind natürlich Funktionen der Koordinaten  $x_i$  vor der Verschiebung. Betrachten wir nun zwei Punkte am Ort  $x_i$  und  $x_i + \Delta x_i$ . Vor einer infinitesimalen Deformation war der Abstandsvektor zwischen den zwei Punkten  $\Delta x_i$  und danach  $\Delta x_i + du_i$ , wobei für  $du_i$  die folgende Beziehung gilt:

$$du_i = \sum_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \Delta x_j. \quad (35)$$

$\partial u_i / \partial x_j$  bezeichnet einen Verzerrungstensor. Er wird im allgemeinen aufgeteilt in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Anteil. Der antisymmetrische Anteil beschreibt die Rotation des Kristalls als ganzes ohne jegliche Verzerrung des Gitters. Der symmetrische Verzerrungstensor

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (36)$$

beschreibt die Verformung des Kristalls in der Nachbarschaft des Aufpunktes P. Er hat 6 unabhängige Komponenten. Wir gehen von einem homogenen Kristall aus, so daß die Komponenten  $\varepsilon_{ij}$  unabhängig vom Ort sind.

Der Abstand zwischen den zwei Punkten war vor der Deformation durch Änderung der Magnetisierungsrichtung

$$\Delta \ell = \sqrt{\Delta x_1^2 + \Delta x_2^2 + \Delta x_3^2}, \quad (37)$$

und nach der magnetisch verursachten Deformation ist er

$$\begin{aligned} \Delta \ell' &= \sqrt{\Delta x_1'^2 + \Delta x_2'^2 + \Delta x_3'^2} \\ &= \sqrt{(\Delta x_1 + du_1)^2 + (\Delta x_2 + du_2)^2 + (\Delta x_3 + du_3)^2} \\ &\approx \Delta \ell \sqrt{1 + 2(du_1 \Delta x_1 + du_2 \Delta x_2 + du_3 \Delta x_3) / \Delta \ell^2} \\ &\approx \Delta \ell + \sum_i du_i \Delta x_i / \Delta \ell. \end{aligned} \quad (38)$$

Die relative Gitterdeformation  $\lambda = \delta(\Delta\ell)/\Delta\ell = (\Delta\ell' - \Delta\ell)/\Delta\ell$  berechnet sich dann durch

$$\lambda = \sum_i du_i \Delta x_i / \|\Delta \mathbf{x}\|^2 = \sum_{ij} \varepsilon_{ij} \beta_i \beta_j. \quad (39)$$

**Magnetoelastische Energie:** In der vorhergehenden Diskussion in Kapitel 2.3 blieb der Zusammenhang zwischen Magnetisierungsrichtung  $\widehat{\mathbf{M}}$  und der Verzerrung, ausgedrückt durch den Verzerrungstensor  $\boldsymbol{\varepsilon}$  unberücksichtigt.  $\boldsymbol{\varepsilon}$  wurde Null gesetzt. In der Vorbemerkung haben wir bereits erfahren, daß eine Längenänderung  $\lambda = \delta\ell/\ell$  in der Größenordnung von  $10^{-5} \sim 10^{-7}$  in Abhängigkeit der Magnetisierungsrichtung beobachtet wurde. Um diesen Zusammenhang zu behandeln, berücksichtigen wir zusätzlich zum rein magnetischen Beitrag der freien Energiedichte,  $F_{\text{Krist.}}(\widehat{\mathbf{M}})$ , die *magnetoelastische Energie* im thermodynamischen Potential  $F_{\text{magn-el.}}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon})$  und den elastischen Anteil  $F_{\text{el.}}(\boldsymbol{\varepsilon})$ .  $F_{\text{magn-el.}}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon})$  ist explizit abhängig von  $\widehat{\mathbf{M}}$  und  $\boldsymbol{\varepsilon}$ . Der Gesamtausdruck kann wie folgt zusammengefaßt werden:

$$F(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon}) = F_{\text{Krist.}}(\widehat{\mathbf{M}}) + F_{\text{magn-el.}}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon}) + F_{\text{el.}}(\boldsymbol{\varepsilon}), \quad (40)$$

oder die entsprechenden Gibbs'schen freien Energien

$$G(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\sigma}) = G_{\text{Krist.}}(\widehat{\mathbf{M}}) + G_{\text{magn-el.}}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\sigma}) + G_{\text{el.}}(\boldsymbol{\sigma}). \quad (41)$$

Die relative, spontane Gleichgewichtsmagnetostriktion  $\lambda$  entlang der Meßrichtung  $\hat{\mathbf{x}} = (\beta_1, \beta_2, \beta_3)$  als Funktion der Magnetisierungsrichtung  $\widehat{\mathbf{M}} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$  erhält man durch Minimierung von  $F(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon})$  in Gl. (40) bezüglich  $\boldsymbol{\varepsilon}$ .  $\beta_i = \Delta x_i / \|\Delta \mathbf{x}\|$  sind die Richtungskosinusse in der Meßrichtung des Abstandsvektors  $\Delta \mathbf{x} = (\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3)$ . Aus der Minimierung der Gl. (40) erhält man den Verzerrungstensor  $\boldsymbol{\varepsilon}^\circ(\widehat{\mathbf{M}})$  im Gleichgewicht von elastischer und magnetoelastischer Energie.

Im Falle der Magnetostriktion  $\lambda(\widehat{\mathbf{M}})$  bzw.  $\lambda(\alpha_i)$  sind die Komponenten des Verzerrungstensors  $\varepsilon_{ij}$  durch die Komponenten des Gleichgewichtstensors  $\varepsilon_{ij}^\circ(\widehat{\mathbf{M}})$  bzw.  $\varepsilon_{ij}^\circ(\alpha_k)$  zu ersetzen und wir erhalten

$$\lambda(\widehat{\mathbf{M}}) = \sum_{ij} \varepsilon_{ij}^\circ(\widehat{\mathbf{M}}) \beta_i \beta_j \quad \text{bzw.} \quad \lambda(\alpha_k) = \sum_{ij} \varepsilon_{ij}^\circ(\alpha_k) \beta_i \beta_j. \quad (42)$$

Da die Verformung des Kristalls durch die Gegenwart der Magnetostriktion klein ist, kann die freie Energiedichte  $F(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon})$  nach Potenzen des Verzerrungstensors  $\varepsilon_{ij}$  entwickelt werden.

$$F(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon}) = F(\widehat{\mathbf{M}}) + \sum_{ij} F_{ij}(\widehat{\mathbf{M}}) \varepsilon_{ij} + \sum_{ijkl} F_{ijkl}(\widehat{\mathbf{M}}) \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} + \dots \quad (43)$$

Analog könnte man natürlich die Gibbs'sche freie Energie entwickeln, wir beschränken uns hier aber auf die freie Energie. Der erste Term entspricht gerade der Volumenanisotropie,  $F_{\text{Krist.}}(\widehat{\mathbf{M}})$ , beschrieben in Kapitel 2.3, und hat genau die Form gemäß Gl. (11)<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Zwischen  $G_{\text{Krist.}}$  in Gl. (11) und  $F_{\text{Krist.}}$  in Gl. (43) gibt es einen feinen Unterschied. In Gl. (11) ist  $G_{\text{Krist.}}$  das thermodynamische Potential zu konstanter elastischen Spannung bzw. des freideformierbaren

### 3.3 Elastische Wechselwirkung

In der Elastizitätstheorie ändert sich die freie Energie quadratisch mit dem Verzerrungstensor. Man denke in diesem Zusammenhang an das Hooke'sche Gesetz angewandt auf einen quasi-eindimensionalen Körper in Form eines Drahtes, der entlang einer Richtung, z.B. der  $x$ -Richtung, dilatiert wird. In diesem Fall ist die freie Energie  $F$  eine quadratische Funktion der Dilatation  $\varepsilon_{11}$

$$F = \frac{1}{2} K \varepsilon_{11}^2, \quad (44)$$

wobei  $K$  der Kompressionsmodul, oder mit anderem Vorzeichen, der Zugmodul ist. Die allgemeine Form der freien Energie eines deformierten Kristalls ist

$$F_{\text{el.}}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl}. \quad (45)$$

Wenn man die  $\widehat{M}$  Abhängigkeit im dritten Term von Gl. (43) vernachlässigt<sup>2</sup> und die  $F_{ijkl}$  mit den  $1/2 C_{ijkl}$  identifiziert, dann ist der dritte Term in Gl. (43) gerade die elastische Energie. Das quadratische Verhalten läßt sich daraus ableiten, daß sich die Energie aus dem Integral der Kraft  $K$  und der Änderung des Weges  $s$ ,  $F = \int K(s) ds$ , ableitet. Übersetzt in die Sprache der Elastizitätstheorie heißt dies: das Integral der mechanischen Spannung  $\sigma_{ij}(\boldsymbol{\varepsilon})$  bei Änderung der Verzerrung,  $F = \sum_{ij} \int \sigma_{ij}(\boldsymbol{\varepsilon}) d\varepsilon_{ij}$ . Nach der klassischen Lehre der Elastizitätstheorie gibt es einen lineare Zusammenhang (Hooke'sches Gesetz) zwischen den Komponenten der Spannung und der Verzerrung  $\sigma_{ij}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \sum_{ijkl} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}$ , was den quadratischen Zusammenhang der elastische Energie als Funktion der Verzerrung erklärt.  $C_{ijkl}$  ist ein Tensor vierter Stufe, welchen man auch Tensor der Elastizitätsmoduln oder Tensor der elastischen Konstanten nennt. Er hat  $3^4$  Komponenten. Da der Verzerrungstensor symmetrisch ist, ändert sich das Produkt  $\varepsilon_{ij} \cdot \varepsilon_{kl}$  nicht mit Vertauschung der Indizes  $i$  mit  $j$ ,  $k$  mit  $l$  oder des Paares  $i,j$  mit dem Paar  $k,l$ . Es ist daher offensichtlich, daß auch von dem Tensor  $C_{ijkl}$  angenommen werden kann, daß er die gleichen Symmetrieeigenschaften bezüglich der Vertauschung von Indizes hat

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} = C_{klij}. \quad (46)$$

Mittels einfacher Rechnung kann man sich davon überzeugen, daß ein Tensor vierter Stufe mit diesen Symmetrieeigenschaften nur noch maximal 21 unabhängige Komponenten besitzt. 21 ist aber gerade die Anzahl der  $n(n+1)/2$  unabhängigen Komponenten eines  $n = 6$ -dimensionalen, symmetrischen Tensors zweiter Stufe. Tatsächlich findet man in der Literatur vorwiegend die Voigt'sche Notation  $c_{\mu\nu}$  für die Komponenten des Tensors  $C_{ijkl}$ .

Körpers, und in Gl. (43) ist  $F_{\text{Krist.}}$  die freie Energie zu verschwindender Verzerrung. Die Form der Entwicklung von  $G_{\text{Krist.}}$  und  $F_{\text{Krist.}}$  ist durch die Symmetriebedingungen des Kristalls vorgegeben und sind in beiden Fällen identisch. Wir gehen kurz in Gl. (70) auf diese Feinheit ein.

<sup>2</sup>Tatsächlich gibt es eine Abhängigkeit der elastischen Konstanten  $C_{ijkl}$  von der Richtung der Magnetisierung  $\widehat{M}$ . Sie wurde z.B. für Nickel beobachtet und beträgt etwa 1% [17]. Dieser Effekt heißt *morphischer Effekt*.

Dann durchlaufen die Indizes  $\mu$  und  $\nu$  von  $c_{\mu\nu}$  die Werte  $1, \dots, 6$ , welche für die Indexpaare  $xx, yy, zz, yz, zx, xy$  stehen. Im nachfolgenden Text schreiben wir aus Gründen der Anschaulichkeit den Verzerrungstensor stets in der Form  $\varepsilon_{ij}$ , arbeiten aber stets in der Voigt'schen Notation  $\varepsilon_\mu$ , deshalb kommen stets nur Tensorkomponenten  $i \leq j$  vor. Die Summation  $\lambda(\alpha_k) = \sum_{i,j} \varepsilon_{ij}^\circ(\alpha_k) \beta_i \beta_j$  in Gl. (42) schreibt sich dann  $\sum_\mu \varepsilon_\mu^\circ \beta_\mu \beta_\mu$ .

**1.) Kubische Systeme:** Bei Systemen kubischer Symmetrie sind die 3 Achsen  $x, y, z$  ununterscheidbar und man benötigt nur 3 unabhängige Elastizitätsmoduln:  $C_{xxxx}, C_{xyyy}$ , und  $C_{xyxy}$  entsprechend  $c_{11}, c_{12}, c_{44}$  und die freie Energiedichte schreibt sich:

$$F_{\text{el.}}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2}c_{11}(\varepsilon_{11}^2 + \varepsilon_{22}^2 + \varepsilon_{33}^2) + c_{12}(\varepsilon_{11}\varepsilon_{22} + \varepsilon_{22}\varepsilon_{33} + \varepsilon_{11}\varepsilon_{33}) + \frac{1}{2}c_{44}(\varepsilon_{12}^2 + \varepsilon_{23}^2 + \varepsilon_{13}^2). \quad (47)$$

**2.) Hexagonale Systeme:** Die freie Energie hexagonale Systeme wird durch 5 unabhängige Module beschrieben:  $c_{11}, c_{12}, c_{33}, c_{13}, c_{44}$ , und für die freie Energiedichte erhalten wir

$$F_{\text{el.}}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2}c_{11}(\varepsilon_{11}^2 + \varepsilon_{22}^2) + \frac{1}{2}c_{11}\varepsilon_{11}\varepsilon_{22} + c_{12}\varepsilon_{11}\varepsilon_{22} + c_{13}(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22})\varepsilon_{33} + \frac{1}{2}c_{44}(\varepsilon_{13}^2 + \varepsilon_{23}^2) + (c_{11} - c_{12})\varepsilon_{12}^2. \quad (48)$$

Die elastischen Konstanten für Fe, Co, und Ni sind in Tabelle (4) aufgelistet.

**Tabelle 4:** Elastische Konstanten  $c_{ij}$  in Einheiten von  $10^{11}$  N/m<sup>2</sup> von Fe [18], Co [19], und Ni [20] bei Raumtemperatur.

	$c_{11}$	$c_{12}$	$c_{13}$	$c_{33}$	$c_{44}$
Fe (bcc)	2.41	1.46	-	-	1.12
Co (hcp)	3.07	1.65	1.03	3.58	0.76
Ni (fcc)	2.50	1.60	-	-	1.18

### 3.4 Magnetoelastische Wechselwirkung

Der zweite Term in Gl. (43) ist offensichtlich neu und folgt aus der Wechselwirkung zwischen magnetischer Anisotropie und Verzerrung und ist die magnetoelastische Energiedichte  $F_{\text{magn-el.}}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon})$ . Analog zur Vorgehensweise in Abschnitt 2.3 entwickeln wir  $F_{ij}(\widehat{\mathbf{M}})$  nach Komponenten  $\widehat{\mathbf{M}}$  der Magnetisierungsrichtung  $\widehat{\mathbf{M}} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$  bezogen auf die kristallographischen Achsen:

$$F_{\text{magn-el.}}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon}) = \sum_{ij} B_{ij}\varepsilon_{ij} + \sum_{ijk} B_{ijk}\varepsilon_{ij}\alpha_k + \sum_{ijkl} B_{ijkl}\varepsilon_{ij}\alpha_k\alpha_l + \dots \quad (49)$$

Der Term 0-ter Ordnung gibt Beiträge zur Volumenänderung (Volumenstriktion) aufgrund magnetoelastischer Wechselwirkungen und hängt nicht von der Magnetisierungsrichtung

ab. Er wird hier nicht weiter betrachtet. Der zweite Term, linear in den  $\alpha_i$ , bzw. alle ungeraden Terme in  $\alpha_i$  sind abwesend aus Gründen der Zeitumkehrinvarianz, die gültig ist, da die spontane Magnetostriktion ein statische Eigenschaft ist ( $B_{ijk} \equiv 0, \forall i, j, k \in \{1, 2, 3\}$ ). Der erste nicht verschwindende Term ist quadratisch in den  $\alpha_i$

$$F_{\text{magn-el.}}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon}) = \sum_{ijkl} B_{ijkl} \varepsilon_{ij} \alpha_k \alpha_l. \quad (50)$$

$B_{ijkl}$  sind die magnetoelastischen Konstanten oder auch magnetoelastischen Kopplungskonstanten. Terme höher Ordnung sind sehr klein, müssen aber gelegentlich herangezogen werden, um experimentelle Ergebnisse vollkommen zu beschreiben. Wir vernachlässigen diese hier. Analog zur elastischen Energie und zur magnetischen Anisotropie, sind die verschiedenen Komponenten der  $B_{ijkl}$  aufgrund der dem Kristall zugrunde liegenden Symmetrie miteinander verknüpft. Für die kubischen und hexagonalen Systeme erhält man folgende Ausdrücke:

### 1.) Kubische Systeme:

$$\begin{aligned} F_{\text{magn-el.}}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon}) &= B_{1111} (\varepsilon_{11} \alpha_1^2 + \varepsilon_{22} \alpha_2^2 + \varepsilon_{33} \alpha_3^2) \\ &+ B_{1122} [(\varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) \alpha_1^2 + (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{33}) \alpha_2^2 + (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22}) \alpha_3^2] \\ &+ 2B_{2323} (\varepsilon_{12} \alpha_1 \alpha_2 + \varepsilon_{13} \alpha_1 \alpha_3 + \varepsilon_{23} \alpha_2 \alpha_3) + \dots \end{aligned} \quad (51)$$

Tabelliert sind die magnetoelastischen Kopplungskonstanten  $B_0, B_1, B_2$ . Sie sind mit den Koeffizienten  $B_{ijkl}$  durch folgende Relationen

$$B_0 = \frac{1}{3} (2B_{1122} - B_{1111}), \quad B_1 = B_{1111} - B_{1122}, \quad \text{und} \quad B_2 = 2 B_{2323} \quad (52)$$

verknüpft. Damit ist

$$\begin{aligned} F_{\text{magn-el.}}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon}) &= B_0 (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) \\ &+ B_1 \left( \varepsilon_{11} (\alpha_1^2 - \frac{1}{3}) + \varepsilon_{22} (\alpha_2^2 - \frac{1}{3}) + \varepsilon_{33} (\alpha_3^2 - \frac{1}{3}) \right) \\ &+ B_2 (\varepsilon_{12} \alpha_1 \alpha_2 + \varepsilon_{13} \alpha_1 \alpha_3 + \varepsilon_{23} \alpha_2 \alpha_3) + \dots \end{aligned} \quad (53)$$

Ist die Deformation formerhaltend, dann gilt wegen der kubischen Symmetrie,  $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33}$ , und  $\varepsilon_{12} = \varepsilon_{13} = \varepsilon_{23} = 0$ . Berücksichtigt man die Normierung der Richtungskosinusse,  $\sum_i \alpha_i^2 = 1$ , reduziert sich  $F_{\text{magn-el.}}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon})$  zu  $F_{\text{magn-el.}}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon}) = 3B_0 \varepsilon_{11} = B_0 \delta V / V^3$ .  $B_0$  ist offensichtlich verknüpft mit der Volumenänderung oder Kompression,  $B_1$  und  $B_2$  mit der Scherung. Offensichtlich enthalten  $F_{\text{magn-el.}}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon})$  für kubische Systeme quadratische Terme in  $\alpha_i$ , obwohl für das unverzerrte Ausgangssystem ohne magnetoelastische Wechselwirkung die ersten nichtverschwindenden Terme 4-ter Ordnung waren. Da die Verzerung die Symmetrie des Systems im allgemeinen verringert, enthält die magnetoelastische Energie offensichtlich Energieterme, die im unverzerrten Zustand Null sind.

---


$${}^3dV = dx_1 dx_2 dx_3, \quad dV' = dx_1' dx_2' dx_3' = (dx_1 + du_1)(dx_2 + du_2)(dx_3 + du_3) \approx dV + du_1 dx_2 dx_3 + dx_1 du_2 dx_3 + dx_1 dx_2 du_3 = dV + dV(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) \implies \delta V / V = (dV' - dV) / dV = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}.$$

**Tabelle 5:** Die magnetoelastischen Konstanten  $B_1, B_2, B_3, B_4$  für Fe, Co und Ni bei Raumtemperatur.

		Fe (bcc)	Co (hcp)	Ni (fcc)
$B_1$	[erg/cm <sup>3</sup> ]	$-3.44 \times 10^7$	$-8.10 \times 10^7$	$8.87 \times 10^7$
	[meV/atom]	$-2.53 \times 10^{-4}$	$-5.63 \times 10^{-4}$	$6.05 \times 10^{-4}$
$B_2$	[erg/cm <sup>3</sup> ]	$-7.62 \times 10^7$	$-2.90 \times 10^8$	$1.02 \times 10^8$
	[meV/atom]	$-5.56 \times 10^{-4}$	$-2.02 \times 10^{-3}$	$6.97 \times 10^{-4}$
$B_3$	[erg/cm <sup>3</sup> ]	-	$-2.82 \times 10^8$	-
	[meV/atom]	-	$-1.96 \times 10^{-3}$	-
$B_4$	[erg/cm <sup>3</sup> ]	-	$-2.94 \times 10^8$	-
	[meV/atom]	-	$-2.05 \times 10^{-3}$	-

**2.) Hexagonale Systeme:** Analog zur kubischen Symmetrie erhält man für das magnetoelastische Potential eines hexagonalen Kristalls

$$\begin{aligned}
 F_{\text{magn-el.}}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon}) &= B_1 (\varepsilon_{11}\alpha_1^2 + 2\varepsilon_{12}\alpha_1\alpha_2 + \varepsilon_{22}\alpha_2^2) + B_2 \varepsilon_{33} (1 - \alpha_3^2) \\
 &+ B_3 (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22})(1 - \alpha_3^2) + B_4 (\varepsilon_{23}\alpha_2\alpha_3 + \varepsilon_{13}\alpha_1\alpha_3) + \dots \quad (54)
 \end{aligned}$$

Die magnetoelastischen Konstanten sind für Fe, Co, und Ni in Tabelle (5) aufgelistet. Die Konstanten sind erheblich größer als die Anisotropiekonstanten für die magnetokristalline Anisotropie und als Konsequenz folgt, daß kleine Verzerrungen wichtige Beiträge zur magnetokristallinen Anisotropie liefern.

**Spannungen:** Die Spannungen  $\sigma_{ij}$  sind durch die Ableitung der freien Energie bezüglich der Verformung gegeben:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{ij} &= \frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{ij}} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{ij}} (F_{\text{magn-el.}} - F_{\text{el.}}) \\
 &= \sum_{kl} B_{ijkl} \alpha_k \alpha_l + \sum_{kl} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad (55)
 \end{aligned}$$

da  $C_{ijkl} = C_{klij}$ . Von diesem Ausdruck wird die Bedeutung der Koeffizienten  $B_{ijkl}$  klar. Sie sind verknüpft mit der Spannung, die man in einem ferromagnetischen Material anlegen muß, damit die Dehnungen  $\varepsilon_{ij}$  verschwinden.  $\sum_{kl} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}$  ist der elastische Beitrag zur Spannung.

### 3.5 Spontane Deformation des Gitters

Minimiert man nun  $F_{\text{magn-el.}}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon}) + F_{\text{el.}}(\boldsymbol{\varepsilon})$  bezüglich  $\boldsymbol{\varepsilon}$ , so erhält man den Verzerrungstensor  $\boldsymbol{\varepsilon}^o$  im Gleichgewicht von magnetoelastischer und elastischer Energie.

## 1.) Kubische Systeme:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{ii}^{\circ} &= -\frac{1}{(c_{11} - c_{12})} \left[ B_0 + B_1 \left( \alpha_i^2 - \frac{1}{3} \right) \right] \quad \text{für } i = 1, 2, 3 \\ \varepsilon_{ij}^{\circ} &= -\frac{B_2}{c_{44}} \alpha_i \alpha_j \quad \text{für } i \neq j, \quad \text{und } i, j = 1, 2, 3.\end{aligned}\quad (56)$$

Setzt man  $\varepsilon^{\circ}(\widehat{\mathbf{M}})$  in Gl. (42), so erhält man für die Magnetostriktion

$$\begin{aligned}\lambda = \frac{\delta \ell}{\ell} &= -3 \frac{B_0}{(c_{11} - c_{12})} - \frac{B_1}{(c_{11} - c_{12})} \left( \alpha_1^2 \beta_1^2 + \alpha_2^2 \beta_2^2 + \alpha_3^2 \beta_3^2 - \frac{1}{3} \right) \\ &- \frac{B_2}{c_{44}} (\alpha_1 \alpha_2 \beta_1 \beta_2 + \alpha_2 \alpha_3 \beta_2 \beta_3 + \alpha_3 \alpha_1 \beta_3 \beta_1).\end{aligned}\quad (57)$$

Die feldinduzierte relative Längenänderung wird gemessen, indem man einen Kristall in einem magnetischen Feld  $H$  von einem entmagnetisierten Zustand in einen magnetisch gesättigten Zustand überführt. Der magnetisch gesättigte Zustand ist wohl definiert. Per Definitionem ist es der Zustand, in dem die gesamte Probe eine einzige magnetische Domäne aufweist, wobei die Magnetisierung  $\widehat{\mathbf{M}}$  parallel zur Feldrichtung  $\mathbf{H}$  ist. Auf der anderen Seite ist der entmagnetisierte Zustand keinesfalls wohldefiniert. Makroskopisch bedeutet der entmagnetisierte Zustand, daß die Probe keine Nettomagnetisierung  $\mathbf{M}$  aufweist. Das einzige was dazu mikroskopisch verlangt wird ist, daß die Magnetisierungen aller Domänen der Probe, jede gewichtet mit ihrem Volumen, sich vektoriell zu Null aufsummieren. Es gibt jedoch eine unendliche Anzahl von Domänenanordnungen und relativen Volumina, welche zu einer Gesamtmagnetisierung  $\mathbf{M} = \mathbf{0}$  führen. Wir definieren jetzt den *ideal entmagnetisierten* Zustand als den, für den alle möglichen Typen von magnetischen Domänen das gleiche Volumen haben. Zum Beispiel ist für den kubischen Eisenkristall, mit der [100] Achse als leichte Magnetisierungsachse, der ideal entmagnetisierte Zustand der Zustand, für den das gesamte Volumen der Probe unter den sechs Arten von Domänen: [100], [ $\bar{1}$ 00], [010], [0 $\bar{1}$ 0], [001], [00 $\bar{1}$ ], gleich aufgeteilt ist. Nach dieser Definition können wir den Nullpunkt von  $\lambda(0) = \delta l/l_{(0)}$  definieren. In diesem Fall gilt für die kubischen<sup>4</sup> Kristalle  $\langle \alpha_i^2 \rangle = 1/3$ , für  $i = 1, 2, 3$  und  $\langle \alpha_i \alpha_j \rangle = 0$  für  $i \neq j$ , und  $i, j = 1, 2, 3$ . Dann ist

$$\lambda(0) = \frac{\delta \ell}{\ell}(0) = -3 \frac{B_0}{(c_{11} - c_{12})}, \quad (58)$$

und die Magnetostriktion reduziert sich auf

$$\begin{aligned}\lambda = \frac{\delta \ell}{\ell} &= -\frac{B_1}{(c_{11} - c_{12})} \left( \alpha_1^2 \beta_1^2 + \alpha_2^2 \beta_2^2 + \alpha_3^2 \beta_3^2 - \frac{1}{3} \right) \\ &- \frac{B_2}{c_{44}} (\alpha_1 \alpha_2 \beta_1 \beta_2 + \alpha_2 \alpha_3 \beta_2 \beta_3 + \alpha_3 \alpha_1 \beta_3 \beta_1).\end{aligned}\quad (59)$$

<sup>4</sup>Dies gilt auch für den Fall der isotropen Verteilung aller Domänen  $\langle \cos^2 \theta \rangle = 1/3$ .

Vielfach wird die Magnetostriktion in Richtung der Magnetisierung gemessen, d.h.  $\alpha_i = \beta_i, \forall i = \{1, 2, 3\}$  und die relative Längenänderung ist gegeben durch

$$\lambda_{\parallel} = \frac{\delta \ell}{\ell} \Big|_{\parallel} = -\frac{B_1}{(c_{11} - c_{12})} \left( \alpha_1^4 + \alpha_2^4 + \alpha_3^4 - \frac{1}{3} \right) - \frac{B_2}{c_{44}} (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2). \quad (60)$$

Das kann noch weiter durch Verwendung des folgenden Ausdrucks

$$(\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2)^2 = (\alpha_1^4 + \alpha_2^4 + \alpha_3^4) + 2(\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) = 1 \quad (61)$$

reduziert werden zu

$$\lambda_{\parallel} = \frac{\delta \ell}{\ell} \Big|_{\parallel} = -\frac{2}{3} \frac{B_1}{(c_{11} - c_{12})} - \left( \frac{B_2}{c_{44}} - \frac{1}{3} \frac{B_1}{(c_{11} - c_{12})} \right) (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2). \quad (62)$$

Offensichtlich gibt es zwei Konstanten  $B_1$  und  $B_2$  die experimentell bestimmt werden müssen. Da die tetragonale [100] Richtung und rhomboedrische [111] Richtungen die leichten und schweren Achsen der kubischen Metalle Fe und Ni sind, hat sich eingebürgert, die Längenänderung entlang dieser Scherrichtungen zu messen, bei gleichzeitiger Sättigungsmagnetisierung in diesen Richtungen. Für die Würfelkantenrichtung [100] liefert Gl. (62) mit  $\alpha_1 = 1, \alpha_2 = \alpha_3 = 0$

$$\lambda_{[100]} = \frac{\delta \ell}{\ell} \Big|_{[100]} = -\frac{2}{3} \frac{B_1}{(c_{11} - c_{22})} \quad (63)$$

und für die Würfeldiagonale [111] mit  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}$

$$\lambda_{[111]} = \frac{\delta \ell}{\ell} \Big|_{[111]} = -\frac{1}{3} \frac{B_2}{c_{44}}. \quad (64)$$

Gl. (62) vereinfacht sich dann zu dem Ausdruck

$$\lambda_{\parallel} = \frac{\delta \ell}{\ell} \Big|_{\parallel} = \lambda_{[100]} + 3(\lambda_{[111]} - \lambda_{[100]})(\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2). \quad (65)$$

Substituieren wir die Definitionen in Gl. (59), erhalten wir die bekannte *Zweikonstanten* Gleichung der Magnetostriktion kubischer Kristalle

$$\begin{aligned} \lambda = \frac{\delta \ell}{\ell} &= \frac{3}{2} \lambda_{[100]} \left( \alpha_1^2 \beta_1^2 + \alpha_2^2 \beta_2^2 + \alpha_3^2 \beta_3^2 - \frac{1}{3} \right) \\ &+ 3 \lambda_{[111]} (\alpha_1 \alpha_2 \beta_1 \beta_2 + \alpha_2 \alpha_3 \beta_2 \beta_3 + \alpha_3 \alpha_1 \beta_3 \beta_1). \end{aligned} \quad (66)$$

Die Gleichung ist teilweise empirisch, teilweise theoretisch begründet. Ausgehend von der Annahme, daß die spontane Verzerrung des Gitters von magnetischen Dipol-Dipol-Wechselwirkungen zwischen Elementarmagneten herrührt, haben Akulov [21], Becker [22], und Powell [23] Gl. (66) für die Magnetostriktion kubischer Kristalle abgeleitet. Die Magnetostruktionskonstanten sind jedoch eine Größenordnung kleiner als die gemessenen Werte. Heute wissen wir natürlich, daß die Ursache der Magnetostriktion die Spin-Bahn-Wechselwirkung ist. Ableitungen der Gleichung unter diesem Aspekt wurden unter anderen durch Lee [24] und Kittel [25] gegeben. Sie ist gültig unter der Annahme idealer

Entmagnetisierung.  $\lambda_{[100]}$  und  $\lambda_{[111]}$  sind die *Magnetostruktionskonstanten*. Für Fe, Co und Ni sind sie in Tabelle (6) aufgelistet. Offensichtlich genügt es, die Magnetostruktion in kubischen Kristallen durch nur zwei<sup>5</sup> Konstanten auszudrücken. Die Dilatation in [110] Richtung ist nicht unabhängig von  $\lambda_{[100]}$  und  $\lambda_{[111]}$ , sondern kann durch diese ausgedrückt werden

$$\lambda_{[110]} = \frac{1}{4}\lambda_{[100]} + \frac{3}{4}\lambda_{[111]}, \quad (67)$$

was man sofort erhält, wenn man  $\alpha_1 = \alpha_2 = \beta_1 = \beta_2 = 1/\sqrt{2}$ ,  $\alpha_3 = \beta_3 = 0$  in Gl. (65) einsetzt. Wenn wir annehmen, daß die Magnetostruktion isotrop ist, das heißt  $\lambda_{[100]} = \lambda_{[111]}$ , folgt direkt aus Gl. (67), daß  $\lambda_\infty = \lambda_{[100]} = \lambda_{[111]} = \lambda_{[110]}$  was unsere Annahme bestätigt, daß keine Richtung ausgezeichnet ist. In diesem Fall reduziert sich die Zweikonstantengleichung Gl. (66) zur Einkonstantengleichung

$$\begin{aligned} \lambda_\theta = \frac{\delta\ell}{\ell}|_\theta &= \frac{3}{2}\lambda_\infty \left[ (\alpha_1\beta_1 + \alpha_2\beta_2 + \alpha_3\beta_3)^2 - \frac{1}{3} \right] \\ &= \frac{3}{2}\lambda_\infty \left( \cos^2 \theta - \frac{1}{3} \right), \end{aligned} \quad (68)$$

wobei  $\theta = \arccos \sum_i \alpha_i \beta_i$  der Winkel zwischen der spontanen Magnetisierung und der Richtung, in der  $\delta\ell/\ell$  gemessen wird, ist. Wegen der Isotropie der Magnetostruktion erscheint in Gl. (68) kein Bezug mehr zu den Kristallachsen. Kurioserweise gibt es kubische Materiale deren Magnetostruktionen sich isotrop verhalten. Abb. (9) zeigt die Abhängigkeit der Magnetostruktionskonstanten für die Familie der FeNi-Legierungen<sup>6</sup>. Dieses System zeigt isotrope Magnetostruktion bei den Konzentrationen von 60% und 85%. Bei der 85%-igen Legierung ist zusätzlich die Magnetostruktion fast Null. Bemerkenswert sind auch, daß  $\lambda_{[100]}$  einmal bei 45% Ni verschwindet, und der Vorzeichenwechsel wenn man sich mit der Konzentration von Nickel nach Eisen bewegt.

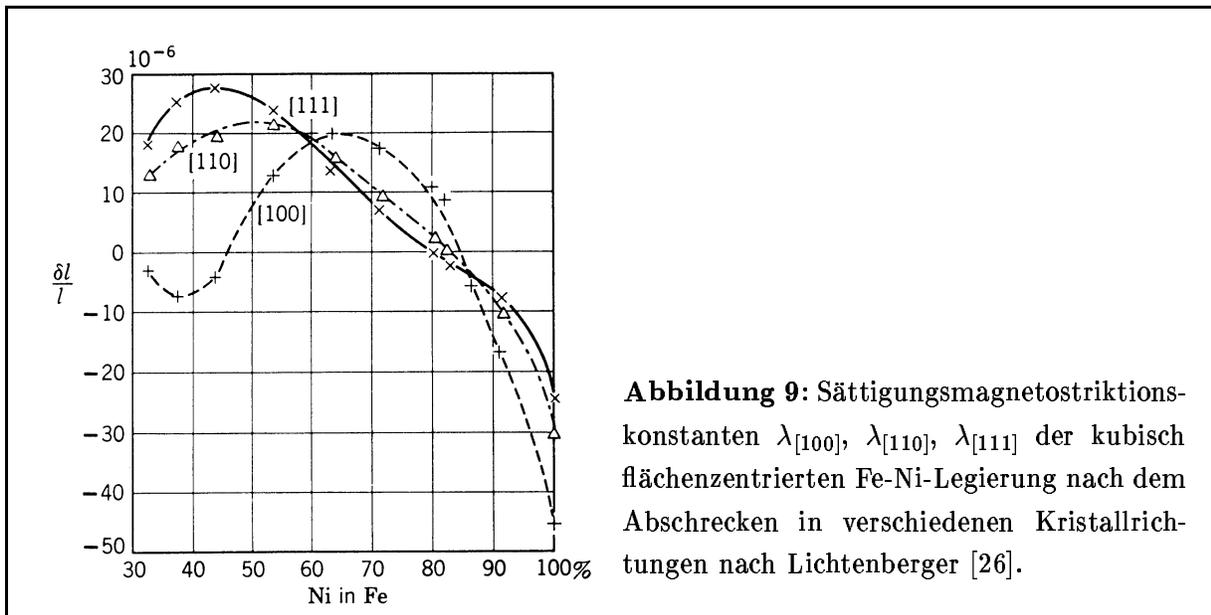
Da häufig  $\lambda_{[100]}$  und  $\lambda_{[111]}$  experimentell leichter zugänglich sind als  $B_1$  oder  $B_2$ , drückt man die magnetoelastische Energie oft an Hand dieser Konstanten aus. Wir schreiben deshalb zu Vollständigkeit unter Vernachlässigung des Termes  $\propto B_0$

$$\begin{aligned} F_{\text{magn-el.}}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon}) &= - \frac{3}{2} \lambda_{[100]} (c_{11} - c_{12}) \left( \varepsilon_{11} \left( \alpha_1^2 - \frac{1}{3} \right) + \varepsilon_{22} \left( \alpha_2^2 - \frac{1}{3} \right) + \varepsilon_{33} \left( \alpha_3^2 - \frac{1}{3} \right) \right) \\ &\quad - 3 \lambda_{[111]} c_{44} (\varepsilon_{12} \alpha_1 \alpha_2 + \varepsilon_{13} \alpha_1 \alpha_3 + \varepsilon_{23} \alpha_2 \alpha_3). \end{aligned} \quad (69)$$

Die Änderung der Form des Körpers durch die Magnetostruktion verändert natürlich auch die magnetokristalline Anisotropieenergiedichte für kubische Systeme. Es sei daran erinnert, daß es zwischen  $G_{\text{Krist.}}$  in Gl. (11) und Gl. (43) einen feinen Unterschied gibt. In

<sup>5</sup>Die nächst höhere Ordnung in der Entwicklung von Gl. (53) führt zu fünf Konstanten. Bei der Streuung der experimentellen Daten, können aber Zweifel aufkommen, ob ein Fit mit fünf Konstanten noch sinnvoll ist.

<sup>6</sup>Für diese Legierung, gegebenenfalls mit kleinen Zusätzen weiterer Elemente, verwendet man häufig den Namen Permalloy.



**Abbildung 9:** Sättigungsmagnetostruktionskonstanten  $\lambda_{[100]}$ ,  $\lambda_{[110]}$ ,  $\lambda_{[111]}$  der kubisch flächenzentrierten Fe-Ni-Legierung nach dem Abschrecken in verschiedenen Kristallrichtungen nach Lichtenberger [26].

Gl. (11) ist  $G_{\text{Krist.}}$  das thermodynamische Potential zu konstanter elastischen Spannung bzw. des freideformierbaren Körpers, und in Gl. (43) zu verschwindender Verzerrung. Wir berücksichtigen den Energiebetrag der vom Zustand verschwindender Verzerrung zum Zustand des freideformierten Festkörpers führt, indem wir die Gleichgewichtsverzerrung  $\epsilon^\circ$  in Gl. (40) einsetzen. Für die Energiedichte im freideformierten Gitter erhalten wir

$$G_{\text{Krist.}}^\sigma(\widehat{\mathbf{M}}) = K_0^\sigma + (K_1^\epsilon + K_1') (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) + \dots, \quad (70)$$

wobei  $K_0^\sigma$  der in diesem Zusammenhang uninteressante isotrope Anteil ist,  $K_1^\epsilon$  die kubische Anisotropiekonstante vierter Ordnung bei verschwindender Verzerrung entsprechend Gl. (40) und  $K_1^\sigma = K_1^\epsilon + K_1'$ , die Anisotropiekonstante vierter Ordnung bei konstanter Spannung entsprechend Gl. (11). Die Korrektur  $K_1'$  lautet

$$K_1' = \frac{9}{4} [(c_{11} - c_{12}) \lambda_{[100]}^2 - 2c_{44} \lambda_{[111]}^2]. \quad (71)$$

Setzen wir typische Zahlenwerte ein, so erhalten wir für  $K_1' \propto 9/4 \cdot 10^{11} \cdot (2 \cdot 10^{-6})^2 \text{J/m}^3 \simeq 0.9 \text{J/m}^3$ . Damit zeigt sich, daß  $K_1' \ll K_1^\epsilon$  und  $K_1^\sigma \simeq K_1^\epsilon$  ist. Dies ist in sofern wichtig, da nur  $K^\sigma$  dem Experiment direkt zugänglich ist.

**2.) Hexagonale Systeme:** Die Magnetostruktion eines hexagonalen Kristalls [27] wird durch folgende Gleichung gegeben

$$\begin{aligned} \lambda = \frac{\delta \ell}{\ell} &= \lambda_A [(\alpha_1 \beta_1 + \alpha_2 \beta_2)^2 - (\alpha_1 \beta_1 + \alpha_2 \beta_2) \alpha_3 \beta_3] \\ &+ \lambda_B [(1 - \alpha_3^2)(1 - \beta_3^2) - (\alpha_1 \beta_1 + \alpha_2 \beta_2)^2] \\ &+ \lambda_B [(1 - \alpha_3^2) \beta_3^2 - (\alpha_1 \beta_1 + \alpha_2 \beta_2) \alpha_3 \beta_3] \\ &+ \lambda_D (\alpha_1 \beta_1 + \alpha_2 \beta_2) \alpha_3 \beta_3, \end{aligned} \quad (72)$$

**Tabelle 6:** Die Magnetostruktionskonstanten  $\lambda_{[100]}$ ,  $\lambda_{[111]}$  in relativen Einheiten von Fe [28], Co [29], und Ni [30] bei Raumtemperatur. Teilweise liegt in den Daten eine relative große experimentelle Streuung vor. Ältere Daten sind bei Lee [24] zusammengestellt.

Fe (bcc)	Co (hcp)	Ni (fcc)
$\lambda_{[100]} = 24 \times 10^{-6}$	$\lambda_A = -50 \times 10^{-6}$	$\lambda_{[100]} = -66 \times 10^{-6}$
$\lambda_{[111]} = -23 \times 10^{-6}$	$\lambda_B = -107 \times 10^{-6}$	$\lambda_{[111]} = -29 \times 10^{-6}$
-	$\lambda_C = 126 \times 10^{-6}$	-
-	$\lambda_D = -105 \times 10^{-6}$	-

mit

$$\lambda_A + \lambda_B = \frac{2B_2c_{13} - (2B_3 + B_1)c_{33}}{c_{33}(c_{11} + c_{12}) - 2c_{13}^2} \quad (73)$$

$$\lambda_A - \lambda_B = \frac{B_1}{(c_{11} - c_{22})} \quad (74)$$

$$\lambda_C = \frac{B_2(c_{11} + c_{12}) - (2B_3 + B_1)c_{13}}{c_{33}(c_{11} + c_{12}) - 2c_{13}^2} \quad (75)$$

$$4\lambda_D - (\lambda_A + \lambda_B + \lambda_C) = \frac{B_4}{c_{44}}. \quad (76)$$

Gl. (72) entspricht der Gl. (59) für einen kubischen Kristall. Offensichtlich haben die beiden Ausdrücke Gl. (54) und Gl. (72) vier Konstanten. Dies ist genau wie in Gl. (59) die erste Näherung in der magnetoelastischen Energie. Die nächste Näherung mit höheren Potenzen von Richtungskosinussen hat dann 9 Konstanten. Wie im Falle der Anisotropien sind die Richtungskosinusse in Gl. (72) nicht bezogen auf die hexagonalen Achsen des Kristalls sondern auf das orthogonale Achsensystem  $x, y, z$ . Gl. (72) ist nur gültig für Kristalle, für die die hexagonale  $c$ -Achse (gleich der orthogonalen  $z$ -Achse) die leichte Achse ist. Wenn die Magnetostruktion in Richtung der Magnetisierung gemessen wird  $\alpha_i = \beta_i$ , reduziert sich Gl. (72) zu einem Zweikonstantenausdruck

$$\begin{aligned} \lambda_{\parallel} &= \lambda_A \left[ (1 - \alpha_3^2)^2 - (1 - \alpha_3^2)\alpha_3^2 \right] + 4\lambda_D (1 - \alpha_3^2)\alpha_3^2 \\ &= \lambda_A (\sin^4 \theta - \sin^2 \theta \cos^2 \theta) + 4\lambda_D \sin^2 \theta \cos^2 \theta, \end{aligned} \quad (77)$$

da  $\sum_i \alpha_i^2 = 1$  ist.  $\theta$  ist der Winkel bezüglich der  $c$  Achsen des hexagonalen Kristalls. Analog zur magnetokristallinen Anisotropie in Gl. (18) zeigt der Ausdruck Gl. (77) zylindrische statt hexagonale Symmetrie. Die Azimutwinkel  $\phi$  kommt in der Gleichung nicht vor. Diese treten erst in höherer Ordnung auf. Die Konstanten  $\lambda_A, \lambda_B, \lambda_C, \lambda_D$  sind in Tabelle

(6) aufgelistet. Liegt die Magnetisierung entlang der  $c$ -Achse des Kristalls, so sehen wir aus Gl. (77) direkt, daß die Magnetostraktion in dieser Richtung definitionsgemäß Null ist. Die Kontraktion ist maximal bei einem Winkel von  $\theta = 60^\circ$  und viel größer als in der Grundebene des hexagonalen Kristalls  $\theta = 90^\circ$ .

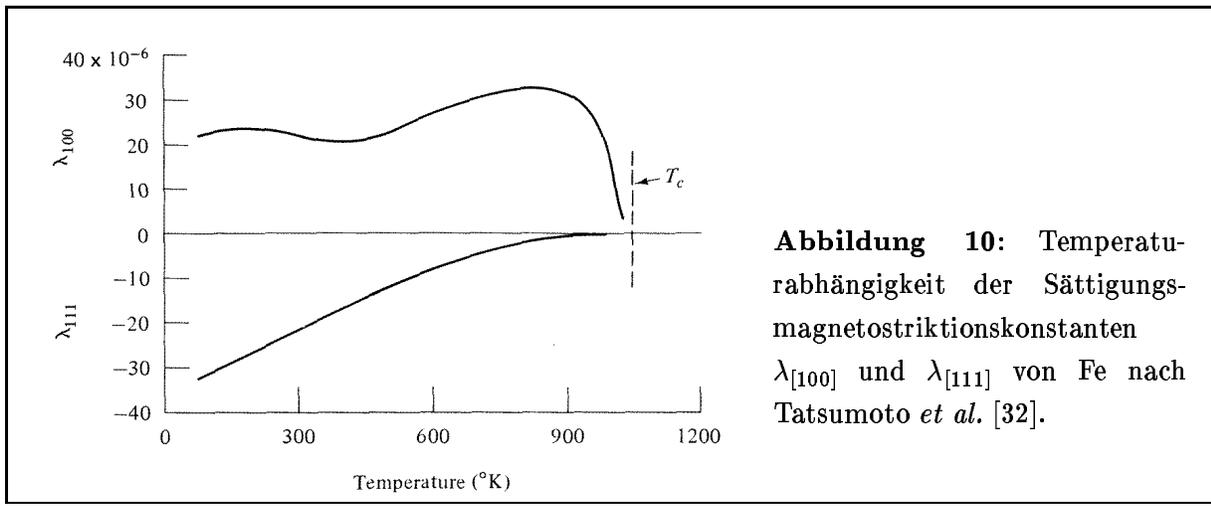
Betrachten wir zum Abschluß dieses Kapitels kurz die Magnetostruktionskonstanten in Tabelle (6). Man sieht, sie können positiv (Dilatation) und negativ (Kontraktion) sein und in einigen Legierungen sogar Null. Für Nickel sind  $\lambda_{[100]}$  und  $\lambda_{[111]}$  negativ und Nickel kontrahiert in allen 3 Raumrichtung wenn es magnetisiert wird. Liegt die Magnetisierung entlang der leichten Achse, dann ist die  $[111]$  Achse, in der die Magnetisierung liegt, etwas kürzer als die anderen 3 Diagonalen, und Nickel verzerrt von der kubischen Symmetrie zur rhomboedrischen. Verglichen mit Nickel finden wir bei Eisen einen Vorzeichenwechsel für  $\lambda_{[100]}$ , welches nun positiv ist und daher ist das Verhalten von Eisen sehr komplex. Liegt das Feld entlang der  $[100]$  Richtung, der leichten Achse von Eisen, ist die Verzerrung in dieser Richtung eine einfache Dilatation; der kubische Kristall verzerrt tetragonal. Beim Vergleich der Zahlenwerte fällt auf, daß die Magnetostruktionskonstanten von Kobalt deutlich größer als die von Eisen oder Nickel sind. Da die Magnetostruktion und die Kristallanisotropie eine Folge der Spin-Bahn-Kopplung sind, erwarten wir eine Korrelation von beiden. In der Tat ist ein großer numerischer Wert der Anisotropiekonstanten  $|K|$  verknüpft mit einem großen numerischen Wert von  $\lambda$ . Typischerweise haben hexagonale Kristalle große  $|K|$  und große  $|\lambda|$ . Auch den Vorzeichenwechsel von Eisen in bezug auf Nickel kann man als Funktion der Bandfüllung im Rahmen eine mikroskopischen Theorie [31] verstehen. Eine befriedigende Theorie der Magnetostruktion, welche es erlaubt, die Magnetostruktionskonstanten der verschiedenen ferromagnetischen Stoffe grundsätzlich, d.h. ganz ohne anpaßbare Parameter, zu berechnen, existiert bis heute noch nicht; jüngste Arbeiten aus der aktuellen Forschung (siehe Kap. (3.8)) beweis aber auf große Fortschritte hin. Die Konstanten müssen daher experimentell bestimmt werden.

Zum Abschluß dieses Kapitels sei noch gesagt, daß alle Materialkonstanten  $c(T)$ ,  $B(T)$ , und  $\lambda(T)$  Funktionen der Temperatur sind. Der Absolutbetrag der Magnetostruktionskonstanten nimmt gewöhnlicherweise mit zunehmender Temperatur ab und wird bei der Curie Temperatur Null (siehe Abb. 10).

### 3.6 Einfluß äußerer mechanischer Spannungen

Da die Energie des Kristalles nach Gl. (40) von der Deformation abhängt, muß sie auch von äußeren mechanischen Spannungen beeinflussbar sein, die ja mit den Dehnungen  $\varepsilon_{ij}$  über das Hooke'sche Gesetz verbunden sind. Die Energiedichte eines durch äußere Spannungen elastisch verzerrten Kristalls lautet

$$F_\sigma = - \sum_{i,j} \sigma_{ij} \varepsilon_{i,j}, \quad (78)$$



wobei  $\sigma_{ij}$  die Komponenten des Spannungstensors sind. Fügt man diesen Term zur freien Energie Gl. (50) hinzu, berechnet wieder die Gleichgewichtsdehnungen und setzt diese in  $F_{\text{magn-el.}}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\varepsilon}) + F_{\text{el.}}(\boldsymbol{\varepsilon})$  ein, so erhält man unter Berücksichtigung der Ausdrücke Gl. (64) für die von äußeren Spannungen herrührende Anisotropiedichte im kubischen Kristall

$$G_{\sigma}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\sigma}) = -\frac{3}{2}\lambda_{[100]}(\sigma_{11}\alpha_1^2 + \sigma_{22}\alpha_2^2 + \sigma_{33}\alpha_3^2 - \frac{1}{3}) - 3\lambda_{[111]}(\sigma_{12}\alpha_1\alpha_2 + \sigma_{23}\alpha_2\alpha_3 + \sigma_{31}\alpha_3\alpha_1). \quad (79)$$

$G_{\sigma}$  wird häufig die Spannungsanisotropieenergiedichte genannt. Liegt eine homogene Spannung  $\sigma$  in Richtung  $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$  bezüglich der kubischen Achsen vor, dann kann  $\sigma_{ij}$  durch  $\sigma\gamma_i\gamma_j$  ersetzt werden, und aus Gl. (79) wird

$$G_{\sigma}(\widehat{\mathbf{M}}, \boldsymbol{\sigma}) = -\frac{3}{2}\lambda_{[100]}\sigma(\gamma_1^2\alpha_1^2 + \gamma_2^2\alpha_2^2 + \gamma_3^2\alpha_3^2 - \frac{1}{3}) - 3\lambda_{[111]}\sigma(\gamma_1\gamma_2\alpha_1\alpha_2 + \gamma_2\gamma_3\alpha_2\alpha_3 + \gamma_3\gamma_1\alpha_3\alpha_1). \quad (80)$$

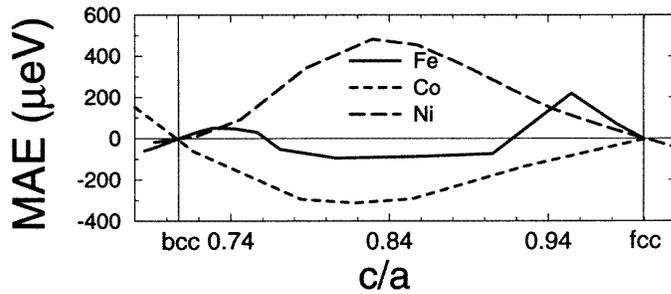
$\sigma > 0$  bedeutet Zugspannung,  $\sigma < 0$  stellt eine Druckspannung dar. Setzen wir vereinfachend  $\lambda_{\infty} = \lambda_{[100]} = \lambda_{[111]}$  (isotrope Magnetostruktion), so ergibt sich aus Gl. (80)

$$G_{\sigma,\theta} = -\frac{3}{2}\lambda_{\infty}\sigma\left(\cos^2\theta - \frac{1}{3}\right), \quad (81)$$

worin  $\theta$  den Winkel zwischen Magnetisierungs- und Spannungsrichtung bedeutet mit  $\cos\theta = \sum_i \gamma_i\sigma_i$ .

### 3.7 Anmerkung: Ultradünne Filme und Oberflächen

Formal betrachtet läuft die Ableitung der magnetoelastischen Kopplungskonstante und der Magnetostruktion von dünnen Filmen und Oberflächen genau wie bei den Volumensystemen, aber die elastischen und magnetoelastischen Konstanten hängen ab von der



**Abbildung 11:** Berechnete magnetokristalline Anisotropieenergie (pro Atom) von tetragonalem, in  $[001]$  Richtung verzerrtem, Fe, Co, Ni als Funktion des  $c/a$ -Verhältnisses, aus Ref. [33].  $c$  bezeichnet den Gitterparameter in Richtung der Verzerrung,  $a$  den Gitterparameter in der Grundebene normal zur Richtung der Verzerrung. Für die  $c/a$  Verhältnisse  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  und 1 liegt für die Atome kubische Symmetrie vor. In diesem Fall ist die MAE von 4. Ordnung und betragsmäßig so klein, daß sie auf der verwendeten Skala nicht mehr dargestellt werden kann. In tetragonaler Symmetrie ist die MAE nur 2. Ordnung und daher vergleichsweise riesig.

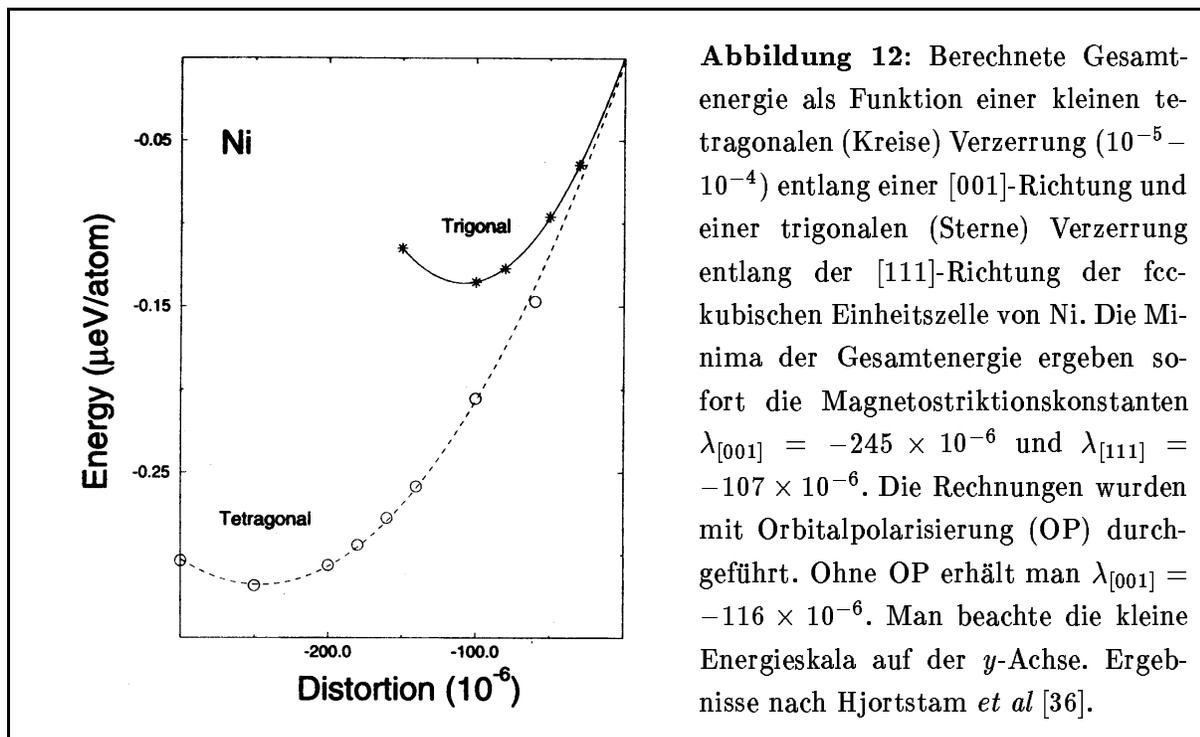
Natur des Atoms in Film oder Substrat. In Anlehnung an die Dekomposition von Néel für die Anisotropiekonstanten, Gl. (31), zeigen jüngste Experimente [34], daß es sinnvoll erscheint, die magnetoelastischen Kopplungskonstanten ebenfalls als Summe eines Volumen- und Oberflächentermes darzustellen

$$B^{\text{eff}} = B^V + 2B^S/t. \quad (82)$$

### 3.8 Anmerkung: Ab-initio Resultate

In den letzten Jahren haben einige Gruppen [35, 36, 37] begonnen, die Spin-Bahn-Wechselwirkung (siehe auch Kapitel (5.1)) in Elektronenstrukturalgorithmen zu implementieren, die ohne eine Näherung in der Form der Elektronenladungsdichte oder Potential auskommen. Mit solchen Verfahren ist es dann möglich  $E(\Delta\mathbf{x}, \widehat{\mathbf{M}})$  für eine gegebene Richtung  $\widehat{\mathbf{M}}$  entlang einer Kristallrichtung  $\hat{\mathbf{x}}$  zu berechnen und direkt (i) die magnetokristalline Anisotropie als Funktion der Verzerrung zu berechnen und damit magnetoelastische Konstanten zu bestimmen; und (ii) umgekehrt die Gesamtenergie  $E$  entlang einer Kristallrichtung  $\hat{\mathbf{x}}$  zu minimieren und so direkt die Gleichgewichtsdehnung  $\epsilon^\circ(\widehat{\mathbf{M}})$  beziehungsweise die Magnetostruktionskonstante zu bestimmen.

Vorgehensweise (i) hat Shick *et al.* [37] benutzt um die riesenoberflächenmagnetoelastische Konstante  $B_1^S$  von Co/Cu(100) zu bestimmen. Hjortstam [33] hat die magnetokristalline



**Abbildung 12:** Berechnete Gesamtenergie als Funktion einer kleinen tetragonalen (Kreise) Verzerrung ( $10^{-5}$  –  $10^{-4}$ ) entlang einer  $[001]$ -Richtung und einer trigonalen (Sterne) Verzerrung entlang der  $[111]$ -Richtung der fcc-kubischen Einheitszelle von Ni. Die Minima der Gesamtenergie ergeben sofort die Magnetostruktionskonstanten  $\lambda_{[001]} = -245 \times 10^{-6}$  und  $\lambda_{[111]} = -107 \times 10^{-6}$ . Die Rechnungen wurden mit Orbitalpolarisierung (OP) durchgeführt. Ohne OP erhält man  $\lambda_{[001]} = -116 \times 10^{-6}$ . Man beachte die kleine Energieskala auf der  $y$ -Achse. Ergebnisse nach Hjortstam *et al* [36].

Anisotropieenergie für eine tetragonale Verzerrung von einer bcc Kristallstruktur entlang einer  $[100]$ -Achse zu einer fcc-Struktur als Funktion des  $c/a$ -Verhältnisses für Fe, Co, und Ni berechnet (siehe Abb. (11)) und das unterschiedliche Verhalten auf der Basis der elektronischen Struktur erklärt. Auf der Basis dieser Ergebnisse konnte unter Ausnutzung von Gl. (69) und der Berechnung der elastischen Konstanten  $c_{11}$  und  $c_{12}$ ,  $\lambda_{[100]}$  für bcc Fe, fcc Co und fcc Ni bestimmt werden. Für Fe wurde  $\lambda_{[100]} = 170 \times 10^{-6}$  und für Ni  $\lambda_{[100]} = -268 \times 10^{-6}$  berechnet. Obwohl die Zahlenwerte noch um Faktoren 3-7 von den experimentellen Werten (Tab. (6)) entfernt sind, wird der Vorzeichenwechsel von Eisen nach Nickel sehr wohl reproduziert.

Vorgehensweise (ii) wurde von Hjortstam *et al.* für bulk Ni [36] erprobt, indem einmal für  $\mathbf{x} \parallel \widehat{\mathbf{M}} \parallel [100]$  und einmal entlang der  $[111]$  Richtung die Energie minimiert wurde. Die Ergebnisse sind in Abb. 12 dargestellt. Man erhält für  $\lambda_{[001]} = -245 \times 10^{-6}$  und  $\lambda_{[111]} = -107 \times 10^{-6}$ . Verglichen zu Tieftemperaturexperimenten, die zu den Ergebnissen  $\lambda_{[001]} = -(73 \pm 3) \times 10^{-6}$  und  $\lambda_{[111]} = -(39 \pm 3) \times 10^{-6}$  gelangen, ist die Abweichung zwischen Theorie und Experiment für beide Fälle ein Faktor 3. Wenn man beachtet, mit welcher kleinen Energien man es hier zu tun hat, ist dieses Ergebnis ein beachtlicher Fortschritt, wenn auch nicht die letzte Antwort.

## 4 Anisotropie durch dipolare Wechselwirkung

Bisher haben wir phänomenologische Gleichungen hingeschrieben, die in der Lage sind, die experimentellen Ergebnisse zu beschreiben. Ein mikroskopisches Verständnis liefern sie nicht. Vielmehr sollte man durch ein Verständnis der mikroskopischen Wechselwirkung in der Lage sein, die unterschiedlichen Konstanten zu berechnen. In diesem Kapitel behandeln wir die dipolare Wechselwirkung als eine mögliche Ursache der magnetischen Anisotropie.

In itineranten Ferromagneten wie Fe, Co, und Ni ist das magnetische Moment nicht lokalisiert am Ort des Atoms, sondern wir betrachten die lokale Magnetisierungsdichte  $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ . Jansen [39] (siehe auch Gl. (109) in Kapitel (refSO-WW)) hat die Dipol-Dipol-Wechselwirkung aus der relativistischen Beschreibung des Vielelektronenproblems abgeleitet, das der eigentliche Startpunkt für die Beschreibung dieses Problems darstellt. Der Ausdruck des Hamiltonoperators der dipolaren Wechselwirkung ist

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{dip.}} &= \frac{\mu_B^2}{2} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \\ &\times \left( \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r}') - 3 \frac{[(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r})][(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r}')]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \right), \end{aligned} \quad (83)$$

wobei  $\hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r})$  der Operator der Magnetisierungsdichte ist, ausgedrückt in Einheiten von  $\mu_B$  pro Einheitsvolumen. Dieses Resultat läßt sich interpretieren als Wechselwirkung zwischen der Magnetisierungsdichte und dem Dipolfeld, erzeugt durch die Magnetisierung des gesamten Magneten. Es ist ein Vielteilchenhamiltonoperator der in der Hartree Näherung gelöst wird. In diesem Falle ersetzen wir den Operator  $\hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r})$  durch dessen Erwartungswert  $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ . Daß die dipolare Wechselwirkung, wie die in Kapitel 5.1 beschriebene Spin-Bahn-Kopplung, ein relativistischer Effekt ist, sieht man daran, daß  $\mu_B^2 \propto 1/c^2$  ist. In dieser Notation enthält  $\mathbf{m}(\mathbf{r})$  das magnetische Spin- und Bahnmoment. Im allgemeinen ist die Magnetisierungsdichte im Festkörper um die Atome konzentriert aber nicht notwendigerweise sphärisch. Wünscht man die nichtspärischen Beiträge zu berücksichtigen, kann man eine Multipolentwicklung der Magnetisierungsdichte um ein Atom durchführen, mit den Multipolmomenten  $\mathbf{m}_{\ell,m} = \int r^\ell Y_{\ell,m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \mathbf{m}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ . Für Übergangsmetalle ist die Magnetisierungsverteilung nahezu sphärisch und wir können in guter Näherung  $\mathbf{m}(\mathbf{r})$  durch das Multipolmoment  $\ell = 0$  ersetzen. Der interatomare Beitrag zu Gl. (83) durch das Multipolmoment  $\ell = 0$ ,  $\mathbf{m}_{00} = (4\pi)^{-1/2} \mathbf{m}_\tau$  ist dann

$$E_{\text{dip.}}^0 = \frac{\mu_B^2}{2} \sum'_{\mathbf{R}, \tau, \tau'} \frac{1}{|\mathbf{R} + \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}'|^3} \left( \mathbf{m}_\tau \cdot \mathbf{m}_{\tau'} - 3 \frac{[(\mathbf{R} + \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}') \cdot \mathbf{m}_\tau][(\mathbf{R} + \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}') \cdot \mathbf{m}_{\tau'}]}{|\mathbf{R} + \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}'|^2} \right), \quad (84)$$

worin  $\tau$  die Atompositionen in der Einheitszelle beschreibt,  $\mathbf{m}_\tau$  das lokale magnetische Moment am Ort des Atoms  $\tau$ , und  $\mathbf{R}$  die Gittervektoren durchläuft. Berücksichtigen wir noch, daß für einen Ferromagneten die Austauschwechselwirkung die dominierende

Wechselwirkung ist, und daher die magnetischen Momente parallel stehen, kann man  $E_{\text{dip.}}^0$  vereinfachen zu

$$E_{\text{dip.}}^0 = \frac{\mu_B^2}{2} \sum_{i,j}' \frac{m_i m_j}{R_{ij}^3} (1 - 3 \cos^2 \theta_{ij}), \quad (85)$$

wobei  $\theta$  der Winkel zwischen der Richtung des magnetischen Moments  $\mathbf{m}_i$  und der Richtung des Differenzvektors  $\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$  zwischen den Atomen  $i$  und  $j$  ist. Der Ausdruck zeigt ziemlich klar, daß die Dipol-Dipol-Wechselwirkung zur magnetischen Anisotropie beiträgt. Für ein herausgegriffenes Atompaar  $(i, j)$  wird der Ausdruck  $(1 - 3 \cos^2 \theta_{ij})$  in Gl. (85) dann minimal, wenn die Richtung von  $m_i$  parallel zu  $\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$  ist. Damit verknüpft die Dipolwechselwirkung die Magnetisierungsrichtung mit den kristallographischen Achsen.

Um die Orientierungsabhängigkeit der Anisotropie als Folge der magnetostatischen Dipol-Dipol-Wechselwirkung relativ zum Kristallgitter leichter zu sehen, schreiben wir Gl. (84)

$$E_{\text{dip.}}^0 = \frac{\mu_B^2}{2} \sum_{\tau, \tau'}' m_\tau m_{\tau'} \widehat{\mathbf{M}}_\tau \mathbf{S}_{\tau, \tau'} \widehat{\mathbf{M}}_{\tau'}, \quad (86)$$

wobei  $\mathbf{m} = m \widehat{\mathbf{M}}$ .  $\mathbf{S}_{\tau, \tau'}$  ist ein Tensor zweiter Stufe, der sich trivialerweise aus Gl. (84) ergibt und nur von der Struktur und den Positionen der Atome abhängt. Der Tensor ist symmetrisch, und es gilt  $\text{Spur}(\mathbf{S}_{\tau, \tau'}) = 0$ . Von diesem Tensor kann man die Kristallstruktur abspalten in der Form  $\mathbf{S}_{\tau, \tau'} = S_{\tau, \tau'} \mathbf{S}$ . Für die Geometrie eines unendlich ausgedehnten, zweidimensionalen, (100) oder (111) orientierten Filmes in den Kristallstrukturen sc, bcc, und fcc ist  $S_{ij} = 0$  für  $i \neq j$  und  $S_{11} = S_{22} = -1/2 \cdot S_{33} = -1/2$ , mit der typischen Konvention, daß die  $\hat{\mathbf{x}}_1$  und  $\hat{\mathbf{x}}_2$  in der Ebene liegen. Gehen wir wieder von einer ferromagnetischen Probe aus und von unserem Standardausdruck für den Richtungsvektor  $\widehat{\mathbf{M}} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ , erhalten wir sofort

$$\widehat{\mathbf{M}} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \widehat{\mathbf{M}} = \frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2}. \quad (87)$$

Dies impliziert direkt, daß man für einen ultradünnen Film oder Schichtsystem mit tetragonaler oder hexagonaler Symmetrie eine uniaxiale Anisotropie der Form

$$\Delta E_{\text{dip.}}^0 = (E_{\text{dip.}}^{\parallel} - E_{\text{dip.}}^{\perp}) \sin^2 \theta = K_1 \sin^2 \theta \quad (88)$$

als Orientierungsabhängigkeit der Dipol-Dipol-Wechselwirkung erhält. Dies entspricht genau den Termen, die wir in Gl. (20) für die Volumenanisotropie und Gl. (28) und Gl. (30) für die Oberflächenanisotropie abgeleitet haben. Wir erwarten damit, daß die magnetostatische Dipolwechselwirkung zu Volumen- und Oberflächenanisotropie dünner Filme Beiträge liefert.

Die Berechnung der Dipolenergie ist nicht einfach. Wegen der langen Reichweite der magnetischen Dipol-Dipol Wechselwirkung, hängt der Erwartungswert von Gl. (83) von der Form der Probe ab, und dies führt zur Formanisotropie. Die diskrete Dipolsumme in

Gl. (84), welche in 3-Dimensionen nur bedingt konvergent ist, kann mittels der Technik von Ewald [41] aufsummiert werden, in dem die Summation teilweise im Ortsraum und teilweise im Impulsraum durchgeföhrt wird.

## 4.1 Formanisotropie

Eine der wichtigsten Eigenschaften der Dipolwechselwirkung ist, daß die Wechselwirkungsstärke zwischen Dipolen nur  $\propto 1/R_{ij}^3$  mit dem Abstand  $R_{ij}$  abnimmt und die Summe über Paare  $(i, j)$  nur sehr langsam konvergiert. Folglich spürt der Dipol  $i$  ein magnetisches Dipolfeld  $\mathbf{H}_{\text{dip.}}(i)$ , das erheblich von der Verteilung der Dipolmomente am Rande der Probe abhängt. Dies führt zur Formanisotropie.

Als ersten Schritt zur Berechnung der Formanisotropie machen wir einen *Kontinuumsansatz* für die Verteilung der lokalen magnetischen Momente  $\mathbf{m}_\tau \rightarrow \mathbf{M}(\mathbf{r})$ , denn bei makroskopischen Reichweiten kann es nicht auf mikroskopische Details ankommen. Das daraus resultierende magnetische Dipolfeld nennt man das Streufeld  $\mathbf{H}_s$  oder im probeninneren Entmagnetisierungsfeld  $\mathbf{H}_d$ <sup>7</sup> und stellt eine Näherung von  $\mathbf{H}_{\text{dip.}}$  da. Wir haben ein Feld magnetischer Dipole  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ , aber keine externen Ströme die es erzeugen. Deshalb genügt  $\mathbf{H}_d$  den stromlosen Maxwell'schen Gleichungen:

$$\text{rot } \mathbf{H}_d = \mathbf{0} \quad (89)$$

$$\text{div } \mathbf{H}_d = -\text{div } \mathbf{M}. \quad (90)$$

Dies sind die Grundgleichungen der *Magnetostatik*. Wegen  $\text{rot } \mathbf{H}_d = \mathbf{0}$  können wir ein skalares *magnetisches Potential* definieren und die zwei Maxwell-Gleichungen wie folgt umschreiben

$$\Delta \Phi_d = \text{div } \mathbf{M} \quad \text{mit} \quad \mathbf{H}_d = -\nabla \Phi_d. \quad (91)$$

Die Lösung der Poissongleichung ist aus der Elektrostatik bekannt, und wir erhalten

$$\Phi_d = -\frac{1}{4\pi} \int_V \frac{\text{div } \mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \frac{1}{4\pi} \int_{S(V)} \frac{\mathbf{M}_V \cdot \hat{\mathbf{n}}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^2 r'. \quad (92)$$

Für die homogene Probe ist  $\mathbf{M} = \mathbf{M}_V$  über das Volumen  $V$  konstant, und daher liefert das Integral Gl. (92) nur Beiträge an der Oberfläche des magnetisierten Mediums, und dort springt  $M$  auf Null. Daher bekommt man, wie aus der Elektrostatik bekannt,

$$\Phi_d = \frac{1}{4\pi} \int_{S(V)} \frac{\mathbf{M}_V \cdot \hat{\mathbf{n}}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^2 r', \quad (93)$$

wobei  $\hat{\mathbf{n}}$  der nach außengerichtete Normaleneinheitsvektor ist. Man interpretiert  $\mathbf{M}_V \cdot \hat{\mathbf{n}}$  in Gl. (93) als Belegung der Oberfläche  $S$  mit magnetischen Dipolen, den magnetischen Polen, die an den Oberflächen entstehen und die Quelle des Streufeldes sind. Für einen Körper mit beliebiger Form, hängt das Entmagnetisierungsfeld explizit von der Position  $\mathbf{r}$

<sup>7</sup>Der Index  $d$  von  $\mathbf{H}_d$  leitet sich aus dem englischen Wort *demagnetization* ab.

ab, obwohl die Magnetisierungsdichte konstant ist. Nimmt der Körper allerdings die Form eines Ellipsoiden mit den drei Hauptachsen  $a$ ,  $b$  und  $c$  an, wird  $\mathbf{H}_d$  eine ortsunabhängige Konstante. Dann drückt man die Proportionalität zwischen  $\mathbf{H}_d$  und  $\mathbf{M}$  gewöhnlicherweise durch den Entmagnetisierungstensor  $\mathbf{N}$  aus,

$$\mathbf{H}_d = -4\pi \mathbf{N} \mathbf{M}_V, \quad (94)$$

der sich streng aus Gl. (93) berechnen läßt. Die wichtigste Eigenschaft des Entmagnetisierungstensors ist, daß die

$$\text{Spur}(\mathbf{N}) = 1 \quad (95)$$

ist. Aus Symmetriegründen kann man für die Kugel ( $a = b = c$ ) und die zweidimensionale Platte unendlicher Ausdehnung ( $a = b = \infty$ ) als Grenzfälle des Ellipsoiden den Demagnetisierungstensor direkt ableiten,

$$\mathbf{N}_{\text{Kugel}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{N}_{\text{Platte}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (96)$$

Wie wir sehen, hängt in der Kontinuumsnäherung mit konstanter Magnetisierung das Entmagnetisierungsfeld nur von der Dipolladungsdichte an der Oberfläche der Probe und damit von der Form der Probe ab. Schreiben wir die  $E_{\text{dip.}}^0$  von Gl. (84) in der Kontinuumsnäherung und ersetzen das magnetische Dipolfeld durch das Entmagnetisierungsfeld, so ist die Energiedichte der Probe in ihrem eigenen Streufeld (magnetostatische Selbstwechselwirkung) gerade die Energiedichte für die Formanisotropie im Volumen

$$G_{\text{Form.}}^V = -\frac{1}{2} \int_V \mathbf{M}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}_d(\mathbf{r}) dV. \quad (97)$$

Ersetzt man in Gl. (97)  $\mathbf{H}_d$  durch Gl. (94) erhält man für die Formanisotropie pro Volumeneinheit

$$G_{\text{Form.}}^V = 2\pi \mathbf{M}_V \cdot \mathbf{N} \cdot \mathbf{M}_V. \quad (98)$$

Oder anders ausgedrückt, Anisotropien dieses Typs nennt man Formanisotropie. Außer im Fall der Kugel ist die Energie anisotrop, d.h. hängt von der Richtung der Magnetisierung ab. In kleinen Teilchen oder dünnen Filmen sind sie ein wichtiger Faktor für die Bestimmung der Magnetisierungsrichtung. Wenn man  $\mathbf{N}$  auf die Hauptachsen des Ellipsoiden transformiert sieht man daß  $G_{\text{Form.}} > 0$  strikt positiv ist. Eine Konsequenz dieser Tatsache ist, daß ein Volumenmagnet in Abwesenheit eines angelegten magnetischen Feldes, dazu tendiert nicht magnetisch zu sein und daß die Magnetisierung in Gebiete entgegengesetzter Magnetisierung zerfällt, d.h. in magnetische Domänen, und insgesamt wird der magnetische Körper entmagnetisiert. Die Berechnung der magnetostatischen Energie eines entmagnetisierten Körpers ist nicht trivial.

Das Beispiel der unendlich ausgedehnten Platte ist anwendbar auf die ultradünnen magnetischen Filme und magnetischen Schichtsysteme. Schreiben wir  $\mathbf{M}_V = M_V \widehat{\mathbf{M}}$  erhalten wir mit der üblichen Definition der Richtungsvektoren  $\widehat{\mathbf{M}}$  für die Formanisotropie

**Tabelle 7:** Volumenformanisotropiekonstanten  $K_{\text{Form.}}^V$  von Fe, Co, Ni.

	Fe (bcc)	Co (hcp)	Ni (fcc)
[erg/cm <sup>3</sup> ]	$1.92 \times 10^7$	$1.34 \times 10^7$	$1.73 \times 10^6$
[meV/atom]	$1.41 \times 10^{-4}$	$9.31 \times 10^{-5}$	$1.28 \times 10^{-5}$

im Volumen

$$G_{\text{Form.}}^V(\widehat{\mathbf{M}}) = 2\pi M_V^2 \cos^2 \theta = K_{\text{Form.}}^V \sin^2 \theta \quad \text{mit} \quad K_{\text{Form.}}^V = -2\pi M_V^2 \quad (99)$$

worin  $\theta$ , wie in Abb. (2) beschrieben, der Winkel zwischen der Filmnormalen und der Richtung der Magnetisierung ist. Da  $K_{\text{Form.}}^V \leq 0$ , favorisiert die Formanisotropie stets die Magnetisierungsrichtung in der Filmebene. Für Fe, Co, und Ni sind die Werte von  $K_{\text{Form.}}^V$  (Tab. (7)) als die magnetokristallinen Volumenanisotropiekonstanten (vergleiche Tab. (3)), so daß bei genügend dicken Filmen die Formanisotropie stets gegenüber der magnetokristallinen Volumenanisotropie und Oberflächenanisotropie dominiert, und die Magnetisierung liegt in der Ebene. Dies erklärt die negative Steigung in Abb. (5).

#### Kritik:

(i) *Kontinuumsnäherung:* Die Kontinuumsnäherung ist natürlich nicht die exakte Lösung. Sie sollte exzellent sein in einem Gebiet außerhalb einer Kugel mit dem Radius  $R > R_c$  um einen gegebenen Dipol  $i$ , innerhalb dessen sollte die diskrete Gitterstruktur benutzt werden. Das Feld innerhalb der Kugel nennt man das Hohlraumfeld  $\mathbf{H}_{\text{cav.}}$ . Der Hohlraum hat natürlich auch ein Entmagnetisierungsfeld, das man Lorenzfeld  $\mathbf{H}_L$  nennt und bei konstanter Magnetisierung ist  $\mathbf{H}_L = (4\pi/3)\mathbf{M}$ .  $\mathbf{H}_{\text{dip.}} = \mathbf{H}_{\text{cav.}} + \mathbf{H}_L + \mathbf{H}_d$  ist die exakte Bestimmung des Dipolfeldes.  $\mathbf{H}_{\text{cav.}} + \mathbf{H}_L$  konvergieren sehr schnell ( $\propto 1/R^5$ ).  $\mathbf{H}_{\text{cav.}} + \mathbf{H}_L$  liefern keinen Beitrag zur Formanisotropie, sondern zur magnetokristallinen Anisotropie und wird im folgenden Kapitel (4.2) behandelt.

(ii) *Oberflächenformanisotropie:* Nahe einer Oberfläche oder Grenzfläche sollte das Feld der lokalen magnetischen Momente  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$  vom Volumenwert abweichen, entweder durch die an vielen Oberflächen beobachtete Erhöhung der lokalen magnetischen Momente, oder deren Verkleinerung in Kontakt mit dem Substrat, oder durch kleine induzierte magnetische Momente im Substrat, dann ebenfalls durch  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$  beschrieben werden. Dies führt zum Oberflächenterm der Formanisotropie  $K_{\text{Form.}}^S$ . Der Oberflächen- und Grenzflächenbeitrag zur Formanisotropie läßt sich leicht berechnen, wenn man berücksichtigt, daß weiterhin der Demagnetisierungstensor der zweidimensionalen Platte benutzt werden kann. Betrachten wir in unserem Kontinuumsansatz eine infinitesimale Scheibe parallel

zur Grenzfläche. In diesem Falle erhält man normiert auf die Flächeneinheit

$$G_{\text{Form.}}^S(\widehat{\mathbf{M}}) = K_{\text{Form.}}^S \sin^2 \theta \quad (100)$$

mit

$$\begin{aligned} K_{\text{Form.}}^S &= -2\pi \left( \int_{\text{Film}} [M^2(z) - M_V^2] dz + \int_{\text{Vak.,Subs.}} M^2(z) dz \right) \\ &\approx -4\pi M_S M_V, \end{aligned} \quad (101)$$

wobei sich das Integrationsintervall des ersten Integrals über das innere des Films erstreckt und das zweite Integral die Magnetisierung im Vakuum der Oberfläche oder die induzierte Magnetisierung im Substrat. Die effektive Oberflächen- oder Grenzflächenmagnetisierung  $M_S$  berechnet sich zu

$$M_S = \int_{\text{Film}} [M(z) - M_V] dz + \int_{\text{Vak.,Subs.}} M(z) dz. \quad (102)$$

Mittels parameterfreien Elektronenstrukturrechnungen können direkt die lagenabhängigen Magnetisierungsdichten und folglich der Betrag der Oberflächenformanisotropie berechnet werden. Für Eisen z.B. sind die magnetischen Momente an der Fe(100) Oberfläche erhöht, und man erhält ein  $K_{\text{Form.}}^S = -0.27 \text{ erg/cm}^2$ . Für Eisen an der Grenzfläche zu Ag(001) ist die Erhöhung der magnetischen Momente etwas kleiner und man erhält ein  $K_{\text{Form.}}^S = -0.12 \text{ erg/cm}^2$ . Für die Ni(100) Oberfläche z.B. erhält man ein  $K_{\text{Form.}}^S = -0.017 \text{ erg/cm}^2$  und für die Ni/Cu(100) Grenzfläche einen Wert von  $K_{\text{Form.}}^S = 0.025 \text{ erg/cm}^2$ , wo die magnetischen Momente von Nickel reduziert werden. Diese Beispiele zeigen, daß die Werte, wenn verglichen mit den experimentellen Werten in Kapitel (2.4), zwar nicht ganz vernachlässigbar sind, aber dass die Oberflächenformanisotropie kein physikbestimmender Faktor ist und nur zu einem sehr kleinen Betrag zur Gesamtoberflächenanisotropie beiträgt. Auf keinen Fall ist die Oberflächenformanisotropie für die senkrechte Magnetisierung ultradünner Filme oder Schichtsysteme verantwortlich.

(iii) *Ultradünne Filme und Schichtsysteme:* Wenn die Dicke eines ferromagnetischen Filmes nur noch wenige Atomlagen beträgt, bricht die Kontinuumsnäherung natürlich zusammen. Dieses Problem wurde von Draaisma *et al.* [42] im Detail untersucht in dem die Dipol-Dipol-Wechselwirkung auf dem Gitter berechnet wurde und dann mit der Kontinuumslösung verglichen wurde. Interessanterweise konnte das Ergebniss nach der bekannten Dekomposition

$$K^{\text{eff}} = K^V + K^S/t \quad (103)$$

zerlegt werden, wobei  $K^V$  die Kontinuumslösung darstellt und  $K^S$  als Dipol-Dipol Beitrag zur Oberflächenanisotropie. Von der Natur der Anisotropie ist sie eine dipolare magnetokristalline Anisotropie und wird im folgenden Kapitel (4.2) behandelt.

## 4.2 Dipolare magnetokristalline Anisotropie

Wir betrachten nun den Beitrag der Dipolwechselwirkung zur magnetokristallinen Anisotropie. Beim Betrachten von Gl. (85) sieht man, daß die Energie der dipolaren Wechselwirkung nur Terme zweiter Ordnung in  $\mathbf{m}$  bzw.  $\widehat{\mathbf{M}}$  enthält. D.h. die dipolare Wechselwirkung in der Dipolnäherung kann auch nur zu Anisotropiekonstanten zweiter Ordnung beitragen. Für Kristalle mit hoher Symmetrie, z.B. kubische Symmetrie, für die Terme zweiter Ordnung verboten sind, gibt es keinen Beitrag durch die Dipol-Dipol-Wechselwirkung.

Beiträge für Kristalle hoher Symmetrie kommen von höheren Termen in der Multipolentwicklung. Der Beiträge höherer Multipolmomente  $\mathbf{m}_{\ell,m}$  zur magnetostatischen Energie werden einen Faktor  $\propto [(m_{\ell,m}/m_{00})(m_{\ell,m'}/m_{00})]$  kleiner sein als die Dipol-Dipol Energie Gl. (84). Das nächste nichtverschwindende Multipolmoment in kubischem Eisen oder Nickel ist ein Oktupolmoment ( $\ell = 4$ ) bzw. ein Quadrupolmoment ( $\ell = 2$ ) in uniaxialen Kobalt. Rechnungen mit modernen Methoden der Festkörperphysik zeigen, daß das Quadrupolmoment für Kobalt in der Größenordnung von  $m_{2m}/m_{00} \approx 10^{-4} a_0^2$  ( $a_0^2$  ist der Bohrsche Radius  $a_0^2 = 0.529 \text{ \AA}$ ) ist und das Oktupolmoment für Ni in der Größenordnung von  $m_{4m}/m_{00} \approx 10^{-2} a_0^4$  liegen. Diese kleinen Momente reflektieren die kleinen Abweichungen der Ladungsdichte in Kugeln um Atome im Volumen des kubischen oder hexagonalen Festkörpers von der sphärischen Symmetrie. Wir erwarten, daß die Beiträge zur magnetostatischen Energie durch diese Multipolmomente entsprechend dieser Abschätzungen kleiner sind, als der Wert der Dipolsumme in Gl. (84) und damit vollkommen vernachlässigbar.

Die Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung (siehe auch Kapitel 5.1), führt zu einer Anisotropie in der Magnetisierung und zu einer Abweichung  $\Delta\mathbf{m}$  der lokalen Richtung der Magnetisierung von der mittleren Magnetisierungsrichtung  $\langle \widehat{\mathbf{m}}_\tau \rangle$ , d.h.  $\Delta\mathbf{m}/\langle \mathbf{m}_\tau \rangle \neq \mathbf{0}$ . Die intraatomare magnetostatische Energie pro Atom ist in der Größenordnung  $E_{\text{dip.}}^{\text{intra}} = (m_\tau \mu_B)^2 / c^2 V^3$ . Mit  $m_\tau = |\mathbf{m}_\tau| = 1.7 \mu_B$  und  $V = 73.62 \text{ a.u.}^3$  erhält man  $30 \mu\text{eV}$  in Kobalt. Da die Magnetisierung mit dem Betrag  $\Delta m$  anisotrop ist, ist auch die intraatomare magnetostatische Energie anisotrop mit dem Betrag  $2(\Delta m/m)E_{\text{dip.}}^{\text{intra}}$ . Für Fe, Co, und Ni betragen die Anisotropie der magnetischen Momente  $(\Delta m/m)|_{\text{Fe}} = 7.8 \times 10^{-5}$ ,  $(\Delta m/m)|_{\text{Co}} = 4.5 \times 10^{-3}$  und  $(\Delta m/m)|_{\text{Ni}} = 18 \times 10^{-5}$  [43]. In Kobalt führt dies zu einem Beitrag von  $\approx 0.15 \mu\text{eV}$ , kleiner als 1% des experimentell gemessenen Wertes der Anisotropie. Für Eisen und Nickel führt dies ebenfalls zu einer winzigen Korrektur, die man vernachlässigen kann.

Für Systeme mit niedrigerer Symmetrie, wo Terme zweiter Ordnung in  $\widehat{\mathbf{M}}$  erlaubt sind, ist der Beitrag der Dipol-Dipol-Wechselwirkung zur magnetokristallinen Anisotropie im allgemeinen nicht Null. Für hexagonale Systeme haben wir gerade argumentiert ist die Dipol-Dipol-Wechselwirkung zur magnetokristallinen Anisotropie exakt Null. Dies gilt aber nur für das ideale  $c/a$ -Verhältnis von  $c/a = \sqrt{8/3} \simeq 1.633$ . Kobalt hat ein  $c/a$ -Verhältnis das  $-0.67\%$  vom Idealverhältnis abweicht ( $c/a \simeq 1.622$ ) und der Dipol-Dipol

**Tabelle 8:** Beitrag der dipolaren Wechselwirkung zu den magneto-elastischen Konstanten von Fe und Ni. Berechnete Werte nach Becker [22].

	Fe (bcc)	Ni (fcc)
$B_{1,\text{dip.}}$ [erg/cm <sup>3</sup> ]	$-7.3 \times 10^6$	$-5.0 \times 10^5$
[meV/atom]	$-5.4 \times 10^{-5}$	$-3.4 \times 10^{-6}$
$B_{2,\text{dip.}}$ [erg/cm <sup>3</sup> ]	$2.4 \times 10^6$	$1.7 \times 10^5$
[meV/atom]	$1.8 \times 10^{-5}$	$1.1 \times 10^{-6}$

Beitrag zu  $K_1^V$  beträgt  $K_{1,\text{dip}}^V = -0.4 \mu\text{eV} = 5.7 \times 10^4 \text{ erg/cm}^3$  [44]. Quantitativ ist dieser Beitrag zur Volumenanisotropie von Kobalt unbedeutend.

Im Kapitel 3 haben wir darauf hingewiesen, daß ein kubischer Kristall unter Deformation seine Symmetrie erniedrigen kann und somit auch Anisotropieterme zweiter Ordnung in  $\widehat{\mathbf{M}}$  möglich werden. Deshalb sollte die Dipol-Dipol-Wechselwirkung der magnetostatischen Energie einen Einfluß auf die magnetoelastischen Konstanten  $B_1$  und  $B_2$  kubischer Materialien haben. Rechnungen von Becker [22] ergeben

$$B_{1,\text{dip.}} = -3\alpha M_V^2 \quad \text{und} \quad B_{2,\text{dip.}} = \alpha M_V^2, \quad (104)$$

mit  $\alpha \approx 0.8$  für bcc und  $\alpha \approx 0.6$  für fcc Kristallgitter. Die entsprechenden Resultate für Eisen und Nickel sind in Tabelle (8) zusammengefaßt. Auch hier sind die Werte wieder erheblich kleiner als die experimentellen Werte in Tab. (5), so daß die magnetostatische Wechselwirkung nicht die mikroskopische Ursache der magnetoelastischen Konstanten sein kann.

In Kapitel 2.4 haben wir gesehen, daß aufgrund der Symmetrierniedrigung an Oberflächen kubischer Systeme Anisotropieterme zweiter Ordnung auftreten und die dipolare Wechselwirkung macht einen nichtverschwindenden Beitrag zur magnetokristallinen Oberflächenanisotropie aus. Der Ausdruck des dipolaren Beitrags zu  $K_1^S$  ist

$$K_{1,\text{dip.}}^S = -2\pi M_V^2 d k_s, \quad (105)$$

wobei  $d$  der Interlagenabstand zwischen den Ebenen der Atome normal zur Oberfläche ist und  $k_s$  ein dimensionsloser Parameter, der in Tabelle (9) für verschiedene Oberflächen aufgelistet wurde. Den größte Beitrag zur Oberflächenanisotropie erhält man für die Fe(100) Oberfläche:  $K_{1,\text{dip.}}^S = 0.06 \text{ erg/cm}^2 \approx 0.06 \text{ meV/atom}$ . Auch hier trägt die dipolare Wechselwirkung nur einen kleine Bruchteil zu der gemessenen kristallinen Oberflächenanisotropie bei.

Zusammenfassend können wir sagen, daß der Beitrag der magnetostatischen Wechselwirkung zur magnetoelastischen Anisotropie, magnetokristallinen Volumen- und Ober-

**Tabelle 9:** Berechnete Werte des dimensionslosen Parameters  $k_s$  der Betrag der dipolaren Beitrags zur Magnetokristallinen Oberflächenanisotropie bestimmt. Werte von Draaisma *et al.* [42].

system	sc (001)	fcc (001)	fcc (111)	bcc (001)	bcc (011)	hcp (0001)
$k_s$	0.039	-0.118	-0.034	-0.218	-0.038	-0.034

flächen Anisotropie vernachlässigbar sind und nicht deren Ursache sein können. Wichtig bleibt nur der dominierende Beitrag der Formanisotropie.

## 5 Beitrag der Spin-Bahn-Wechselwirkung zur Anisotropie

Wir haben in diesem Artikel einen weiten Weg von der Phänomenologie zur Magnetostatik zurückgelegt und diskutieren in diesem Abschnitt die Spin-Bahn Kopplung der Elektronen in einem Festkörper als mikroskopische Ursache der magnetokristallinen Anisotropie. Wir rekapitulieren am Anfang kurz die relativistische Quantenmechanik und diskutieren kurz die Spin-Bahn-Wechselwirkung und widmen uns dann mit wachsendem Schwierigkeitsgrad der Beschreibung der magnetischen Bahnmomente und der magnetokristallinen Anisotropie.

### 5.1 Die Spin-Bahn-Wechselwirkung

In der Einleitung haben wir den Heisenberg-Dirac Operator kennengelernt. In diesem Modell wird angenommen, daß die Elektronen um Atome lokalisiert sind und man deshalb einen Spinoperator mit einem Gitterpunkt assoziiert. Bei itineranten magnetischen Systemen ist dies nicht einfach möglich. Beim Magnetismus von Metallen handelt es sich um ein äußerst kompliziertes Vielteilchenproblem; die Coulombwechselwirkung zwischen Elektronen ist die Ursache des Magnetismus, Elektronen bewegen sich im Feld dieser Elektronen und erzeugen die Felder. Ausgangspunkt einer relativistischen Beschreibung *eines* Elektrons im Feld der anderen Elektronen ist die relativistische Dichtefunktionaltheorie in der Form des Einteilchen Dirac Operators

$$\mathcal{H}_D = c \boldsymbol{\alpha} \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + (\beta - I_4) mc^2 - eV I_4. \quad (106)$$

$V$  ist das effektive elektrostatische Potential in dem sich das Elektron bewegt, es enthält die Wechselwirkung mit dem externen Potential  $V_{\text{ext.}}$ , z.B. die Wechselwirkung mit den

Atomkernen  $\sum_{\tau} Z_{\tau} e / |\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\tau}|$  an den Orten  $\mathbf{R}_{\tau}$ , und dem Potential hervorgerufen durch die Elektron-Elektron Wechselwirkung  $V_{\text{el.-el.}}$ . Analog gilt für das Vektorpotential, daß  $\mathbf{A}$  ein effektives Potential ist, dessen Ursache externe Vektorfelder sein können (z.B. durch das Kerndipolmoment) und dessen Ursache auch Ströme sein können, die durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung erzeugt werden.

$$V([n, \mathbf{j}]|\mathbf{r}) = V_{\text{ext.}}(\mathbf{r}) + V_{\text{el.-el.}}([n, \mathbf{j}]|\mathbf{r}) \quad (107)$$

$$\mathbf{A}([n, \mathbf{j}]|\mathbf{r}) = \mathbf{A}_{\text{ext.}}(\mathbf{r}) + \mathbf{A}_{\text{el.-el.}}([n, \mathbf{j}]|\mathbf{r}). \quad (108)$$

Wegen der Elektron-Elektron-Wechselwirkung sind  $V$  und  $\mathbf{A}$  Funktionale der Teilchendichte  $n$  und des Elektronenstromes  $\mathbf{j}$ . Eine Lösung des Problems gibt es noch nicht. Jansen [38, 39, 40] hat Näherungen eingeführt, die die Behandlung des Problems im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie in der lokalen Dichtenäherung erlauben. Vernachlässigen wir die diamagnetischen Beiträge und die Ströme durch den Bahndrehimpuls, gelangen wir zum Kohn-Sham Dirac Operator, einem Dirac-artigen Einteilchenoperator, der nur noch den Spin enthält

$$\mathcal{H}_D = \mathcal{H}_{\text{dip.}} + c \boldsymbol{\alpha} \mathbf{p} + (\beta - I_4) mc^2 + \frac{e\hbar}{2mc} \beta \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} - eV I_4. \quad (109)$$

$\mathcal{H}_{\text{dip.}}$  ist der in Kapitel (4), Gl. (83), besprochene Hamiltonoperator der Dipol-Dipol-Wechselwirkung und die Ursache der Formanisotropie.  $\mathcal{H}_{\text{dip.}}$  wird im folgenden nicht weiter diskutiert.  $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$  und  $\beta$  sind die Dirac Matrizen,

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}, \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \quad (110)$$

die auf einen vierkomponentigen Spinor

$$\boldsymbol{\Psi}_i(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi_i(\mathbf{r}) \\ \chi_i(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (111)$$

angewendet werden.  $\boldsymbol{\Sigma}$  ist der Vektor der Paulimatrizen  $\boldsymbol{\sigma}$  in der vierkomponentigen Theorie.  $V$  ist das effektive elektrostatische Potential, gemäß Gl. (107), in dem sich das Elektron bewegt.  $\mathbf{B}$  ist das effektive Magnetfeld, das durch die Austauschwechselwirkung der Elektronen und, von untergeordneter Rolle, von möglichen äußeren Feldern (z.B. Kerndipolmoment) erzeugt wird.  $e$  ist der Betrag der elektrischen Ladung,  $\mathbf{p}$  ist der Impulsoperator,  $I_2$  and  $I_4$  bezeichnet die  $(2 \times 2)$  und  $(4 \times 4)$  Einheitsmatrizen,  $i$  ist ein Mehrfachindex  $i = (\mathbf{k}, \nu, \sigma)$ , der den Bloch Vektor, Bandindex, und die Spin Quantenzahl repräsentiert. Der vierkomponentige Dirac Spinor  $\boldsymbol{\Psi}_i(\mathbf{r})$ [45] wurde in Gl. (111) dargestellt durch seine großen und kleinen Komponenten  $\varphi_i(\mathbf{r})$  und  $\chi_i(\mathbf{r})$ . Für  $3d$ ,  $4d$  und mit Einschränkungen auch für  $5d$  Übergangsmetalle gilt für die potentielle Energie  $eV$ , das  $eV \ll mc^2$ , und die Valenzelektronen bewegen sich im Limes kleiner "Geschwindigkeiten"  $v^2/c^2 \ll 1$ . Dies erlaubt eine Entwicklung des Dirac Operators nach Potenzen von  $v^2/c^2$  und man erhält

nach Anwendung der Foldy-Wouthuysen Transformation den Schrödinger Operator und zusätzlich die erste relativistische Korrektur der Ordnung  $\mathcal{O}(1/c^2)$ . Dies ist der bekannte *Pauli Operator*:

$$\mathcal{H}_{\text{Pauli}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - eV + \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{e\hbar}{8m^2c^2} \nabla \cdot \mathbf{E} + \frac{e\hbar^2}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p}), \quad (112)$$

den man dann nur noch auf die große Komponente anwendet. Die ersten zwei Terme des Pauli Operators sind gerade der Operator der kinetischen Energie und der elektrostatischen potentiellen Energie des nichtrelativistischen Schrödingeroperators. Die weiteren Beiträge sind die relativistischen Korrekturen niedrigster Ordnung. Der erste Korrekturterm zeigt explizit die Existenz eines magnetischen Momentes

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} = -\mu_B \boldsymbol{\sigma} = -g\mu_B \mathbf{S}, \quad (113)$$

verknüpft mit dem Elektronenspin  $\mathbf{S} = \boldsymbol{\sigma}/2$ , welches mit dem Magnetfeld wechselwirkt.  $g = 2$  ist das gyromagnetischen Verhältnis des Elektrons. Häufig faßt man

$$V_{\boldsymbol{\sigma}} = V - \frac{1}{e} \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (114)$$

zusammen. Majoritätselektronen, Elektronen mit Spin  $+$  bzw.  $|\uparrow\rangle$ , erfahren also ein stärker anziehendes Potential als im unmagnetischen Fall, Elektronen mit Spin  $-$  bzw.  $|\downarrow\rangle$ , erfahren ein stärker abstoßendes Potential. Dies führt dann zu den spinaufgespaltenen Bandstrukturen  $\epsilon_{\mathbf{k}\nu} \rightarrow \epsilon_{\mathbf{k}\nu\sigma}$ . Die Magnetisierungsdichte (oder die Dichte der magnetischen Dipole) folgt dann aus

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \sum_{i \in \text{besetzte Zust.}} \varphi_i^+(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} \varphi_i(\mathbf{r}). \quad (115)$$

In einer Modelltheorie ersetzt man oft die Magnetisierungsdichte  $\mathbf{m}(\mathbf{r})$  und das magnetische Austauschfeld  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$  durch die räumlich gemittelten Größen: magnetisches Moment  $M = \int_V m_z(\mathbf{r}) dV$  und dem Austauschintegral<sup>8</sup>  $1/2 I$ , welches zum bekannten Stonermodell führt

$$V_{\pm} = V \mp \frac{1}{2} I \cdot M \quad \text{und} \quad \epsilon_{\mathbf{k}\nu\pm} = \epsilon_{\mathbf{k}\nu} \mp \frac{1}{2} I \cdot M. \quad (116)$$

Der Term in Gl. (112) proportional zu  $\mathbf{p}^4$  ist der erste Beitrag der relativistischen kinematischen Massenvergrößerung. Die dritte relativistische Korrektur ist der Darwin Term und berücksichtigt den Effekt, daß in der relativistischen Theorie, in der nur das Elektron und nicht das Positron beschrieben wird, der Ortsoperator keine scharfen Eigenfunktionen hat, sondern das Elektron eine ‘‘Zitterbewegung’’ im Bereich der Compton Wellenlänge  $\lambda_C = \hbar/mc$  ausführt. Damit wird das Elektron über diesen Radius ‘‘verschmiert’’ und ist folglich empfindlich auf elektrische Felder

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r}) \quad (117)$$

---

<sup>8</sup>Hier sieht man nochmals sehr schön, daß das Magnetfeld eigentlich kein echtes Magnetfeld, sondern ein Austauschkorrelationsfeld ist.

der Längenskala  $\lambda_C$ . Die kinematische Massenerhöhung und der Darwin Term sind beide *skalare* Größen im Spinorraum und sind unabhängig vom Spin  $\mathbf{S}$ . Der letzte Term der Gl. 112 ist die Spin-Bahn Kopplung  $\mathcal{H}_{S.O.}$ .

$$\mathcal{H}_{S.O.} = \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p}). \quad (118)$$

Die Spin-Bahn Kopplung wird hervorgerufen durch die Kopplung des magnetischen Momentes  $\boldsymbol{\mu} = -g\mu_B\mathbf{S}$ , mit dem Magnetfeld, das man sich durch den Kreisstrom der Bahnbewegung des Elektrons um den Atomkern erzeugen kann. Da die Bahnbewegung des Elektrons über diese Wechselwirkung mit den Ionenrümpfen mit dem Kristallgitter verknüpft ist, entsteht eine Kopplung zwischen dem Spinraum und dem Kristallgitter und liefert damit einen Beitrag zur magnetokristallinen Anisotropie. Man ist in der Lage Terme höherer Ordnung in  $(1/c^2)^n$  aufzusummieren, indem man die relativistische Masse

$$M_{-\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r}) = m \left[ 1 + \frac{1}{2mc^2} (\epsilon - eV(\mathbf{r}) - \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r})) \right] \quad (119)$$

eingführt. Der Pauli Operator läßt sich dann als Summe von zwei Operatoren schreiben: (i) einem skalarrelativistischen Hamiltonoperator  $\mathcal{H}_{SRA}$ , den man erhält, wenn man in den Termen  $\propto \mathbf{p}^2$  und  $\propto \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{E}$  die Massen  $m$  durch  $M_{-\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r})$  ersetzt und den Term  $\propto \mathbf{p}^4$  wegläßt; (ii) und einen Spin-Bahn-Wechselwirkungsoperator  $\mathcal{H}_{S.O.}$ . Wir betrachten dann den relativistischen Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} \varphi_i(\mathbf{r}) = (\mathcal{H}_{SRA} + \mathcal{H}_{S.O.}) \varphi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \varphi_i(\mathbf{r}) \quad (120)$$

mit

$$\mathcal{H}_{S.O.} = \frac{e\hbar^2}{4M_{-\boldsymbol{\sigma}}^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p}), \quad (121)$$

wobei der Eigenwert  $\epsilon_i$  die Ruhemasse des Elektrons,  $mc^2$ , nicht mehr enthält.

Der Spin-Orbit Term ist besonders groß in der Nähe des Atomkerns, wo das Potential  $V(\mathbf{r})$  in sehr guter Näherung sphärisch ist ( $V_{-\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r}) \simeq V(r)$ ). Dann schreibt sich das elektrische Feld

$$\mathbf{E}(r) = -\frac{dV}{dr} \hat{\mathbf{r}}, \quad (122)$$

worin  $\hat{\mathbf{r}}$  der Richtungsvektor in radialer Richtung ist. Damit kann der Spin-Bahn-Hamilton Operator geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{S.O.} &= -\frac{e\hbar^2}{4M_{-\boldsymbol{\sigma}}^2(\mathbf{r})c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \\ &= -\frac{e\hbar^2}{2M_{-\boldsymbol{\sigma}}^2(\mathbf{r})c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \\ &= \xi(r) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \end{aligned} \quad (123)$$

worin  $\mathbf{L}$  der Operator des Bahndrehimpulses ist.  $\xi(r)$  ist die Spin-Bahn Kopplungskonstante als Funktion des Abstandes  $r$  von der Position des Atomkernes. In einem Gebiet

in Form einer Kugel um den Atomkern kann man die Eigenfunktion eines Elektrons im Festkörper in der Form

$$\varphi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) = \sum_{L,\sigma} F_{\mathbf{k},\nu}^{L,\sigma}(r) Y_L(\hat{\mathbf{r}}) \chi_\sigma \quad (124)$$

schreiben, wobei folgende Abkürzungen berücksichtigt wurden:  $L := (\ell, m_\ell)$  und  $\sigma := m_s$ . Den Erwartungswert des Spin-Bahn-Wechselwirkungsoperator können wir dann separieren in ein Matricelement im Ortsraum

$$\xi_{\mathbf{k},\nu,\nu'}^{L,\sigma,\sigma'} = \langle \nu, L, \sigma | \xi(\mathbf{r}) | \nu', L, \sigma' \rangle \quad (125)$$

und ein Matricelement im  $(2 \times 2)$  Spinraum,  $\langle \ell m_\ell \sigma | \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | \ell m'_\ell \sigma' \rangle(\theta, \phi)$ .

### **L · S Matricelement in Spinraum:**

Die Matricelemente von  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  hängen natürlich von der Spinquantisierungsachse  $\boldsymbol{\Omega}$  von  $\mathbf{S}$  ab. Die Spinquantisierungsachse  $\boldsymbol{\Omega} = (\sin \phi \sin \theta, \cos \phi \sin \theta, \cos \theta) \parallel \widehat{\mathbf{M}}$  wurde parallel<sup>9</sup> zur Richtung  $\widehat{\mathbf{M}}$  des  $\mathbf{B}$ -Feldes gewählt, die Winkel beziehen sich auf die kristallographischen Achsen des Kristalls. Das Matricelement  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  für eine willkürliche Spinorientierung  $\boldsymbol{\Omega} = (\sin \phi \sin \theta, \cos \phi \sin \theta, \cos \theta)$  erhält man vom Matricelement, berechnet für die  $\Omega_Z = (0, 0, 1)$ -Richtung durch eine unitäre Transformation im Spinraum

$$\langle \ell m_\ell \sigma | \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | \ell m'_\ell \sigma' \rangle(0, 0) \longrightarrow \langle \ell m_\ell \sigma | \mathcal{D}^+(\theta, \phi) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \mathcal{D}(\theta, \phi) | \ell m'_\ell \sigma' \rangle(\theta, \phi), \quad (126)$$

wobei  $\mathcal{D}(\theta, \phi)$  die Wigner'schen Rotationsmatrizen

$$\mathcal{D}(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) \cdot e^{-i\frac{\phi}{2}} & \sin(\frac{\theta}{2}) \cdot e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ \sin(\frac{\theta}{2}) \cdot e^{i\frac{\phi}{2}} & -\cos(\frac{\theta}{2}) \cdot e^{i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix} \quad (127)$$

sind. Unter diesen Bedingungen lauten die rotierten Spinfunktionen

$$\chi_\uparrow = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) \cdot e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ \sin(\frac{\theta}{2}) \cdot e^{i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \chi_\downarrow = \begin{pmatrix} \sin(\frac{\theta}{2}) \cdot e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ -\cos(\frac{\theta}{2}) \cdot e^{i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix}. \quad (128)$$

Schreiben wir das Skalarprodukt

$$\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} L_z & L_x - iL_y \\ L_x + iL_y & -L_z \end{pmatrix} \quad (129)$$

erhalten wir die explizite Winkelabhängigkeit des Matricelementes

$$\begin{pmatrix} \langle \uparrow | \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | \downarrow \rangle \end{pmatrix}(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ -\sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} L_z \quad (130)$$

$$+ \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \sin \theta (e^{i\phi} L^+ + e^{-i\phi} L^-) & \cos^2(\frac{\theta}{2}) e^{i\phi} L^- - \sin^2(\frac{\theta}{2}) e^{-i\phi} L^+ \\ \cos^2(\frac{\theta}{2}) e^{-i\phi} L^+ - \sin^2(\frac{\theta}{2}) e^{i\phi} L^- & -\frac{1}{2} \sin \theta (e^{i\phi} L^+ + e^{-i\phi} L^-) \end{pmatrix}, \quad (131)$$

<sup>9</sup>Eigentlich sind die Spinquantisierungsrichtung und die Richtung der magnetischen Momente antiparallel; zur Vereinfachung nehmen wir beide parallel und dafür gegebenenfalls  $\mu_B$  negativ.

worin  $L_{\pm} \equiv L_x \pm iL_y$  Operatoren sind, die auf  $Y_L$  anzuwenden sind. Die Winkelabhängigkeit und damit das Wesensmerkmal der Anisotropie, verursacht durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung, steckt im Matrixelement des Termes  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ .

#### **L · S Matrixelement im Ortsraum:**

Der radiale Anteil  $\xi_{\mathbf{k},\nu,\nu'}^{L,\sigma,\sigma'}$  bestimmt die Stärke der Spin-Bahn Kopplung. Mittels *ab initio* Elektronenstrukturmethoden kann er direkt aus der skalarrelativistischen Näherung berechnet werden. In selbstkonsistenter Weise kann man den Einfluß der Spin-Bahn-Wechselwirkung auf das Eigenwertspektrum der spinaufgespaltenen ( $\epsilon_{\mathbf{k}\nu} - \sigma \cdot B$ ) Elektronenbänder im Festkörper berücksichtigen. In Modelltheorien arbeitet man oft mit einer effektiven oder gemittelten Kopplungsstärke  $\xi$ . Dann hat die Spin-Bahn-Wechselwirkung die Form

$$\mathcal{H}_{S.O.} = \xi \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad (132)$$

die man häufig in Bücher findet. Unter der Annahme eines Coulombpotentials  $V(r) = -Ze/r$  und den nichtrelativistischen radialen Wellenfunktionen  $R_{n\ell}(r) \propto r^\ell$  läßt sich die Kopplungsstärke abschätzen:  $\xi_{n\ell} \propto \langle n\ell | \frac{1}{r} \frac{Z}{r^2} | n\ell \rangle \propto Z \cdot \left(\frac{Z^3}{a_B^3}\right) \frac{1}{n^3 \ell^2}$ . Es zeigt sich, daß,  $\xi_{n\ell}$  eine beachtlich ansteigende Funktion der Kernladungszahl  $Z$  ist. Elektronenstrukturrechnungen [46] zeigen, daß  $\xi$  innerhalb einer Serie von Atomen im Periodensystem mit  $Z^2$  zunimmt. Für die uns hier interessierenden  $3d$  Metalle liegt  $\xi$  in der Größenordnung von  $50 - 100$  meV. Bemerkenswert ist auch, daß  $\xi_{n\ell} \propto 1/n^3$ . Dies bedeutet, daß für die Valenzelektronen die Spin-Bahn-Wechselwirkung schwächer ist als für die Rumpfelektronen (diese tragen aber nicht zur magnetischen Anisotropie bei). Interessanter ist die Abhängigkeit  $\xi_{n\ell} \propto 1/\ell^2$ . Der Hauptbeitrag zu  $\xi_{n\ell}$  kommt aus der Umgebung des Atomkerns, wo die (nichtrelativistische) Wellenfunktion  $R_{n\ell}(r)$  im wesentlichen durch die Zentrifugalbarriere bestimmt ist. Wegen des Verhaltens  $R_{n\ell}(r) \propto r^\ell$  sollten die Zustände mit einem kleinen  $\ell$  ein größeres Gewicht am Ursprung haben als die Zustände mit großem  $\ell$ . Dies wird sehr wichtig für gemischte Systeme wie z.B. FePt wo die spinaufgespaltenen  $d$  Elektronen, als Ursache des Magnetismus, mit den ansonsten unmagnetischen Zuständen des Pt hybridieren und Magnetismus induzieren. Solovyev [47] untersuchte für eine geordnete FePt Legierung  $\xi_{n\ell}$  für die  $5d$  und  $6p$  Zustände von Pt und bestimmte ein  $\xi_{5d}^{\text{Pt}} = 0.571$  eV und ein  $\xi_{6p}^{\text{Pt}} = 2.217$  eV.

#### **Unterdrückter Bahndrehimpuls:**

Beim Magnetismus von Übergangsmetallen sind die  $d$  Elektronen die Hauptursache des Magnetismus und qualitativ liefern sie den Hauptbeitrag zur Anisotropie.

In einem freien Atom hat der Hamiltonoperator sphärische Symmetrie und der Gesamtbahndrehimpuls  $\sum_i \ell_i$  ist eine gute Quantenzahl, deren Größe durch die zweite Hund'sche Regel bestimmt wird. D.h. im Grundzustand besitzt das Atom im allgemeinen ein nichtverschwindendes Bahnmoment. Diese Physik findet man bestätigt bei den  $4f$  Metallen und Ionen im Festkörper.

Die  $3d$  Elektronen von Übergangsmetallionen sind nicht so gut abgeschirmt wie die  $4f$ -Elektronen und spüren das Kristallfeld der Umgebung. Dies bricht die sphärische Sym-

**Tabelle 10:** Gyromagnetisches Verhältnis  $g$  und orbitales magnetisches Moment  $m_\ell = \mu_B \ell_z$  für Fe, Co und Ni nach Ref. [48].

	Fe (bcc)	Co (hcp)	Ni (fcc)
$g$	2.091	2.187	2.183
$m_\ell$	0.0918	0.1472	0.0507

metrie. Die Energie des Kristallfeldes ist typischerweise in der Größenordnung von etwa 1 eV und damit viel größer als die Spin-Bahn-Wechselwirkung. Vernachlässigen wir die Spin-Bahn-Wechselwirkung für einen Moment und betrachten die  $\ell = 2$  Orbitale der  $3d$  Ionen im Kristallfeld, so ist wegen dem Bruch der sphärischen Symmetrie der Bahndrehimpuls  $L$  keine gute Quantenzahl mehr und die Eigenfunktionen werden aus Linearkombinationen von  $Y_{\ell m_\ell}$  gebildet, die invariant unter Transformationen der Symmetriegruppe des Kristalls sind. Die so gebildeten Hybridorbitale setzen sich z.B. zusammen aus den Orbitalen:  $xy$ ,  $yz$ ,  $xz$ ,  $x^2 - y^2$ , oder  $3z^2 - r^2$ . In jedem dieser Orbitale kommt  $m_\ell$  und  $-m_\ell$  gleichberechtigt vor, so daß der Gesamtbahndrehimpuls bzw. das Gesamtbahnmoment verschwindet<sup>10</sup>. D.h. In Abwesenheit der Spin-Bahn-Wechselwirkung reduziert sich das magnetische Gesamtmoment der  $3d$  Ionen auf ein reines Spinmoment und das gyromagnetische Verhältnis  $g = (2s_z + \ell_z)/(s_z + \ell_z)$  ist  $g = 2$ . Die Eigenschaft der Spin-Bahn-Wechselwirkung ist nun, einen kleinen Bruchteil des Spinmoment auf das Bahnmoment zu projizieren und die Unterdrückung des magnetischen Bahnmomentes wieder aufzuheben. Diese Effekt ist sehr klein aber wichtig im Kontext der magnetokristallinen Anisotropie, und das gyromagnetische Verhältnis ist nun  $g \neq 2$  aber nahe  $g = 2$ .

Der gleiche Effekt tritt bei den  $3d$  Metallen auf. Die Rolle des Kristallfeldes übernimmt die Banddispersion der Energieniveaus und in der Tat ist das gyromagnetische Verhältnis  $g$  fast 2 wie man aus Tabelle (10) sehen kann.

## 5.2 Zusammenhang zwischen magnetischem Bahnmoment und magnetischer Anisotropie

Die Größe des Bahnmomentes hängt von der Quantisierungsrichtung ab und ist damit ebenfalls eine richtungsabhängige Größe. Man beobachtet oft, daß die Richtung der leichten Magnetisierungsachse mit der Richtung des größten Bahnmomentes zusammenfällt. Bevor wir in die detaillierte Diskussion der mikroskopischen Theorie der magnetokristallinen Anisotropie einsteigen, möchte ich hier ein einfaches physikalisches Modell,

<sup>10</sup>Im Slang der Festkörperphysiker heißt dies, der Bahndrehimpuls ist durch das Kristallfeld (*ge*)*quenched*.

entwickelt von Bruno [49], vorstellen, das diesen Zusammenhang unter gewissen Bedingungen an die elektronische Struktur erklärt.

Wir starten mit der Annahme, daß die Austauschspaltung  $\epsilon_{\mathbf{k}\uparrow} - \epsilon_{\mathbf{k}\downarrow} \approx I \cdot M$  zwischen Spin-up und Spin-down Bändern viel größer als die Bandbreite  $W$  ist (ist im allgemeinen nicht erfüllt für  $3d$  Atome im Volumen, aber ultradünnen Filmen oder Drähte erfüllen diese Forderung oder kommen dieser sehr nahe). In diesem Falle können wir die Nebendiagonalelemente der Spin-Bahn-Wechselwirkungsmatrix von  $\mathcal{H}_{S.O.}$  z.B. Gl. (131), die Spin-up und Spin-down Zustände verknüpfen,  $\langle \uparrow | \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | \downarrow \rangle$ , vernachlässigen. Dann ist die Spin-Bahn-Wechselwirkungsmatrix diagonal und man kann die Diagonalelemente als ein effektives orbitales magnetisches Feld  $\mathbf{H}_{\text{orb.}}$  interpretieren, das auf das Bahnmoment  $\mathbf{m}_\ell = \mu_B \mathbf{L}$  wirkt,

$$\mathcal{H}_{S.O.} = -\mathbf{m}_\ell \cdot \mathbf{H}_{\text{orb.}} \quad \text{mit} \quad \mathbf{H}_{\text{orb.}} = \pm \frac{\xi}{2\mu_B} \widehat{\mathbf{M}}, \quad (133)$$

wobei das  $+$  ( $-$ ) Vorzeichen für  $d$  Bänder mit mehr (weniger) als 5 Elektronen anzuwenden ist.

Kleine Felder induzieren magnetische Momente. In linearer Näherung wird dieser Zusammenhang durch die Suszeptibilität beschrieben. Wir führen daher die magnetische *Bahnsuszeptibilität*  $\chi_{\text{orb.}}^{(2)}$  als Tensor zweiter Stufe ein. In niedrigster Ordnung in  $\mathbf{H}_{\text{orb.}}$  kann der Erwartungswert  $\mathbf{m}_\ell = \langle \mathbf{m}_\ell \rangle$  des Bahnmomentes und die Spin-Bahn-Wechselwirkungsenergie  $E_{S.O.}$  geschrieben werden als

$$\mathbf{m}_\ell = \langle \mathbf{m}_\ell \rangle = \chi_{\text{orb.}}^{(2)} \cdot \mathbf{H}_{\text{orb.}} = \pm \frac{\xi}{2\mu_B} \chi_{\text{orb.}}^{(2)} \cdot \widehat{\mathbf{M}} \quad (134)$$

$$\text{und} \quad E_{S.O.} = -\frac{1}{2} \mathbf{H}_{\text{orb.}} \cdot \chi_{\text{orb.}}^{(2)} \cdot \mathbf{H}_{\text{orb.}} = -\frac{1}{2} \frac{\xi^2}{4\mu_B^2} \widehat{\mathbf{M}} \cdot \chi_{\text{orb.}}^{(2)} \cdot \widehat{\mathbf{M}}. \quad (135)$$

Für Kristallsysteme mit uniaxialer magnetischer Anisotropie (z.B. tetragonale und hexagonale Kristallsysteme), mit der Symmetrieachse des Kristalls entlang der  $\hat{z}$ -Richtung, ergibt sich für die Komponenten des Suszeptibilitätstensor:

$$\chi_{\text{orb.}}^{(2)} = \begin{pmatrix} \chi_{\text{orb.}}^{(2)11} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{\text{orb.}}^{(2)11} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{\text{orb.}}^{(2)33} \end{pmatrix}. \quad (136)$$

Der Beitrag des Bahnmomentes zum magnetischen Moment in  $\hat{z}$ -Richtung schreibt sich dann

$$m_{\ell,z} = \pm \frac{\xi}{2\mu_B} \left[ \chi_{\text{orb.}}^{(2)33} + \left( \chi_{\text{orb.}}^{(2)11} - \chi_{\text{orb.}}^{(2)33} \right) \sin^2 \theta \right] \quad (137)$$

und entsprechend erhalten wir für die Energie der Spin-Bahn-Wechselwirkung

$$E_{S.O.} = -\frac{1}{2} \left( \frac{\xi}{2\mu_B} \right)^2 \left[ \chi_{\text{orb.}}^{(2)33} + \left( \chi_{\text{orb.}}^{(2)11} - \chi_{\text{orb.}}^{(2)33} \right) \sin^2 \theta \right]. \quad (138)$$

Natürlich gilt für kubische Systeme  $\chi_{\text{orb.}}^{(2)11} = \chi_{\text{orb.}}^{(2)22} = \chi_{\text{orb.}}^{(2)33}$ , so daß die Anisotropie Null ist, d.h. es gibt keine Anisotropie in dieser Ordnung für kubische Systeme. Für kubische

Systeme ist die Anisotropie ein vierter Ordnungsterm in der Richtung der Magnetisierung, daher müssen wir in diesem Falle die nichtlineare Bahnsuszeptibilität, welche durch einen Tensor vierter Stufe  $\chi_{\text{orb.}}^{(4)}$  gegeben ist, berücksichtigen. Im allgemeinen erhält man für das magnetische Bahnmoment und die Spin-Bahn-Wechselwirkungsenergie:

$$m_{\ell,z}^i = \sum_{i,j} \chi_{\text{orb.}}^{(2)ij} H_{\text{orb.}}^i H_{\text{orb.}}^j \sum_{i,j,k,l} \chi^{(4)ijkl} H_{\text{orb.}}^j H_{\text{orb.}}^k H_{\text{orb.}}^l \quad (139)$$

$$E_{S.O.} = -\frac{1}{2} \left( \sum_{i,j} \chi_{\text{orb.}}^{(2)ij} H_{\text{orb.}}^j + \sum_{i,j,k,l} \chi^{(4)ijkl} H_{\text{orb.}}^i H_{\text{orb.}}^j H_{\text{orb.}}^k H_{\text{orb.}}^l \right). \quad (140)$$

Für kubische Systeme, wie ahnen es schon aus der Diskussion von Gl. (50), sind  $\chi^{(4)1111}$  und  $\chi^{(4)1122}$  die einzigen unabhängigen Komponenten, so daß der Ausdruck für  $m_{\ell}$  und der Spin-Bahn-Wechselwirkungsenergie  $E_{S.O.}$  sich vereinfachen zu

$$m_{\ell,z} = \pm \frac{\xi}{2\mu_B} \chi_{\text{orb.}}^{(2)11} \pm \left( \frac{\xi}{2\mu_B} \right)^3 \left[ \chi_{\text{orb.}}^{(4)1111} + 2 \left( 3 \chi^{(4)1122} - \chi_{\text{orb.}}^{(4)1111} \right) (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_3^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) \right], \quad (141)$$

$$E_{S.O.} = -\frac{1}{2} \left( \frac{\xi}{2\mu_B} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{\xi}{2\mu_B} \right)^4 \left[ \chi_{\text{orb.}}^{(4)1111} + 2 \left( 3 \chi^{(4)1122} - \chi_{\text{orb.}}^{(4)1111} \right) (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_3^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) \right] \quad (142)$$

Verallgemeinert heißt dies, daß in diesem einfachen Modell die magnetische Anisotropieenergie  $K$  und die Anisotropie der Bahnmomente  $\Delta m_{\ell} = m_{\ell}(\widehat{\mathbf{M}}_2) - m_{\ell}(\widehat{\mathbf{M}}_1)$ , bestimmt für zwei Richtungen der Magnetisierung  $\widehat{\mathbf{M}}_1$  und  $\widehat{\mathbf{M}}_2$ , direkt proportional ist

$$K = \frac{\xi}{4\mu_B} \left( m_{\ell}(\widehat{\mathbf{M}}_2) - m_{\ell}(\widehat{\mathbf{M}}_1) \right). \quad (143)$$

Obwohl die Näherung der großen Austauschspaltung für die Volumenmetalle Fe, Co, und Ni nicht wirklich gültig ist, wenden wir das Modell auf diese Systeme versuchsweise an. Für diese Metalle ist das effektive Feld  $H_{\text{orb.}}$  in der Größenordnung von  $5 \times 10^6$  Oe. Die Bahnsuszeptibilitäten von Fe, Co und Ni sind in Tab. (11) gegeben. Daten für die nichtlineare Suszeptibilität sind nicht verfügbar.

Die Aussagen dieses Modelles sind die folgenden: (i) Das Bahnmoment ist in der Größenordnung von  $0.1 \mu_B/\text{atom}$  und parallel zum Spinmoment, d.h.  $g > 2$ . (ii)  $K_1$  und  $M_1$  in Tab. (3) haben entgegengesetztes Vorzeichen, und das Verhältnis ist in der Größenordnung von  $H_{\text{orb.}}$ . (iii) Die Anisotropie des Bahnmomentes von Co ist in der Größenordnung von  $0.01 \mu_B/\text{atom}$ . All diese Aussagen sind in der Natur ziemlich gut reproduziert, sowohl in Betrag als auch im Vorzeichen, was darauf hinweist, daß das einfache physikalische Bild dieses Modells in den groben Zügen korrekt ist.

**Tabelle 11:** Die Bahnsuszeptibilitäten von Fe, Co und Ni.

			Fe	Co	Ni
			(bcc)	(hcp)	(fcc)
Ref. [10]	$\chi_{\text{orb.}}^{(2)11}$	[emu/mol]	$120 \times 10^{-6}$	$240 \times 10^{-6}$	$80 \times 10^{-6}$
		$[\mu_B / (\text{Oe} \cdot \text{atom})]$	$20 \times 10^{-9}$	$40 \times 10^{-9}$	$15 \times 10^{-9}$
Ref. [13]	$\chi_{\text{orb.}}^{(2)11} - \chi_{\text{orb.}}^{(2)33}$	[emu/mol]	–	$-50 \times 10^{-6}$	–
		$[\mu_B / (\text{Oe} \cdot \text{atom})]$	–	$-9 \times 10^{-9}$	–

### 5.3 Störungstheorie

Da die Spin-Bahn Kopplung eine sehr kleine Größe ist, viel kleiner als die Austauschspaltung oder die Bandbreite, ist die Störungsrechnung der natürliche Zugang um die Anisotropieenergie zu berechnen.

In Gl. (126) haben wir gesehen, daß sich die Drehung der Magnetisierungsrichtung  $\widehat{\mathbf{M}}$  und des Erwartungswert der Spinrichtung  $\mathbf{\Omega}$  gleich transformierten. Anisotropiekonstanten  $n$ -ter Ordnung sind dadurch gekennzeichnet, daß sich die Richtungsabhängigkeit der Energie proportional zu den  $n$ -ten Potenzen der Richtungskosinusse verhält,  $\propto (\widehat{\mathbf{M}})^n$ . In Folge dessen, ist die Anisotropiekonstante  $n$ -ter Ordnung verknüpft mit dem Matrixelement  $(\mathbf{L} \cdot \mathbf{S})^n$ , welches man erhält durch  $n$ -te Ordnung Störungsrechnung. Für kubische Systeme erhält man die ersten Beiträge zur Anisotropieenergie durch Störungsrechnung in 4-ter Ordnung und für uniaxiale Systeme (tetragonal, hexagonal, ultradünne Filme, Schichtsysteme, Oberflächen) durch Störungsrechnung in 2-ter Ordnung.

Die Änderung der Gesamtenergie des Elektronensystems,  $\Delta E_{S.O.}(\widehat{\mathbf{M}})$ , für eine gegebene Orientierung der Magnetisierung  $\widehat{\mathbf{M}}$ , hervorgerufen durch die, von der Magnetisierungsrichtung abhängigen, Spin-Bahn-Wechselwirkung als Störung, ergibt sich durch die Summe der Änderungen in den Bandenergien, bzw. Einteilchenenergien, und ist in 2-ter Ordnung Störungstheorie durch die bekannte Formel

$$\Delta E_{S.O.}(\widehat{\mathbf{M}}) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\nu}^{\text{besetzt}} \sum_{\nu'}^{\text{unbes.}} \frac{|\langle \nu \mathbf{k} | \xi \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | \nu' \mathbf{k} \rangle|^2}{\epsilon_{\mathbf{k}\nu} - \epsilon_{\mathbf{k}\nu'}} \quad (144)$$

gegeben, worin  $\nu$  die besetzten Grundzustände sind und  $\nu'$  die unbesetzten, anregbaren Zustände. Die einzigen angeregten Zustände, die man hier beachten muß, sind ausgezeichnet durch Elektronen mit dem Blochvektor  $\mathbf{k}$ , die von besetzten Zustände in diese unbesetzten Zustände angeregt werden können, mit oder ohne Spinflip. D.h. definieren wir die Bandbreite  $W$ , dann ergibt sich als grobe Abschätzung der Anisotropie  $K_1$  für uniaxiale Systeme in 2-ter Ordnung Störungsrechnung und für kubische Systeme in 4-ter

$$\text{Uniaxial: } K_1 \sim \frac{\xi^2}{W} \quad \text{und} \quad \text{Kubisch: } K_1 \sim \frac{\xi^4}{W^3}. \quad (145)$$

Nimmt man für  $\xi \approx 75$  meV und  $W \approx 5$  eV, erhält man für  $K_1 \approx 1$  meV/atom für uniaxiale Systeme und  $K_1 \approx 0.3$   $\mu$ eV/atom für kubische Systeme. Diese Abschätzungen führen zu Anisotropiekonstanten in den Größenordnungen wie sie für ultradünne Filme oder kubischen Materialien in Tab. (2) aufgelistet wurden. D.h. die Störungsrechnung gibt eine einfache Erklärung für die Größenordnungen mit denen man es in der magnetischen Anisotropie zu tun hat. Ganz allgemein können wir zusammenfassen, daß eine Anisotropiekonstante  $K$   $n$ -ter Ordnung proportional zu  $K \sim W(\frac{\xi}{W})^n$ , und damit eine kleine Größe ist, die mit zunehmender Ordnung  $n$  schnell klein wird, was die schnelle Konvergenz der Anisotropieenergie als Funktion der Ordnung erklärt.

Betrachten wir Gl. (144) nochmals etwas genauer. Genau genommen ist der Ausdruck Gl. (144) nur gültig wenn  $|\epsilon_{\mathbf{k}\nu} - \epsilon_{\mathbf{k}\nu'}| \gg |\langle \nu \mathbf{k} | \xi \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | \nu' \mathbf{k} \rangle|$ , ansonsten muß man die Störungstheorie für quasientartete Zustände benutzen. Deshalb ist der Ausdruck nicht gültig für Paare von Zuständen  $(\nu, \nu')$ , deren Energieunterschied im Bereich  $\xi$  liegen. Gedanklich kann man den Beitrag zur Spin-Bahn-Wechselwirkungsenergie unterteilen (i) in einen Beitrag der von der Fermioberfläche, bzw. einer Energiehülle um die Fermioberfläche, stammt und einen Bändervolumenterm. Für kubische Systeme, die in vierter Ordnung Störungstheorie berechnet werden, ist der Nenner der entsprechende Gl. (144)  $\propto (\epsilon_{\mathbf{k}\nu} - \epsilon_{\mathbf{k}\nu'})^3$ . D.h. für jeden  $\mathbf{k}$ -Punkt fällt der Beitrag zur Anisotropieenergie mit der dritten Potenz der Energiedifferenz zwischen besetzten und unbesetzten Zuständen ab. Daraus kann man schließen, daß der Bändervolumenterm für kubische Systeme sehr klein oder vernachlässigbar ist. Tatsächlich hat Kondorskii *et al.* [50] am Beispiel vom fcc Ni-Metall gezeigt, daß der Hauptbeitrag zur magnetokristallinen Anisotropie von Bändern stammt, welche in Abwesenheit von der Spin-Bahn-Wechselwirkung entartet oder quasi-entartet sind, und Beiträge von anderen Bändern, dem Bändervolumenterm, sind mehrere Größenordnungen kleiner. Dies bedeutet, daß eine sehr hohe Anzahl von  $\mathbf{k}$ -Punkten nötig ist, um mit einem feinen Gitter in der Brillouin Zone alle entarteten oder quasientarteten Zustände nahe der Fermienergie aufzulösen. Diese Erfahrung wurde durch *ab initio* Rechnungen von Fe, Co, und Ni [44, 51, 52] bestätigt, wo nur Rechnungen mit  $10^6$   $\mathbf{k}$ -Punkten in der Brillouin Zone vernünftig konvergierte Beiträge der Fermioberfläche zur magnetokristallinen Anisotropie lieferte. Für uniaxiale Systeme fällt für jeden  $\mathbf{k}$ -Punkt der Beitrag zur Anisotropieenergie nur linear mit der Energiedifferenz zwischen besetzten und unbesetzten Zuständen ab. Deshalb erwarten wir, daß für uniaxiale System der Bändervolumenterm erheblich wichtiger ist als die Energiehülle um die Fermienergie und deshalb erwarten wir eine viel schnellere Konvergenz der Anisotropieenergie mit der Anzahl der  $\mathbf{k}$  Punkte und eine untergeordnete Rolle der problematischen Zustände um die Fermienergie.

Bisher haben wir noch nichts über die besetzten Zustände bzw. über die Fermiener-

gie  $\epsilon_F$  in Gl. (144) ausgesagt. Die Fermienergie ändert sich mit der Magnetisierungsrichtung. Für die korrekte Berechnung der Anisotropien 4-ter Ordnung ist das ein nicht zu vernachlässigender Effekt. Zweitens hängt die Fermienergie natürlich von der Anzahl der Elektronen ab, und somit ist die magnetokristalline Anisotropie eine Funktion der Bandfüllung. Betrachten wir das Matrixelement

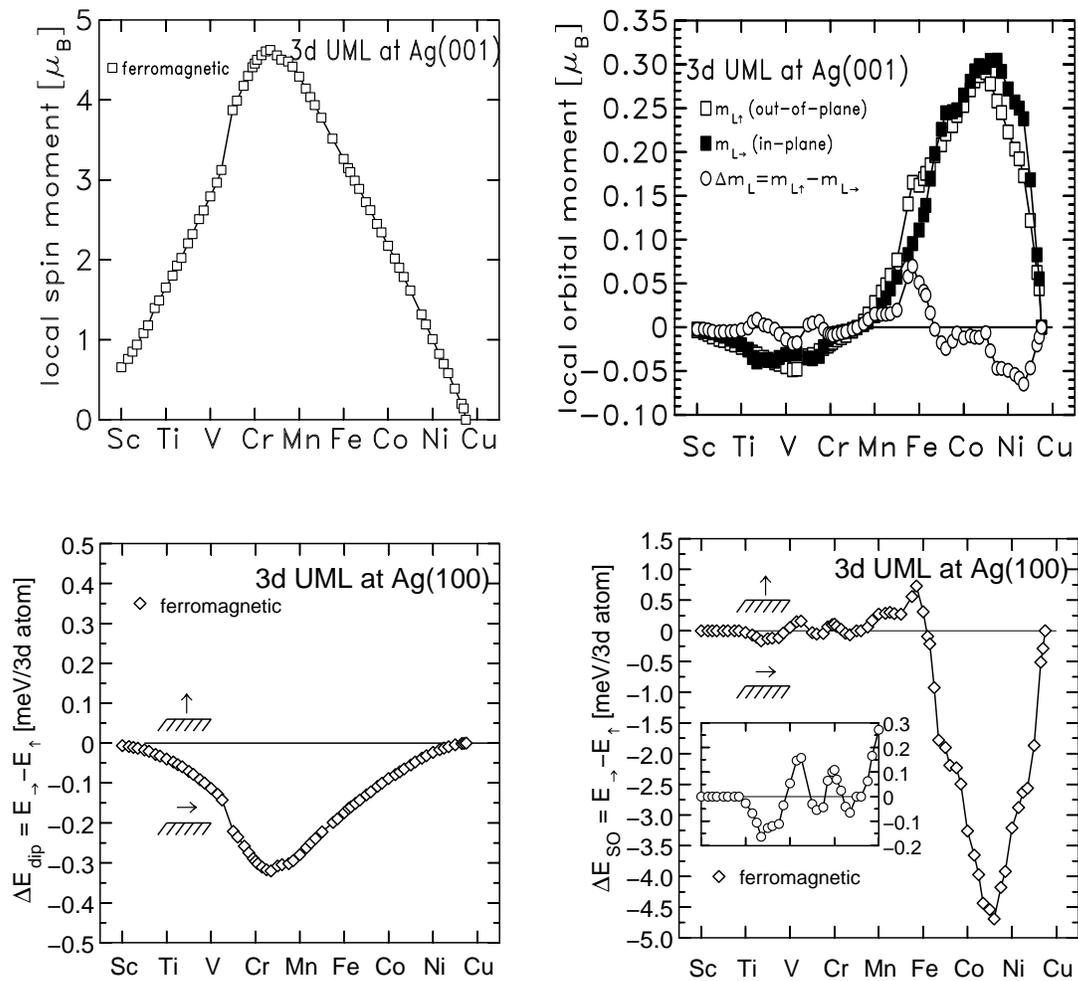
$$\langle 1 | \mathcal{H}_{s.o.} | 2 \rangle \langle 2 | \mathcal{H}_{s.o.} | 3 \rangle \quad (146)$$

Gl. (144). Wir interpretieren das Matrixelement als eine Anregung vom Zustand 1 in den Zustand 2 und dann in den Zustand 3. Legen wir der Berechnung von Gl. (144) ein nächste Nachbar Modell festgebundener Elektronen zugrunde: Gut lokalisierte  $d$  Elektronen hüpfen nur vom Platz 1 zum nächsten Nachbarplatz 2, so kann man obiges Matrixelement zweiter Ordnung als einen Doppelhüpfprozess eines Elektrons interpretieren. Nach einem Theorem von Heine und Samson [53] hat eine physikalische Größe, die in einem nächsten Nachbar Modell festgebundener Elektronen durch  $n$  Hüpfprozesse beschrieben wird,  $2n$  Nulldurchgänge als Funktion der Bandfüllung. Wir erwarten für das  $K_1$  uniaxialer Systeme 4 Nulldurchgänge, und für kubische Systeme 8 Nulldurchgänge. Natürlich sind für die Übergangsmetalle der  $3d$ -Reihe, mit ihren gut lokalisierten  $d$  Elektronen, das Modell festgebundener Elektronen auch nur eine Näherung. Es gibt auch noch  $s$  und  $p$  Elektronen und für die frühen Elemente der  $3d$  Reihe erwarten wir etwas delokalisierte  $d$ -Elektronen, so daß die nächste Nachbarnäherung nicht mehr in vollem Umfang gültig ist. Bruno [54] und Pick [55] untersuchten freitragende (001) Monolagen und fanden in der Tat ein oszillierendes Verhalten von  $K_1$  als Funktion der Bandfüllung. Kürzlich haben Nie und Blügel [56] die freitragenden  $3d$ -Monolagen auch mittels *ab initio* Methoden berechnet. Die Ergebnisse sind in Abb. (13) zusammengefaßt und werden in nächsten Abschnitt diskutiert. Das oszillierende Verhalten ist gut zu erkennen.

## 5.4 Ab-initio Resultate

Die Berechnung der magnetokristallinen Anisotropie mittels moderner Methoden der Elektronentheorie, wie z.B. der Dichtefunktionaltheorie, ist eine echte Herausforderung an die Genauigkeit und Effizienz der zu entwickelnden Rechenmethoden. In den letzten 4-5 Jahren wurden eine ganze Reihe von Arbeiten veröffentlicht, die auf der Basis der Dichtefunktionaltheorie (DFT) erzielt wurden; und die Dichtefunktionaltheorie etabliert sich zur Zeit als neuer theoretischer Zugang zur Beschreibung der magnetischen Anisotropie.

Im Rahmen dieser Vorlesung ist es unmöglich enzyklopädisch alle Ergebnisse aufzulisten, stattdessen wollen wir exemplarisch die freitragenden (001) orientierten  $3d$  Übergangsmetallagen mit einer Schichtdicke von einer Monolage als Funktion der Bandfüllung diskutieren. Die Ergebnisse sind in Abb. (13) dargestellt. Es sind die Ergebnisse von selbstkonsistenten Rechnungen auf der Basis der Dichtefunktionaltheorie (DFT) in der



**Abbildung 13:** *Ab initio* Resultate auf der Basis der DFT in der LSDA, erzielt mit der FLAPW-Methode für eine freitragende Monolage eines 3d Metalls in der (001) Oberflächenorientierung mit der lateralen Gitterkonstanten des Ag(001) Substrates nach X. Nie und S. Blügel [56]. Um den Effekt der elektronischen Struktur fein abzutasten, wurde die Kernladungszahl  $Z$  von Sc bis Cu in Einheiten von  $0.1 \sim 0.15$  variiert. Insgesamt wurden für 66 unterschiedliche  $Z$ , das Spinmoment (Bild oben links), die Bahnmomente  $m_{\ell} = \rightarrow$  und  $m_{\ell} = \uparrow$  für die Magnetisierungsrichtung in und senkrecht zur Filmebene (oben rechts), die magnetostatische Dipolenergie (unten links) und die magnetokristalline Anisotropie (unten rechts) aufgrund der Spin-Bahn-Wechselwirkung selbstkonsistent berechnet. Die unterschiedlichen Spinmomente für die zwei Spinorientierungen sind auf obiger Skala nicht mehr unterscheidbar. Positive Energie bedeutet die senkrechte Magnetisierung ist energetisch günstiger.

lokalen Spindichtennäherung (LSDA), berechnet mit der Full-Potential Linearized Augmented Plane Wave (FLAPW)-Methode [57]. Um die Bandfüllung fein abzutasten, rechnen wir mit nicht ganzzahligen Kernladungszahlen. Dahinter steht die Motivation, daß aus Gründen der Ladungsneutralität die Kernladungszahl und die Anzahl der Valenzelektronen gleich ist. Eine feine Veränderung der Kernladungszahl bedeutet daher eine feine Veränderung der Fermienergie und ein feines Abrastern der magnetokristallinen Anisotropie als Funktion der Bandfüllung. Wir variierten die Kernladungszahl  $Z$  von Sc mit der Kernladungszahl  $Z = 21$  und  $N_V = 3$  Valenzelektronen bis zu Cu,  $Z = 29$  und  $N_V = 11$ , ungefähr in Schritten von  $\Delta Z = 0.1 \sim 0.15$ . Die Gesamtzahl der verschiedenen Kernladungszahlen beträgt in diesem Intervall 66 Punkte. Im ersten Schritt berechnen wir für jede Kernladungszahl selbstkonsistent die elektronische Struktur auf der Basis der skalarelativistischen Näherung des Hamiltonoperators, d.h. ohne Spin-Bahn Kopplung. Diese Rechnung führen wir mit  $\mathbf{k}_{\parallel} = 288$  gleichmäßig verteilten  $\mathbf{k}_{\parallel}$ -Punkten in der zweidimensionalen Brillouin Zone durch. Dies führt zu verlässlichen Spinmomenten. Dann schließt sich ein zweiter Schritt an. In diesem berücksichtigen wir zusätzlich die Spin-Bahn Kopplung in der Hamiltonmatrix und berechnen für jeweils 2 Orientierungen der Magnetisierung, der Magnetisierung senkrecht zum Film,  $\widehat{\mathbf{M}} = \uparrow$ , und der Magnetisierung in der Filmebene,  $\widehat{\mathbf{M}} = \rightarrow$ , selbstkonsistent mit 2500  $\mathbf{k}_{\parallel}$ -Punkten in der zweidimensionalen Brillouin Zone<sup>11</sup>, die magnetischen Spinmomente  $m_s(\uparrow)$  und  $m_s(\rightarrow)$ , die Bahnmomente  $m_\ell(\uparrow)$  und  $m_\ell(\rightarrow)$  und die elektronischen Gesamtenergien  $E(\uparrow)$  und  $E(\rightarrow)$  der Monolagen.  $\Delta m_\ell = m_\ell(\uparrow) - m_\ell(\rightarrow)$  ist die Anisotropie des Bahnmomentes und  $\Delta E_{S.O.} = E(\uparrow) - E(\rightarrow)$  ist die Anisotropieenergie für die uniaxiale Anisotropie. Die Anisotropie des Spinmomentes ist unbedeutend. Sind Spin und Bahnmomente bekannt, kann man nach der Diskussion in Kap. (4) die Dipolenergie berechnen.

Eine alternative Vorgehensweise im zweiten Schritt besteht durch Anwendung der pseudopertubativen Methode. Unter der pseudopertubativen Methode versteht man, daß nach Abschluß von Schritt eins, die Matrixelemente der Spin-Bahn-Wechselwirkung mit skalarrelativistischen Basisfunktionen berechnet werden. Die Matrixelemente der Spin-Bahn-Wechselwirkung werden dann zur skalarrelativistischen Matrix addiert. Das Eigenwertspektrum  $\epsilon_{\mathbf{k}\nu}(\widehat{\mathbf{M}})$  findet man dann durch einmalige exakte Diagonalisierung für jede der beiden Magnetisierungsrichtungen  $\widehat{\mathbf{M}}_{1,2}$ . Die Differenz der Summen der Einteilchenenergien,  $\Delta E_{S.O.} = \sum_{\mathbf{k}\nu}^{\epsilon_F(\widehat{\mathbf{M}}_2)} \epsilon_{\mathbf{k}\nu}(\widehat{\mathbf{M}}_2) - \sum_{\mathbf{k}\nu}^{\epsilon_F(\widehat{\mathbf{M}}_1)} \epsilon_{\mathbf{k}\nu}(\widehat{\mathbf{M}}_1)$  ist dann die magnetische Anisotropieenergie. Diese Vorgehensweise ist im Geiste der Störungstheorie in Kap. (5.3). Für Bänder, die nahezu entartet sind, ist diese Vorgehensweise aber äquivalent der quasientarteten Störungstheorie. Zusätzlich wird die Fermienergie  $\epsilon_F$  für jede Orientierung  $\widehat{\mathbf{M}}$  neu bestimmt. Die Ergebnisse sind sicherlich nicht so exakt wie die selbstkonsistenten Resultate, sind aber für  $3d$  Elemente sehr gut und viel besser als einfache Störungsrechnung.

Das magnetische Spinmoment der  $3d$  Monolagen in Abb. (13) verhält sich so wie wir es von der Hund'schen Regel erwarten: maximales Spinmoment von mehr als  $4 \mu_B$  in der

<sup>11</sup>Dies entspricht 125000  $\mathbf{k}$  in drei Dimensionen.

Mitte der 3d Reihe. Die Dipolenergie  $E_{\text{dip.}}$  ist proportional zu  $m_s^2$  und umgekehrt proportional zur dritten Potenz der Gitterkonstanten,  $a_o$ . Da die Gitterkonstante für alle Systeme konstant ist, fixiert auf die Gitterkonstante von Ag, spiegelt die Dipolenergie als Funktion der Bandfüllung den Verlauf der magnetischen Momente wider. Wir wissen schon, daß die Dipol- oder Formanisotropie immer die Magnetisierung in der Ebene bevorzugt und gemäß unserer Vorzeichendefinition bedeutet dies, daß die Formanisotropie strikt negativ ist. Auch die Bahnmomente zeigen einen klaren Trend: zwischen Sc und Mn sind die Bahnmomente negativ und zwischen Mn und Cu positiv. Die Bahnmomente sind am Ende der 3d Reihe um Faktoren größer als am Anfang der Reihe. Die Anisotropie der Bahnmomente zeigt ein oszillatorisches Verhalten als Funktion der Bandfüllung: zwischen Fe und Cu ist  $\Delta m_\ell$  negativ, zwischen Mn und Fe ist es positiv, und dann oszilliert es mit kleiner Amplitude. Gemäß unserer Überlegungen zeigt die magnetokristalline Anisotropie ein kontinuierliches, aber oszillatorisches Verhalten als Funktion der Bandfüllung: zwischen Fe und Cu ist die magnetokristalline Anisotropie negativ und die Magnetisierung liegt in der Ebene, zwischen Mn und Fe ist sie positiv und die Magnetisierung normal zur Oberfläche ist energetisch am günstigsten. Mit gutem Willen findet man 4 Vorzeichenwechsel der magnetokristallinen Anisotropie als Funktion der Bandfüllung, wie man es nach dem Theorem von Heine und Samson, angewendet auf die zweite Ordnung Störungstheorie im Model festgebundener  $d$  Elektronen erwartet. Überraschend ist die große Variation im Betrag der magnetokristallinen Anisotropie als Funktion der Bandfüllung von 4.75 meV für eine Bandfüllung zwischen Co und Ni ( $N_V = 9.5$ ) und 0.15 meV für V. Nichtganzzahlige Bandfüllungen haben durchaus eine konkrete Bedeutung. Wir berechneten auch einen geordneten  $c(2 \times 2)$  CoNi Film, der ebenfalls eine Bandfüllung von  $N_V = 9.5$  Elektronen pro Atom aufweist. Die magnetokristalline Energie liegt praktisch auf der Kurve für  $N_V = 9.5$ . Addiert man die Formanisotropie und die magnetokristalline Anisotropie so sieht man, daß mit Ausnahme eines kleine Intervalles zwischen Mn und Fe die Anisotropieenergie stets eine Magnetisierungsrichtung in der Ebene energetisch begünstigt.

Ein sehr überraschendes Resultat ist die starke negative Anisotropie einer Co-Monolage. Diese ist in Übereinstimmung mit dem störungstheoretischen Resultat von Bruno [54], aber nicht in Übereinstimmung mit vielen Experimenten ultradünner Co-Filme als Sandwich oder Schichtsystem in Kontakt mit anderen Metallfilmen, siehe z.B. Co/Pd(100) [58] oder Co/Pt(100) [59]. Um zu sehen welchen Einfluß das Substrat auf die magnetokristalline Anisotropie hat, haben Nie und Blügel [56] eine freitragende Monolage Co in der Gitterkonstante von Ag(100) ( $\Delta E_{S.O.} = -3.26$  meV), mit einer Monolage Co auf Ag(100) ( $\Delta E_{S.O.} = -1.394$  meV), und einer freitragende Monolage Co in der Gitterkonstante von Cu(100) ( $\Delta E_{S.O.} = -1.333$  meV) mit einer Monolage Co auf Cu(100), ( $\Delta E_{S.O.} = -0.3223$  meV) verglichen. Wir sehen eine klare Reduktion der Anisotropie durch die Wechselwirkung mit dem Substrat, aber kein Vorzeichenwechsel. Um die Rolle des Substrates Pd oder Pt für die senkrechte Magnetisierung von Co-Filmen zu verstehen, muß man sich nochmals daran erinnern, daß Pd und Pt zwar keine Ferromagnete sind, aber eine sehr große,

Stoner-verstärkte, ferromagnetische Suszeptibilität aufweisen, zusammen mit einer großen Spin-Bahn Kopplungskonstanten. D.h. in Kontakt mit Co werden beide stark polarisiert und geben einen starken Beitrag zur magnetischen Anisotropie aufgrund der großen Spin-Bahn-Wechselwirkung. Diese Interpretation wird unterstützt durch die Tatsache, daß bei Unterdrückung der Spin-Bahn-Wechselwirkung von Pd, die berechnete Anisotropie von Pd/Co/Pd Filmen erheblich kleiner ausfällt [44]. Auf der anderen Seite haben Cu, Ag, und Au gefüllte  $d$  Bänder 3 – 4 eV unterhalb der Fermienergie und die induzierte Spinpolarisation ist sehr klein, so daß sich die Wechselwirkung zwischen Substrat und Film auf die Hybridisierung zwischen den  $sp$ -Elektronen des Substrates mit den  $d$  Elektronen des Cobalts beschränkt und die Spin-Bahn-Wechselwirkung dieser  $SP$  Elektronen ist nicht so stark.

Ein anderer sehr interessanter Fall sind fcc (111) Co/Ni Multilagen, wo beide Konstituenten ferromagnetische Metalle sind. Daalderop *et al.* haben in einer kühnen Arbeitshypothese angenommen, da Ni isoelektronisch zu Pd und Pt ist, kann auch ein Ni Substrat zur senkrechten magnetokristallinen Anisotropie von Co/Ni-Filmen führen. *Ab initio* Rechnungen bestätigten die Vermutung einer senkrechten Magnetisierung eines (111) orientierten Co/Ni<sub>2</sub> Vielfachschichtsystem und das Resultat wurde anschließend experimentell gestätigt [60]. Dies ist einer der größten Erfolge der DFT im Zusammenhang mit der magnetokristallinen Anisotropie und zeigt die Mächtigkeit einer Theorie mit quantitativer Vorhersagekraft auf.

Zusammenfassend kann man sagen, daß für uniaxiale magnetische Systeme mit Anisotropieenergien im meV-Bereich, die *ab initio* Rechnungen heute quantitative Vorhersagekraft erreichen, und daß kubische Systeme bzw. Anisotropien 4-ter Ordnung in der Spin-Bahn-Wechselwirkung nicht befriedigend berechnet werden können. Die Energien liegen im  $\mu\text{eV}$  Bereich und wie oben dargelegt, kommt der Berechnung der Fermioberfläche mit einer riesigen Anzahl von  $k$ -Punkten eine besondere Bedeutung zu. Selbst dann ist nicht klar, ob auf der Energieskala zusätzliche Korrelationseffekte [61, 62] zwischen Elektronen berücksichtigt werden müssen, die normalerweise für die Beschreibung der Elektronen im Festkörper von untergeordneter Bedeutung sind. Somit stellt die genaue Berechnung der Anisotropie auch eine Herausforderung an unser Verständnis und die Beschreibung von Korrelationseffekte von Elektronen im Festkörper da, die mit Modell- oder Störungsrechnung nicht sichtbar würden.

## 6 Zusammenfassung

In dieser Vorlesung diskutierten wir die Abhängigkeit der Energie, der mechanischen Spannungen und Verformungen als Funktion der Richtung der Magnetisierung und erklärten die Abhängigkeit als Folge zweier kleiner relativistischer Korrekturen im Hamiltonoperator der Elektronen: Die Dipol-Dipol-Wechselwirkung und die Spin-Bahn Kopplung. Kleine relativistische Quanteneffekte von Elektronen in magnetischen Systemen führen zu solch

wichtigen Eigenschaften wie die magnetische Anisotropie und Magnetostriktion.

## 7 Schlußwort

In der Diskussion mit jungen Leuten ist mir aufgefallen, daß häufig die spontane Magnetisierung eines Ferromagneten unterhalb  $T_c$  und die Tatsache, daß bei Permanentmagneten die Richtung der Magnetisierung fest mit einer räumlichen Richtung verknüpft ist, gleichgesetzt wird. Natürlich ist die spontane Magnetisierung eine notwendige Bedingung, aber keine hinreichende. Die spontane Magnetisierung ist die Folge der Austauschwechselwirkung, die Orientierung des Spins im Raum ist die Folge kleiner relativistischer Quanteneffekte der Elektronen.

Hämatit ( $\alpha$ - $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ), ein häufiger Zusatz in Mineralien, bietet ein schönes Beispiel sich diesen Unterschied zu vergegenwärtigen. Hämatit ist in erster Näherung ein Antiferromagnet, hat aber ein kleines magnetisches Nettomoment mit einer starken magnetokristallinen Anisotropie. Als die Erde sich abkühlte, durchlief sie die kritische Temperatur des Hämatits und die einsetzende spontane Magnetisierung richtete sich bezüglich dem Erdmagnetfeld zur damaligen Zeit aus. Danach änderte sich das Erdmagnetfeld und die Erdplattentektonik setzte ein. Wegen der starken magnetischen Anisotropie war das Erdmagnetfeld aber nicht mehr in der Lage die Magnetisierungsrichtung von Hämatit zu ändern und deshalb kann man heute Hämatit als "Magnetnadel" zur Untersuchung der Plattentektonik nutzen.

Die meisten Erscheinungen des Alltags und der Technik, mit denen man den Ferromagnetismus in Verbindung bringt, wie z.B. der Kompaßnadel, dem Tonband oder der Floppy Disc, leben von der Kopplung des Spins mit den Richtungen im Ortsraum. Da dieses Problem so wichtig ist, haben sich schon viele Leute intensiv mit diesem Thema beschäftigt, worüber diese Vorlesung einen nur unvollständigen Überblick gibt. Durch die Forschung an ultradünnen Filmen, magnetischen Clustern und Streifen wurde ein neues Kapitel der magnetokristallinen Anisotropie aufgeschlagen, die Welt der niedrigen Dimensionalität und der reduzierten Symmetrie, bei der sich die magnetokristalline Anisotropie um Größenordnungen ändern kann. Zur Zeit etabliert sich mit den modernen Methoden der Elektronentheorie auf der Basis der Dichtefunktionaltheorie unter Berücksichtigung relativistischer Effekte und der Entwicklung genauer und effizienter Rechenmethoden ein neuer theoretischer Zugang zur Beschreibung und ultimativ für das Verständnis der magnetischen Anisotropie und verwandter Phänomene, wie der Magnetostriktion. Die noch jungen Resultate sehen sehr vielversprechend aus. Ich bin gespannt wie sich dieses Gebiet weiterentwickelt.

Ich danke Herrn Daniel Wortmann für das kritische Lesen des Manuskripts.

## 8 Literaturhinweise

Das hier besprochene Thema wird in vielen Lehrbüchern und Übersichtsartikeln der Festkörperphysik abgehandelt. Eine Auswahl wird hier angegeben.

1. R.R. Birss, *Symmetry and Magnetism, Selected Topics in Solid State Physics*, Vol. III, edited by E.P. Wohlfarth, North-Holland, Amsterdam (1964).
2. J.A.C. Bland and B. Heinrich (Eds.), *Ultrathin Magnetic Structures*, Vol. I, II, Springer, Berlin, Heidelberg (1994).
3. P. Bruno and J.P. Renard, *Magnetic Surface Anisotropy of Transition Metal Ultrathin Films*, Appl. Phys. A **49**, 499 (1989).
4. P. Bruno, Physical origins and theoretical models of magnetic anisotropy, in: 24. IFF-Ferienkurs, *Magnetismus von Festkörpern und Grenzflächen*, p. 24.1, Forschungszentrum Jülich GmbH (1993).
5. S. Chikazumi, *Physics of Magnetism*, John Wiley & Sons, New York (1964).
6. B.D. Cullity, *Introduction to Magnetic Materials*, Addison-Wesley, Philippines (1972).
7. J. Kanamori, *Anisotropy and Magnetostriction of Ferromagnetic and Antiferromagnetic Materials*, in: *Magnetism*, Vol. 1, p. 127, edited by G.T. Rado und H. Suhl, Academic Press, New York (1963).
8. A.H. Morrish, *The Physical Principles of Magnetism*, John Wiley & Sons, New York (1983).
9. W. Nolting, *Quantentheorie des Magnetismus*, Band 1 und 2, Teubner, Stuttgart (1986).
10. L. Pareti and A. Paoluzi, *Magnetic Anisotropy*, in: *Magnetic Properties of Matter*, edited by G. Asti, D. Fiorani and F. Lucari, World Scientific, Singapore (1991).

# Literatur

- [\*] Elektronische Adresse: [s.bluegel@fz-juelich.de](mailto:s.bluegel@fz-juelich.de)  
Internetadresse : <http://www.kfa-juelich.de/iff/personen/S.Bluegel>
- [1] J.H. van Vleck, *Phys. Rev.* **52**, 1178 (1937).
- [2] H. Brooks, *Phys. Rev.* **58**, 909 (1940).
- [3] G.C. Fletcher, *Proc. Roy. Soc.* **67A**, 505 (1954).
- [4] L. Néel, *J. Phys. Rad.* **15**, 225 (1954).
- [5] M. Bander, und D.L. Mills, *Phys. Rev. B* **38**, 12015 (1988).
- [6] N.S. Akulov, *Z. Physik* **57**, 249 (1929); *ibid.* **69**, 78 (1931).
- [7] K. Honda und S. Kaya, *Sci. Reports Tohoku Univ.* **15**, 721 (1926).
- [8] S. Kaya, *Sci. Reports Tohoku Univ.* **17**, 639 (1928).
- [9] S. Kaya, *Sci. Reports Tohoku Univ.* **17**, 1157 (1928).
- [10] P. Escudier, *Ann. Phys. (Paris)* **9**, 125 (1975).
- [11] J.P. Rebouillat, *IEEE Trans. Magn.* **8**, 630 (1972).
- [12] D.M. Paige, B. Szpunar, and B.K. Tanner, *J. Magn. Magn. Mater.* **44**, 239 (1984).
- [13] R. Pauthenet, *J. Appl. Phys.* **53**, 8187 (1982).
- [14] H.B. Callen and E. Callen, *J. Phys. Chem. Solids* **27**, 1271 (1966).
- [15] F.J.A. den Broeder, W. Hoving, P.J.H. Bloemen, *J. Magn. Magn. Mater.* **93**, 562 (1991).
- [16] C. Chappert and P. Bruno, *J. Appl. Phys.* **64**, 5736 (1988).
- [17] W.P. Mason, *Phys. Rev.* **82**, 715 (1951).
- [18] R. Kimura und K. Ohno, *Sci. Rep. Tohoku Univ.* **23**, 359 (1934).
- [19] H.J. McSkimin, *J. Appl. Phys.* **26**, 406 (1955).
- [20] R.M. Bozorth, W.P. Mason, J.H. McSkimin und J.G. Walker *Phys. Rev.* **75**, 1954 (1949).
- [21] N.S. Akulov, *Z. Physik* **52**, 389 (1982).
- [22] R. Becker, *Z. Physik* **62**, 253 (1930).

- [23] F.C. Powell, Proc. Cambridge Phil. Soc. **27**, 561 (1931).
- [24] E.W. Lee, Rept. Prog. Phys. **18**, 184 (1955).
- [25] C. Kittel, Rev. Mod. Phys., **21**, 541 (1949).
- [26] F. Lichtenberger, Ann. Physik **10**, 45 (1932).
- [27] R.M. Bozorth, Phys. Rev. **96**, 311 (1954).
- [28] R. Gersdorf, Doktorarbeit RWTH-Aachen (1961), unveröffentlicht.
- [29] A. Hubert, W. Unger, und J. Kranz, Z. Phys. **224**, 148 (1969).
- [30] D.I. Bower, Proc. Roy. Soc. **A326**, 87 (1971).
- [31] V. Heine, W.C. Kok, and C.M.M. Nex, J. Magn. Magn. Mater. **43**, 61 (1984).
- [32] E. Tatsumoto, and T. Okamoto, J. Phys. Soc. Japan **14**, 1588 (1959).
- [33] O. Hjortstam, Doktorarbeit, Universität Uppsala (1997).
- [34] G. Bochi, C.A. Ballentine, H.E. Inglefield, C.V. Thompson, and R.C. O'Handley, Phys. Rev. B **53**, R1729 (1996).
- [35] R. Wu and A.J. Freeman, J. Appl. Phys. **79**, 6209 (1996).
- [36] O. Hjortstam, K. Baberschke, J.M. Wills, B. Johannson, and O. Eriksson, Phys. Rev. B **55**, 15026 (1996).
- [37] A.B. Shick, D.L. Novikov, A.J. Freeman, Phys. Rev. B **56**, R14259 (1997); A.B. Shick, D.L. Novikov, A.J. Freeman, J. of Appl. Phys. **83**, 7258 (1998).
- [38] M.V. Ramana, und A.K. Rajagopal, Adv. Chem. Phys. **54**, 231 (1983).
- [39] H.J.F. Jansen, Phys. Rev. B **38**, 8022 (1988).
- [40] J.B. Staunton, Rept. on Progress in Physics **57**, 1289 (1994).
- [41] B.R.A. Nijboer und F.W. De Wette, Physica (Amsterdam) **23**, 309 (1957); B.R.A. Nijboer und F.W. De Wette, Physica (Amsterdam) **24**, 422 (1958); F.S. Ham und B. Segall, Phys. Rev. B **124**, 1786 (1961).
- [42] H.J.G. Draaisma und W.J.M. de Jonge, J. Appl. Phys. **64**, 3610 (1988).
- [43] *Landolt-Börnstein, New Series*, Vol. III/19a, edited by H.P.J. Wein (Springer, Berlin 1988).
- [44] G.H.O. Daalderop, P.J. Kelly, and M.F.H. Schuurmans, Phys. Rev. B **41**, 11919 (1990).

- [45] M.E. Rose, *Relativistic Electron Theory*, (Wiley, New York, 1961).
- [46] A.R. Macintosh and O.K. Andersen, in *Electrons at the Fermi Surface*, p. 149, edited by Springford, Cambridge University Press, Cambridge (1980).
- [47] I.V. Solovyev, P.H. Dederichs und I. Mertig, *Phys. Rev. B* **52**, 13419 (1995).
- [48] E.P. Wohlfarth, in *Ferromagnetic Materials*, Vol. 1, p. 1, editiert durch E.P. Wohlfarth, North-Holland, Amsterdam (1980).
- [49] P. Bruno, Physical origins and theoretical models of magnetic anisotropy, in: 24. IFF-Ferienkurs, *Magnetismus von Festkörpern und Grenzflächen*, p. 24.1, Forschungszentrum Jülich GmbH (1993).
- [50] E.I. Kondorskii und E. Straube, *Soviet Physics JETP* **36**, 188 (1973).
- [51] G.Y. Guo, W.M. Temmerman, und H. Ebert, *Physica B* **172**, 61 (1991).
- [52] O. Hjortstam, P. James, L. Nordström, B. Johansson, J.M. Wills, und O. Eriksson, eingereicht zur Publikation in *Phys. Rev. B*.
- [53] V. Heine und J.H. Samson, *J. Phys. F* **10**, 2609 (1980); V. Heine und J.H. Samson, *J. Phys. F* **13**, 2155 (1983).
- [54] P. Bruno, *Phys. Rev. B.* **39**, 865 (1989).
- [55] Š. Pick, und H. Dreysse, *Phys. Rev. B* **46**, 5802 (1992).
- [56] X. Nie und S. Blügel, wird veröffentlicht.
- [57] X. Nie, A. Shick, L. Szunyogh und S. Blügel wird veröffentlicht.
- [58] F.J.A. den Broeder, D. Kuiper, H.C. Donkersloot, W. Hoving, *Appl. Phys. A* **49**, 507 (1989).
- [59] C.J. Lin *et al.*, *J. Magn. Magn. Mater.* **93**, 194 (1991).
- [60] G.H.O. Daalderop, P.J. Kelly, and F.J.A. den Broeder, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 682 (1992).
- [61] O. Eriksson, M.S.S. Books, and B. Johansson, *Phys. Rev. B* **41**, 7311 (1990).
- [62] I.V. Solovyev, A.I. Liechtenstein, and K. Terakura, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5758 (1998).