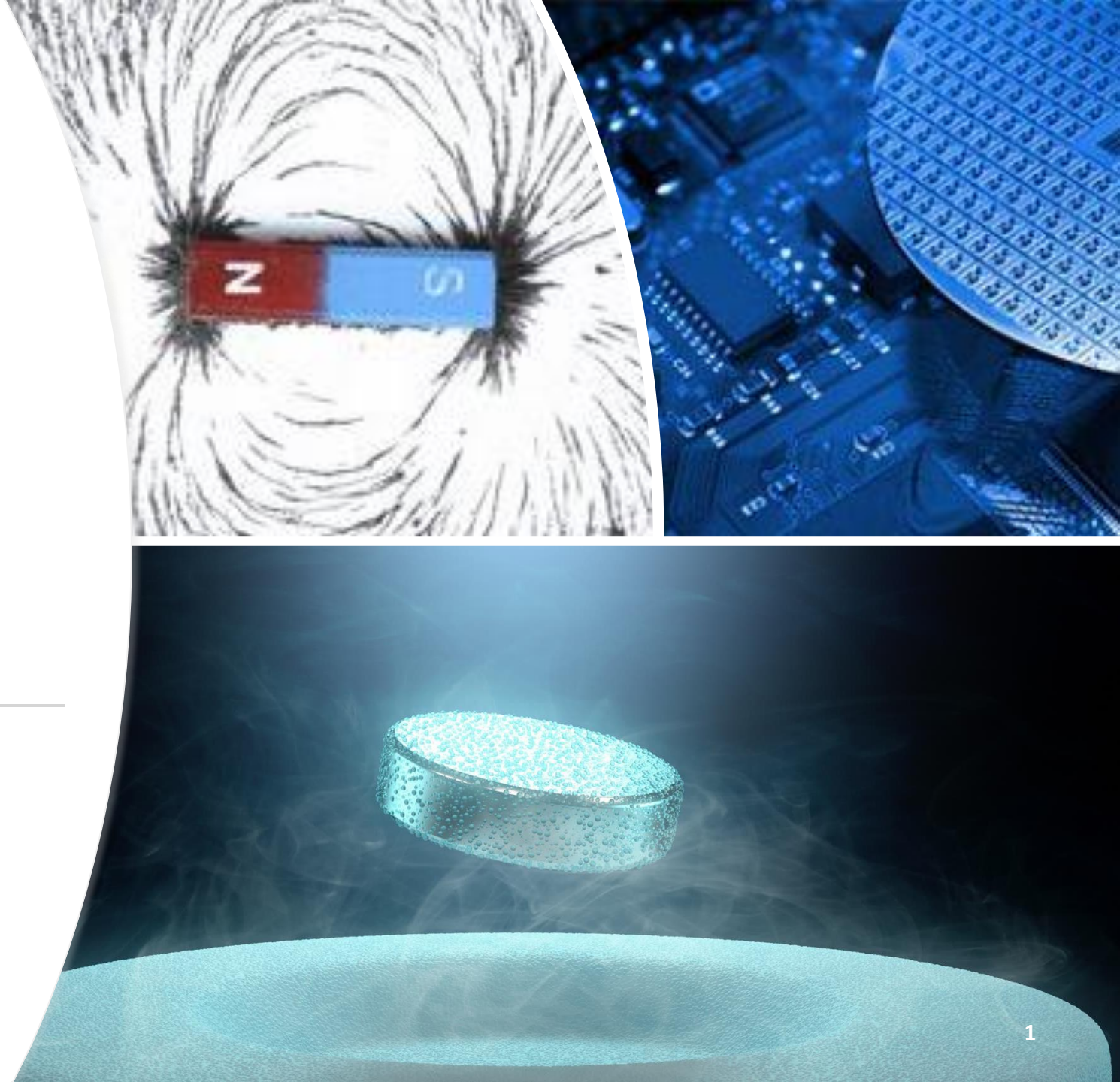




Moderne Experimentalphysik III

Experimentelle Festkörperphysik

M-PHYS-106295, SoSe 2024



- Atome im magnetischen Feld
- Hund'sche Regeln

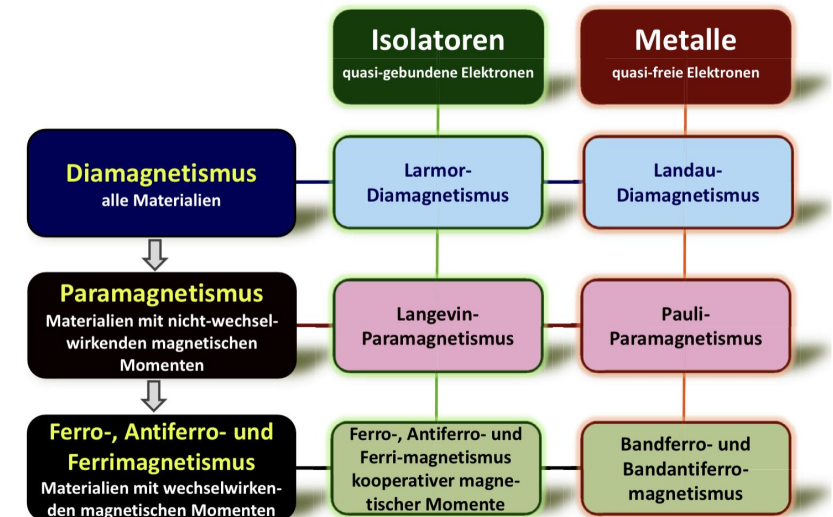
- $$\Delta\mathcal{H} = \frac{\mu_B}{\hbar} (L_z + g_S S_z) B_z + \frac{e^2 B_z^2}{8m} \sum_i (x_i^2 + y_i^2)$$

$$\Delta E_n = \langle n | \Delta \mathcal{H} | n \rangle + \sum_{n \neq n'} \frac{|\langle n | \Delta \mathcal{H} | n' \rangle|^2}{E_n - E_{n'}}$$

$$\Delta E_n = \frac{\mu_B B_z}{\hbar} \langle n | L_z + g_s S_z | n \rangle + \frac{\mu_B^2 B_z^2}{\hbar^2} \sum_{n \neq n'} \frac{|\langle n | L_z + g_s S_z | n' \rangle|^2}{E_n - E_{n'}} + \frac{e^2 B_z^2}{8m} \langle n | \sum_i (x_i^2 + y_i^2) | n \rangle$$

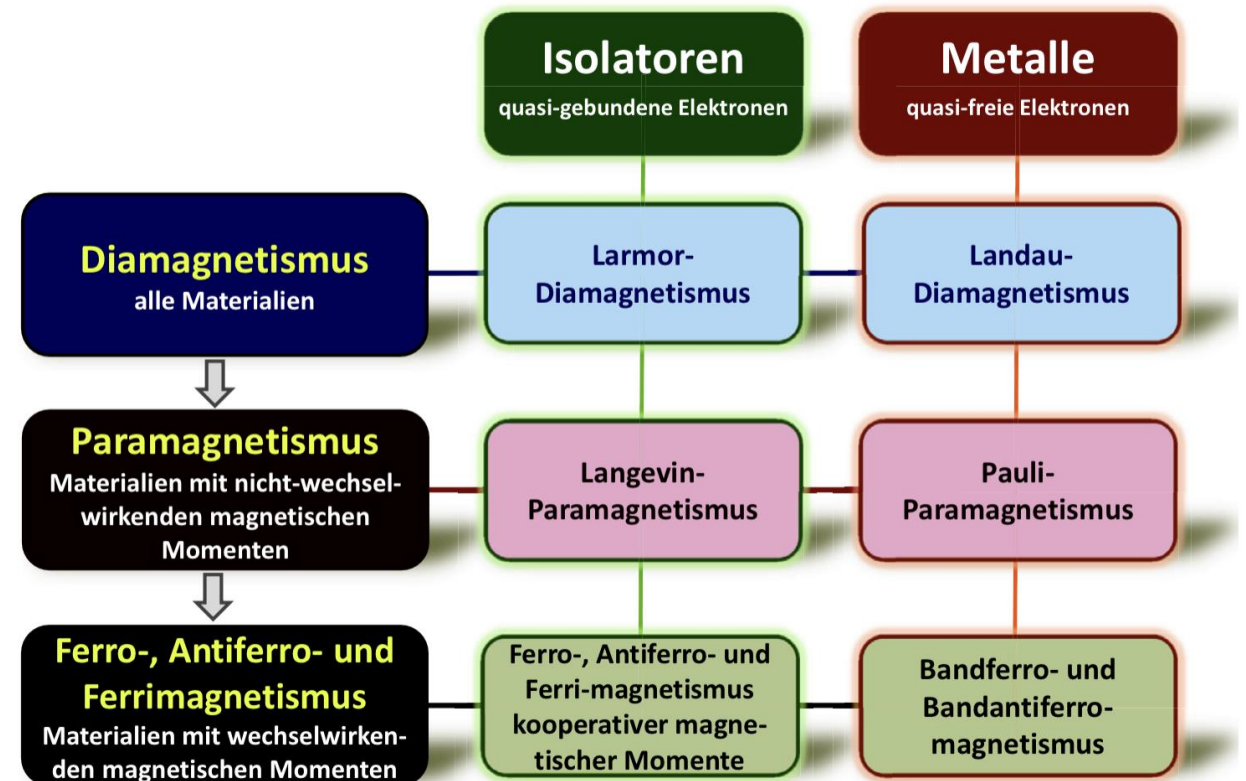
Larmor-Diamagnetismus

- I. **Maximierung von S:**
Minimierung der Coulomb-Abstoßung: fol
gleichem Ort sein
- II. **Maximierung von L:**
Reduktion der Coulomb-Energie durch gle
bei halber Füllung liegt $L = 0$ vor (wegen I
- III. **Kopplung von L und S zu J:**
Minimierung der Spin-Bahn-WW:



Lernziele

- Magnetisierungskurven
- Curie Gesetz
- Pauli Paramagnetismus



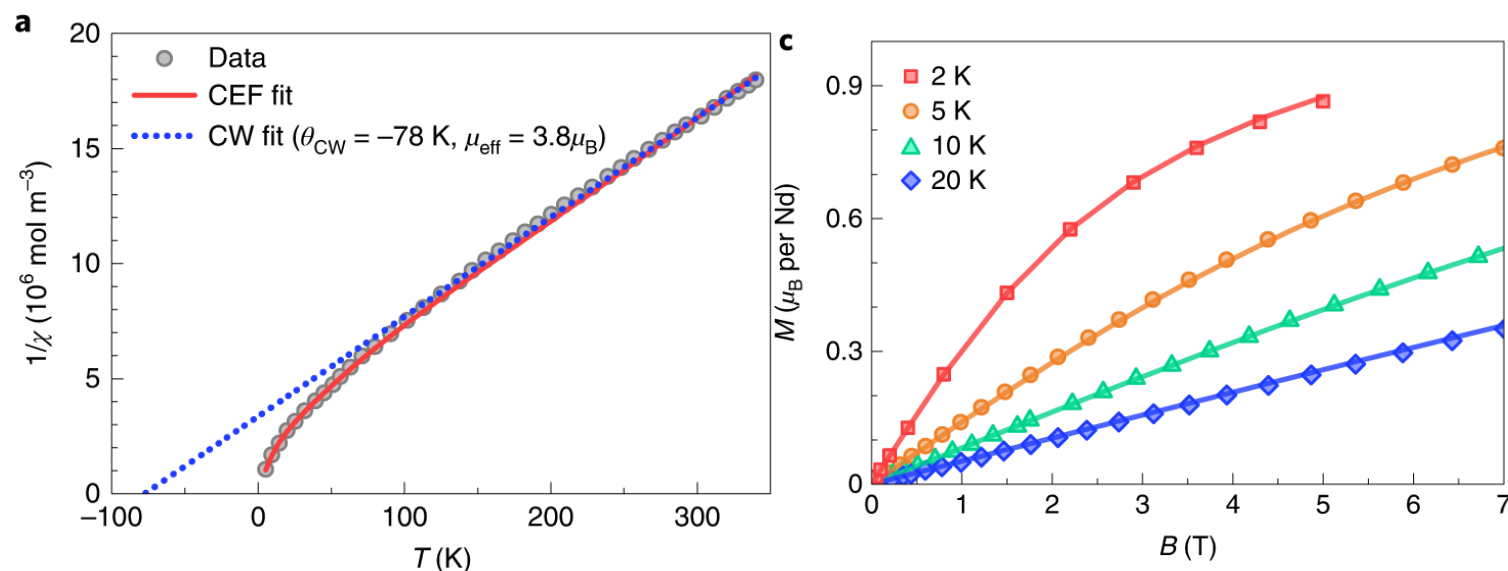
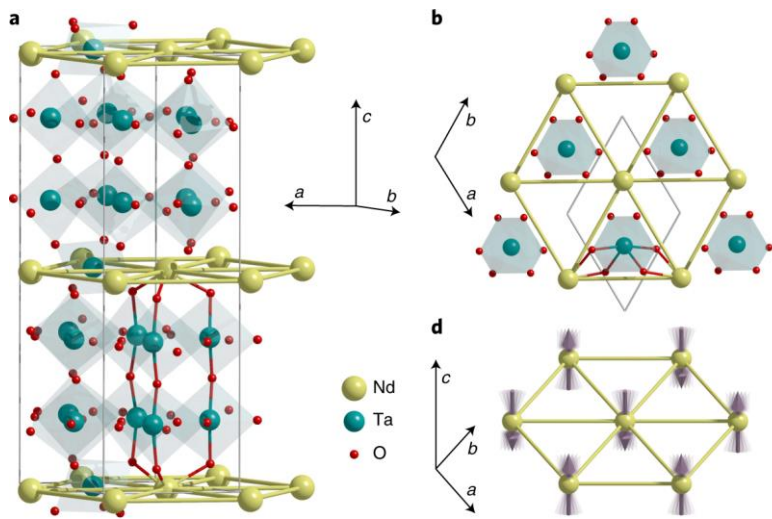
Curie-Gesetz

The Ising triangular-lattice antiferromagnet neodymium heptatantalate as a quantum spin liquid candidate

T. Arh, B. Sana, M. Pregelj, P. Khuntia, Z. Jagličić, M. D. Le, P. K. Biswas, P. Manuel, L. Mangin-Thro, A. Ozarowski & A. Zorko

Nature Materials (2021) | [Cite this article](#)

944 Accesses | 3 Altmetric | [Metrics](#)



Methods

The obtained χ was compared to the CW model $\chi = C/(T - \theta_{\text{CW}})$ in different temperature regions. Here θ_{CW} is the CW temperature and the Curie constant is given by $C = N_A \mu_0 \mu_{\text{eff}}^2 / (3k_B)$, with N_A , k_B and μ_{eff} being the Avogadro number, the Boltzmann constant and an effective magnetic moment, respectively. The CW fit in the high-temperature region above 100 K (Fig. 2a) yields the CW temperature $\theta_{\text{CW}}^{\text{h}} = -78(4)$ K and the effective moment $\mu_{\text{eff}}^{\text{h}} = 3.8(1)\mu_B$. The latter is close to the value $g_J \sqrt{J(J+1)}\mu_B = 3.62\mu_B$ expected for a free $4f_{9/2}$ Nd³⁺ ion. The fit with the same model

Curie-Gesetz

Atomare Paramagnete (Langevin Paramagnetismus)

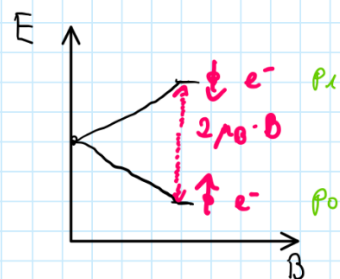
- z.B. SE oder iM in einem Isolator (NaCl, MgO)
- Magnetische Molekül
- Farbzentren (Nitrogen-Vacancy in Diamond)

$\Rightarrow$ **kein Leitungselektronen**

$$E = \mu_B \cdot \vec{B} (\vec{L} + g \cdot \vec{S}) / \hbar = \underbrace{g_2 \cdot \mu_B}_{\mu_{\text{eff}}} \cdot \frac{\vec{S}}{\hbar} \cdot \vec{B}$$

- Eigenzustände für ein Spin- $\frac{1}{2}$ System an

$$J = S = \frac{1}{2} \Rightarrow m_J = \pm \frac{1}{2}$$



$$p_0 + p_1 = 1 \quad \frac{p_1}{p_0} = \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)$$

$$\langle m_J \rangle = \overset{\mu_B}{m_{1/2}} \cdot p_0 + \overset{-\mu_B}{m_{-1/2}} \cdot p_1$$

$$\Rightarrow p_0 = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad p_1 = \frac{e^{-x}}{1 + e^{-x}}$$

$$\langle m_J \rangle = \mu_B (p_0 - p_1) = \mu_B \frac{1 - e^{-x}}{1 + e^{-x}} = \mu_B \frac{e^{x/2}}{e^{x/2} + e^{-x/2}} \cdot \frac{e^{x/2} - e^{-x/2}}{e^{x/2} + e^{-x/2}}$$

$$= \mu_B \cdot \tanh\left(\frac{x}{2}\right) = \mu_B \cdot \tanh\left(\frac{\mu_B \cdot B}{k_B T}\right)$$

$$k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} \\ = 86 \text{ } \mu\text{eV/K}$$

Allgemein

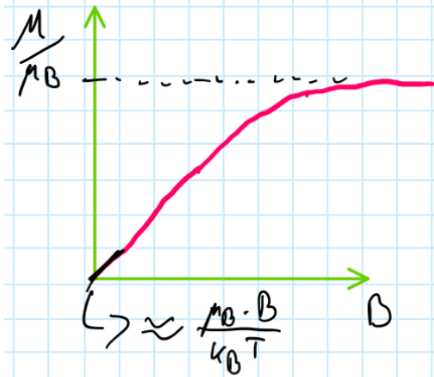
- Freie Energie $F = U - T \cdot S = \dots = -k_B T \cdot \ln(Z)$ p. 669

$$Z = \sum_n \exp\left(\frac{-E_n}{k_B T}\right)$$

$$\rightarrow \text{Magnetisierung: } M := \langle m \rangle = - \frac{\partial F}{\partial B}$$

Curie-Gesetz

→ Magnetisierung: $M := \langle m \rangle = - \frac{\partial F}{\partial B}$



Suszeptibilität

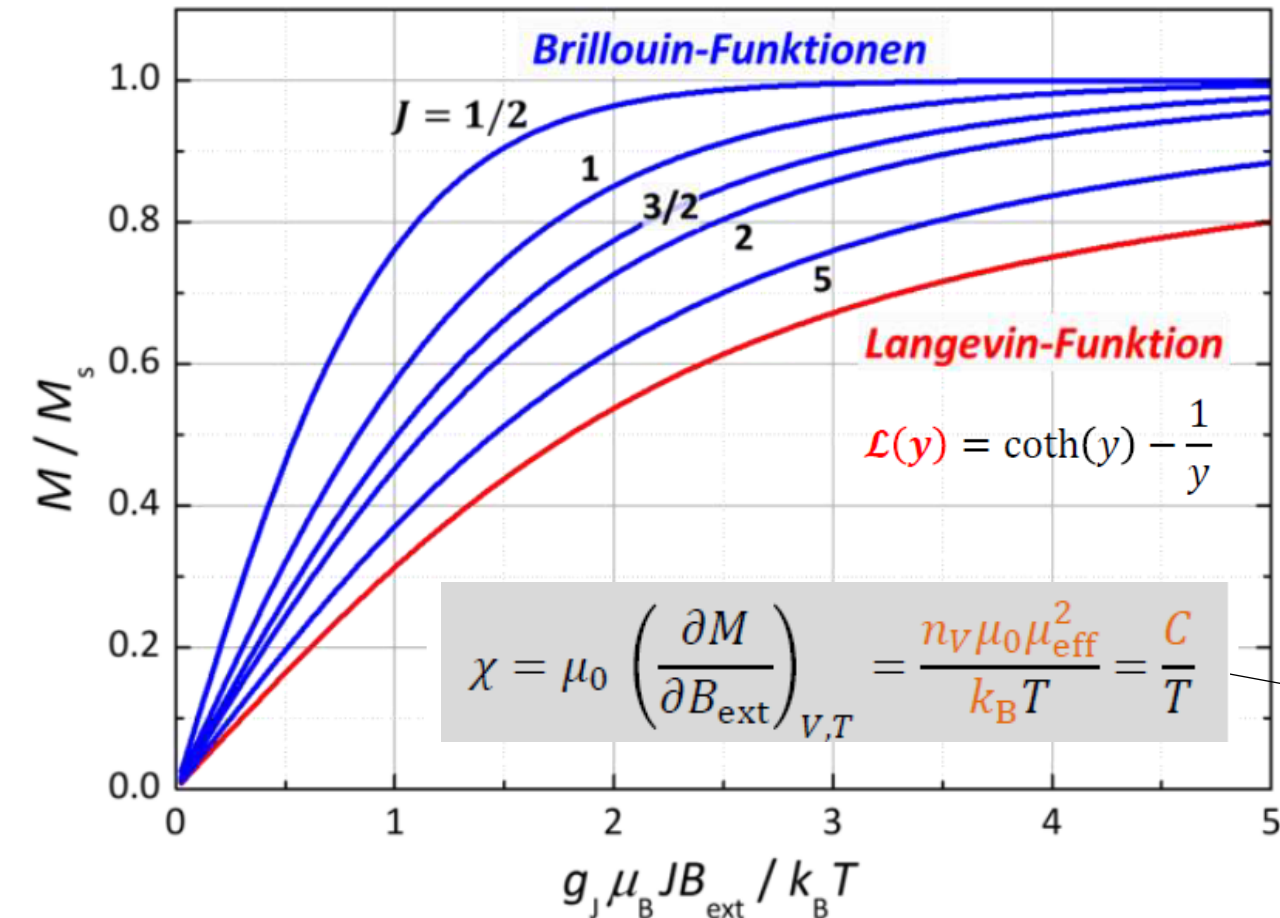
$$\chi = \mu_0 \cdot \left(\frac{\partial M}{\partial B} \right)_{T, V} \approx \frac{\mu_0 \cdot \mu_B^2}{k_B T} = \frac{C}{T}$$

Note: A green arrow points to the term $\mu_0 \cdot \mu_B^2 / (k_B T)$ in the equation, with the label $\mu_0 \cdot B / (k_B T) \ll 1$.

Curie-Gesetz

Magnetisierungskurven

- Langevin-Funktion $\mathcal{L}(y)$ und Brillouin-Funktionen $B_J(y)$



Wichtig:

$x \simeq 0,002$ @ $J = \frac{1}{2}$, $B_{\text{ext}} = 1 \text{ T}$, $T = 300 \text{ K}$

- ➔ bei RT befindet man sich immer im linearen Bereich der Brillouin-Funktionen
- ➔ volle Aufnahme der Brillouin-Funktionen erfordert hohe Magnetfelder und niedrige Temperaturen
- ➔ Curie-Gesetz gilt nur im linearen Bereich



Magnetisierungskurven

Allgemeines Curie-Gesetz:

effektive Magnetonenzahl $p = g_J \sqrt{J(J+1)}$

$$\chi = \mu_0 \left(\frac{\partial M}{\partial B_{\text{ext}}} \right)_{T,V} = \frac{\mu_0 n J(J+1) g_J^2 \mu_B^2}{3 k_B T} = \frac{C}{T}$$

$$C = \frac{\mu_0 n J(J+1) g_J^2 \mu_B^2}{3 k_B} = \frac{\mu_0 n p^2 \mu_B^2}{3 k_B} = \frac{\mu_0 n \mu_{\text{eff}}^2}{3 k_B}$$

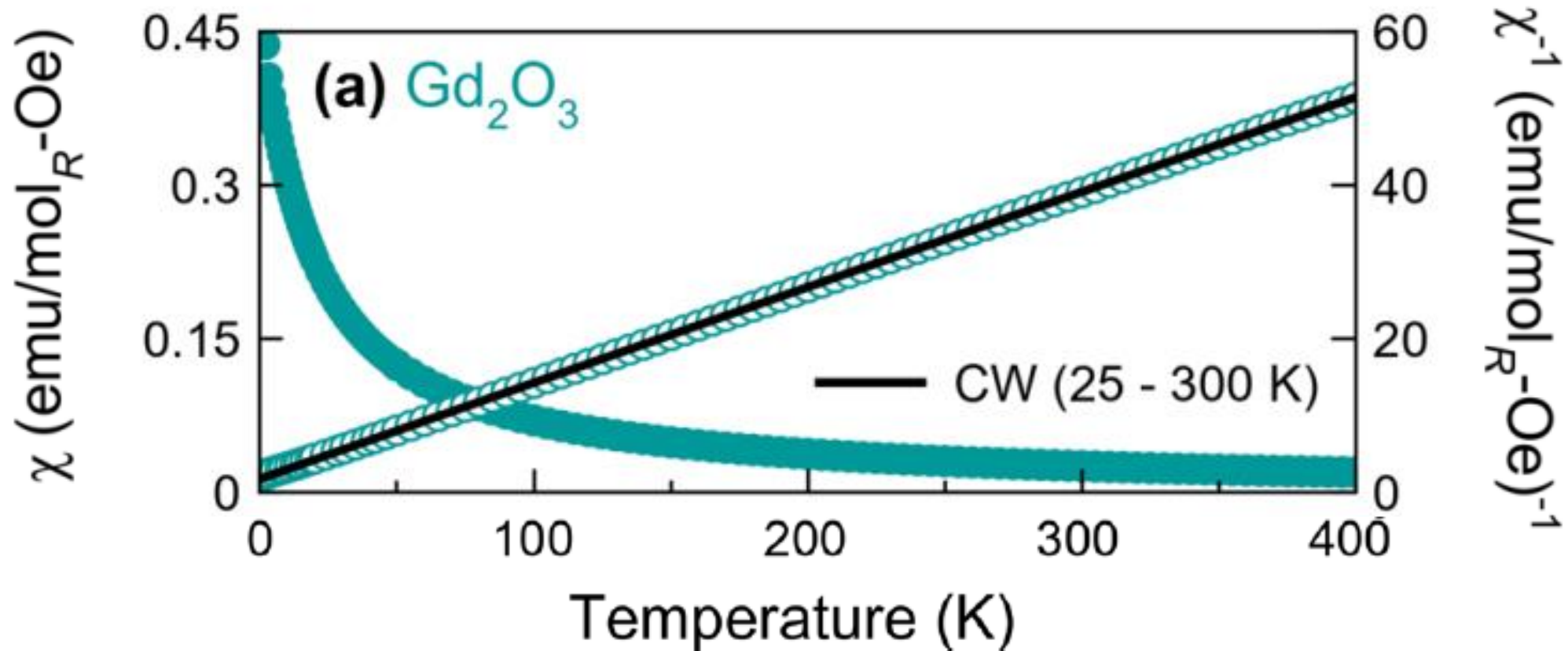
Allgemeiner Fall: Brillouin-Funktion

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

$$M_s = n g_J \mu_B J$$

$$y = xJ = \frac{g_J \mu_B J B_{\text{ext}}}{k_B T}$$

Curie-Gesetz

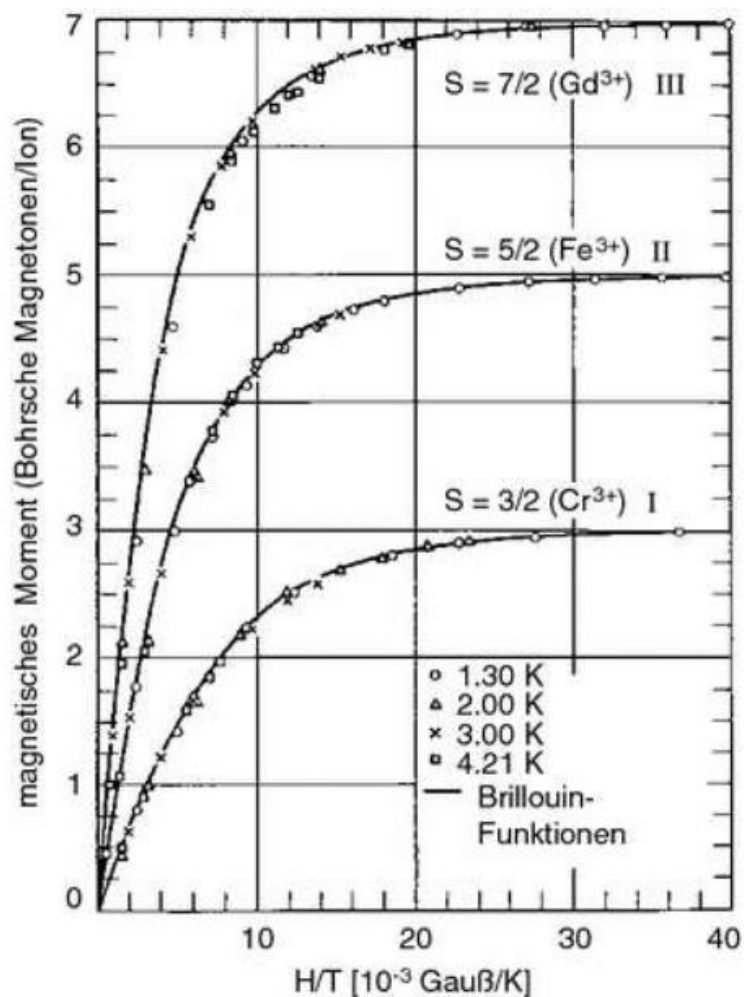


Sam Mugiraneza, Tutorial: a beginner's guide to interpreting magnetic susceptibility data with the Curie-Weiss law

<https://www.nature.com/articles/s42005-022-00853-y>

Saturierungs-Magnetisierung

- Brillouin-Funktionen



Gadolinium-Sulfat-Oktahydrat
 $S = \frac{7}{2}, L = 0, J = \frac{7}{2}, g_J = 2$

Eisen-III-Alaun
 $S = \frac{5}{2}, L = 0, J = \frac{5}{2}, g_J = 2$

Kalium-Chrom-Alaun
 $S = \frac{3}{2}, J = \frac{3}{2}, g_J = 2$
 L ist gequentscht



KCr(SO4)2

Bestimmung von J bzw. S durch Messung der Brillouin-Funktion

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

Sättigungsmagnetisierung:

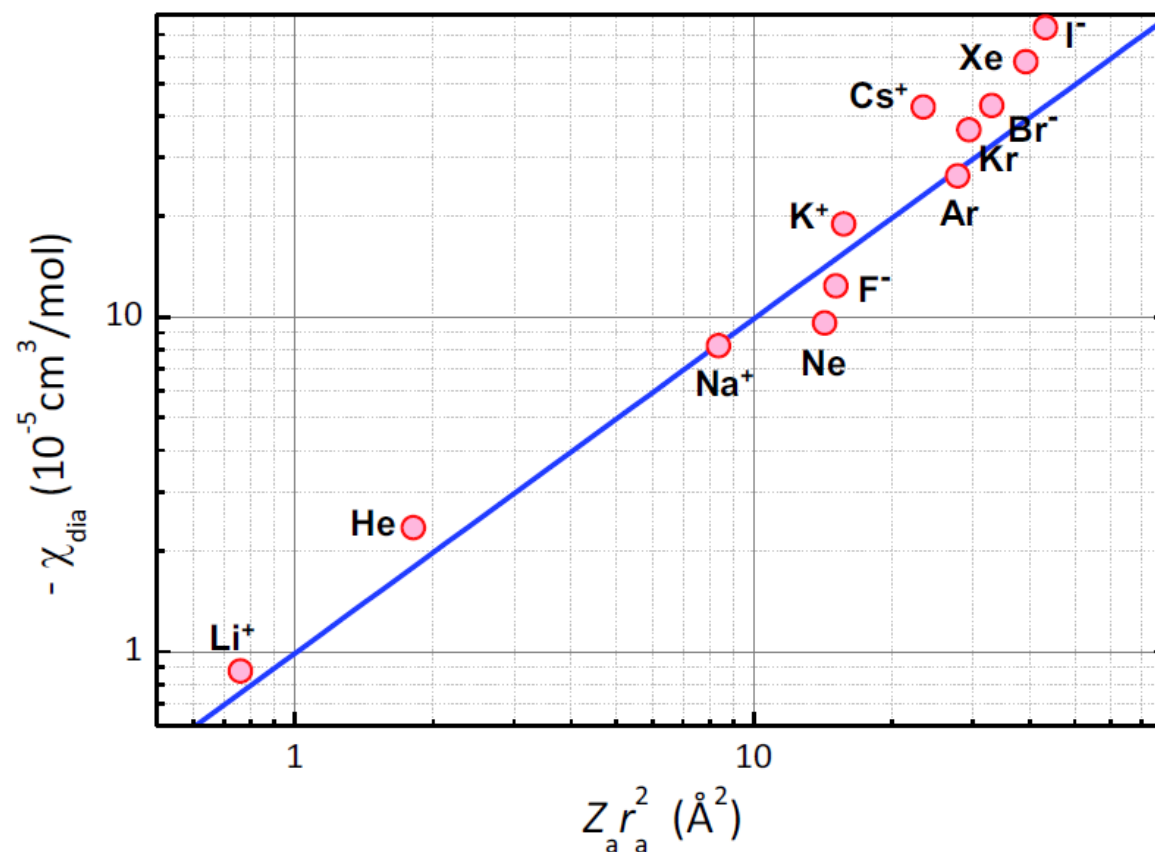
$$M_s = n g_J \mu_B J \qquad y = xJ = \frac{g_J \mu_B J B_{\text{ext}}}{k_B T}$$



Diamagnetismus

- Molare magnetische Suszeptibilität von einigen Atomen und Ionen mit Edalgaskonfiguration

$$\Delta E_n = \frac{e^2 B_z^2}{8m} \langle n | \sum_i (x_i^2 + y_i^2) | n \rangle$$



Magnetismus von Leitungselektronen

Welche Beiträge müssen wir in Metallen berücksichtigen?

Magnetismus der freien Leitungselektronen

- **Landau-Diamagnetismus**: Änderung der Energie durch Umbesetzung der Elektronen auf Landau-Zylinder
- **Pauli-Paramagnetismus**: Änderung der Energie durch Spin-Aufspaltung in B_{ext}

$$E_n = \underbrace{\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2}_{\text{Bahnbewegung}} \pm \underbrace{\mu_B B_{\text{ext}}}_{\text{Spin}}$$

$$\mu_s = -g_s \mu_B m_s \simeq \mp \mu_B$$

mit $g_s \simeq 2, m_s = \pm 1/2$

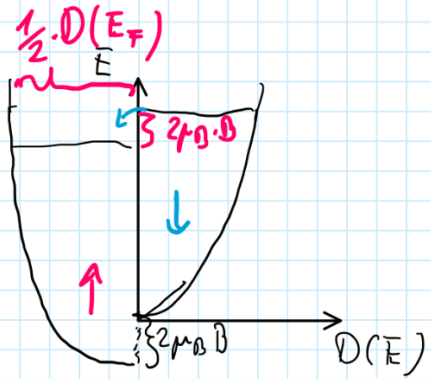
$$\mathcal{F} = U - TS \simeq U$$

$$M = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial B_{\text{ext}}} \right)_{V,T}$$

$$\chi = \mu_0 \left(\frac{\partial M}{\partial B_{\text{ext}}} \right)_{V,T} = -\frac{\mu_0}{V} \left(\frac{\partial^2 M}{\partial B_{\text{ext}}^2} \right)_{V,T}$$

Pauli Paramagnetismus

Pauli-Paramagnetismus



$$M = (n_+ - n_-) \cdot \mu_B = \frac{N_+ - N_-}{V} \cdot \mu_B$$

$$\approx \frac{\frac{1}{2} \cdot 2 \cdot \mu_B \cdot B \cdot D(E_F)}{V} \cdot \mu_B$$

$$= \frac{\mu_B^2 \cdot B}{V} \cdot D(E_F)$$

- Zustandsdichte von einem freien e-gas:

$$D(E_F) = \frac{3}{2} \cdot \frac{n \cdot V}{k_B \cdot T_F} \quad E_F = k_B \cdot T_F$$

$$M = \frac{3}{2} \cdot \frac{\mu_B^2 \cdot B}{k_B T_F} \cdot n$$

$$\chi_P = \mu_0 \left(\frac{\partial M}{\partial B} \right) = \mu_0 \cdot \mu_B^2 \cdot \frac{D(E_F)}{V} = n \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{\mu_0 \cdot \mu_B^2}{k_B T_F}$$

Pauli - Suszeptibilität

Pauli-Paramagnetismus

- Wie groß ist $n_+ - n_-$ und damit M ?

a) **Getrennte Spin- $\uparrow$ und Spin- $\downarrow$ Systeme:**

Energieverschiebung um $\pm\mu_B B_{\text{ext}}$

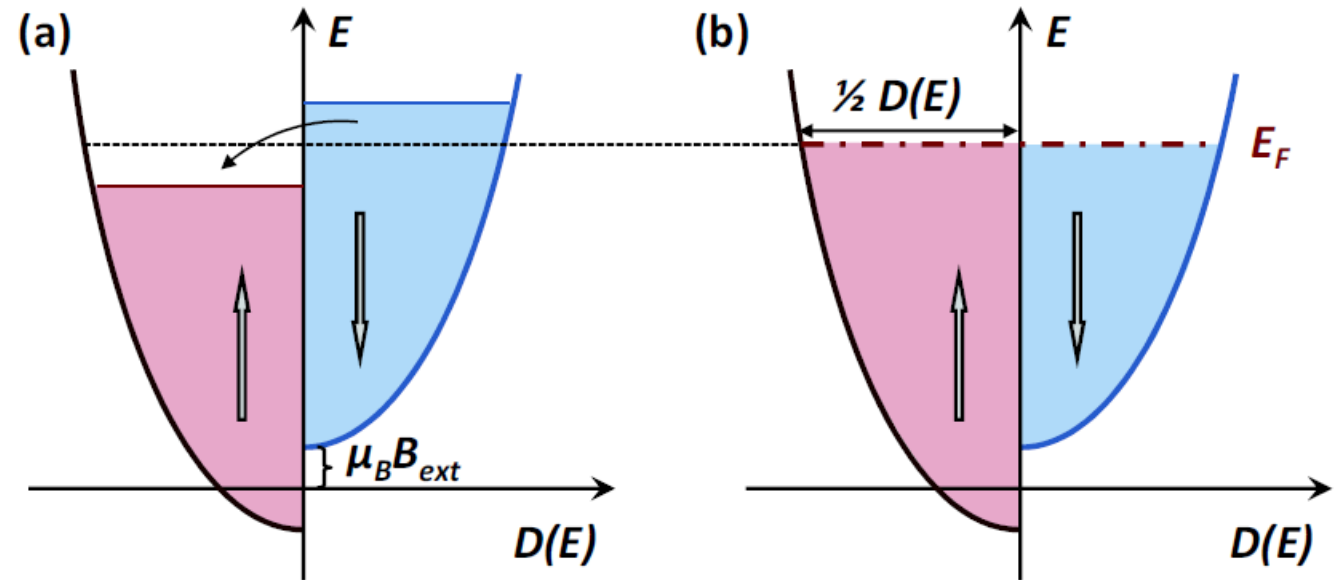
b) **Spin- $\uparrow$ und Spin- $\downarrow$ System im thermischen Gleichgewicht (bei $T = 0$):**

$\mu = E_F$ muss für beide Subsysteme gleich sein

➔ Umverlagerung von Spin- $\uparrow$ in Spin- $\downarrow$ Zustände

$$n_+ = \frac{1}{2V} \int_0^{\infty} D(E + \mu_B B_{\text{ext}}) f(E) dE$$

$$n_- = \frac{1}{2V} \int_0^{\infty} D(E - \mu_B B_{\text{ext}}) f(E) dE$$



Faktor $\frac{1}{2}$ berücksichtigt die Tatsache, dass wir nur eine Spin-Sorte betrachten

Pauli-Paramagnetismus

- **Magnetisierung M von freiem Elektronengas**

- für freie Elektronen gilt: $D(E_F) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_F} = \frac{3}{2} \frac{nV}{k_B T_F}$

$$\Rightarrow M = \frac{\mu_B^2 B_{\text{ext}}}{V} D(E_F) = \frac{3n\mu_B^2 B_{\text{ext}}}{2k_B T_F}$$

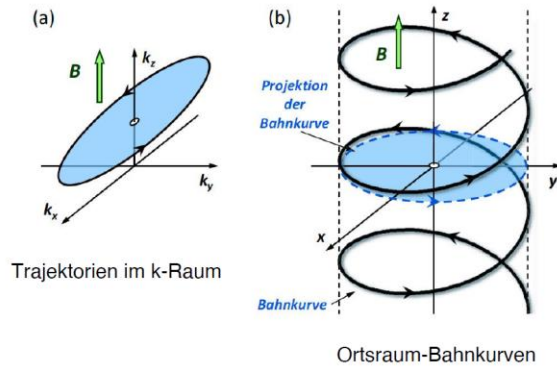
$$\Rightarrow \chi_P = \mu_0 \left(\frac{\partial M}{\partial B_{\text{ext}}} \right)_{V,T} = \frac{3n\mu_0\mu_B^2}{2k_B T_F} = \frac{C}{T} \frac{T}{T_F}$$

Paulische Spin-Suszeptibilität

- Curie-Konstante ist fast gleich wie diejenige eines Spin-1/2 Systems gebundener Elektronen: $C = \frac{n\mu_0\mu_B^2}{3k_B}$
- Paulische Spin-Suszeptibilität ist um Faktor T/T_F kleiner als diejenige von System gebundener Elektronen
 - ➔ nur der kleine Anteil T/T_F aller Elektronen in der Nähe der Fermi-Energie kann Spin-Richtung ändern
 - ➔ durch zusätzlichen Faktor T/T_F wird χ_P temperaturunabhängig

Landau-Diamagnetismus

Semiklassische Bewegung im homogenen Magnetfeld



Trajektorien im k-Raum

Ortsraum-Bahnkurven

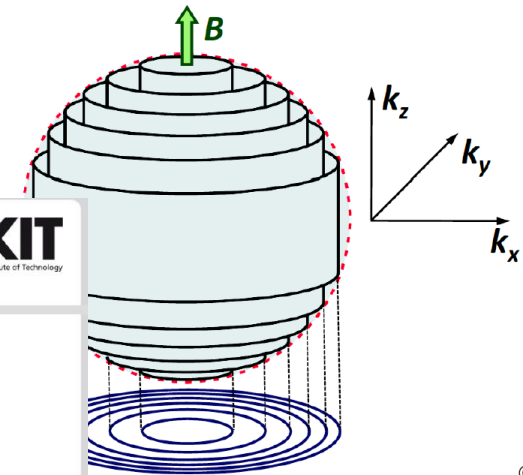
© Gross und Marx

Alexey Ustinov

Moderne Experimentalphysik II

- Landau-Levels: Elektronen werden auf Kreisbahnen gezwungen.

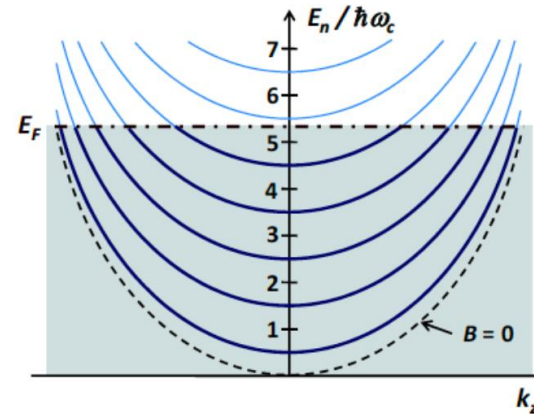
Landau-Zylinder für freie Elektronen



© Gross und Marx

Moderne Experimentalphysik II

Elektronenenergie im Magnetfeld



© Gross und Marx

Alexey Ustinov

Moderne Experimentalphysik II

Landau-Diamagnetismus

Bahn-Quantisierung

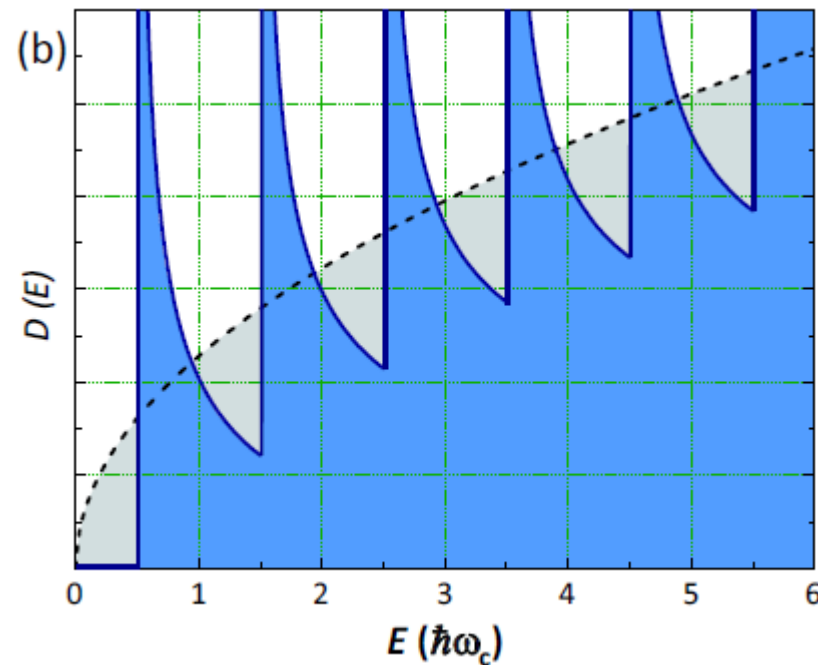
$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right)^2 \Psi = E \Psi .$$



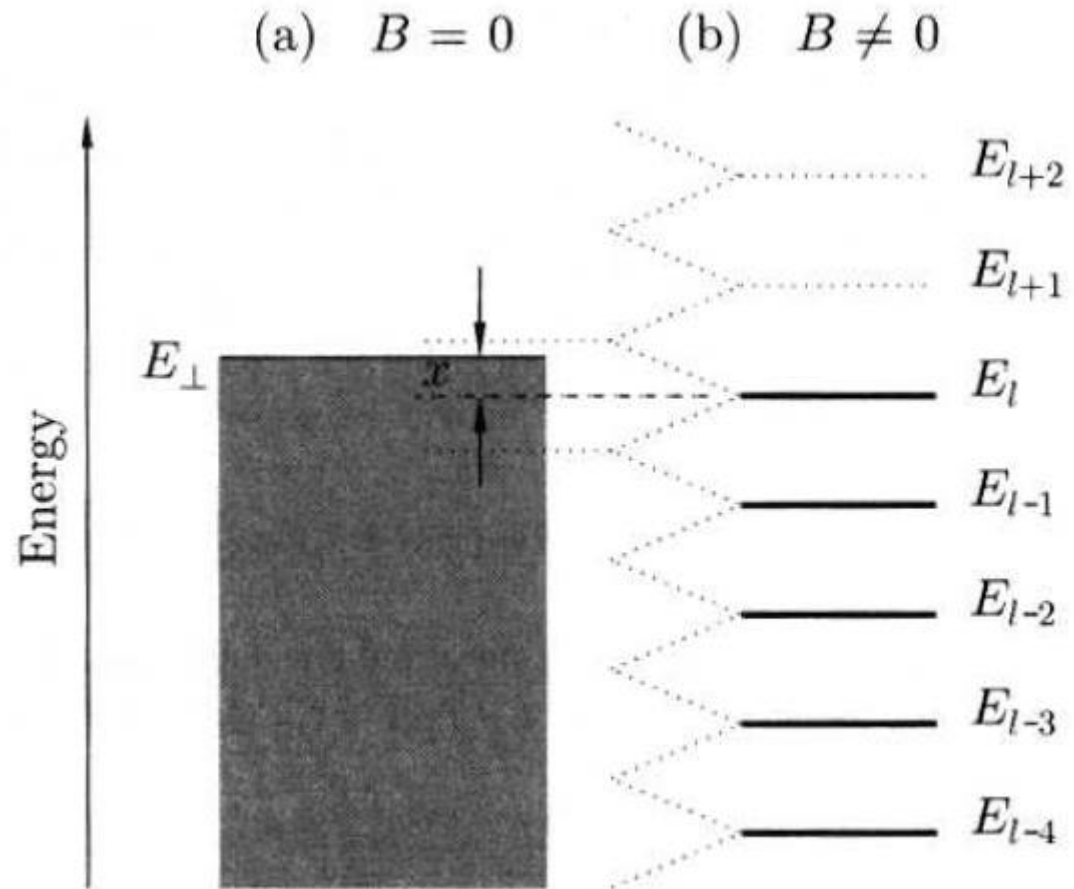
$$E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = (0, 0, B)$$

$$\omega_c = \frac{eB}{m}$$



Landau-Diamagnetismus



- Elektronen werden in einen günstigeren Energie-Zustand umsortiert

→ “ dE/dB ”

Magnetismus von Leitungselektronen

- für freies Elektronengas

$$\chi_L = -\frac{1}{3} \chi_P, \quad \chi = \chi_L + \chi_P = \frac{n\mu_0\mu_B^2}{k_B T_F}$$

hierzu kommt aber noch der Diamagnetismus der gebundenen Elektronen der Ionenrümpfe (Edelgaskonfiguration) hinzu

→ *Metalle können sowohl diamagnetisch (z.B. Cu, Ag, Au) als auch paramagnetisch (z.B. Li, Na, K, Rb) sein*

Material	χ_m [cm ³ /g]	χ_v unitless	μ unitless	Type of magnetism
Bi	-1.34×10^{-6}	-13.13×10^{-6}	0.99983	diamagnetisch
Be	-1.0×10^{-6}	-1.85×10^{-6}	0.99998	
Ag	-0.192×10^{-6}	-2.016×10^{-6}	0.99997	
Au	-0.142×10^{-6}	-2.74×10^{-6}	0.99996	
Ge	-0.106×10^{-6}	-0.564×10^{-6}	0.99999	
Cu	-0.086×10^{-6}	-0.77×10^{-6}	0.99999	
Sn β	$+0.026 \times 10^{-6}$	$+0.19 \times 10^{-6}$	1	paramagnetisch
W	$+0.32 \times 10^{-6}$	$+6.18 \times 10^{-6}$	1.00008	
Al	$+0.61 \times 10^{-6}$	$+1.65 \times 10^{-6}$	1.00002	
Pt	$+0.983 \times 10^{-6}$	$+21.04 \times 10^{-6}$	1.00026	
Mn	$+8.9 \times 10^{-6}$	$+66.13 \times 10^{-6}$	1.00083	

gesamte Suszeptibilität: Beitrag der freien und gebundenen Elektronen