
Quantentheorie des kollektiven Magnetismus

Quantentheorie des kollektiven Magnetismus



Magnetit (Fe₂O₃)

Quantentheorie des kollektiven Magnetismus



Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



magnetisches Material

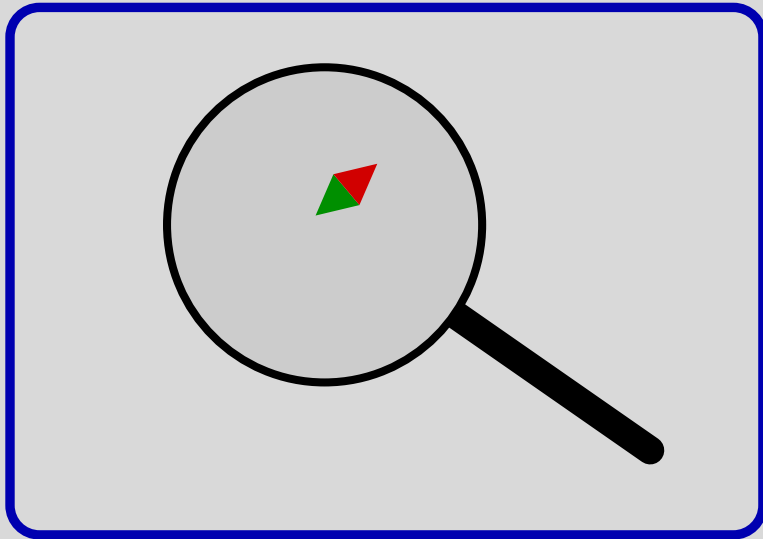
Beispiel: Magnetit (Fe_2O_3), Fe, Gd

→ permanente Magnetisierung

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum **Verständnis** der kollektiven Ordnung magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



mikroskopische Ursache?

notwendig:

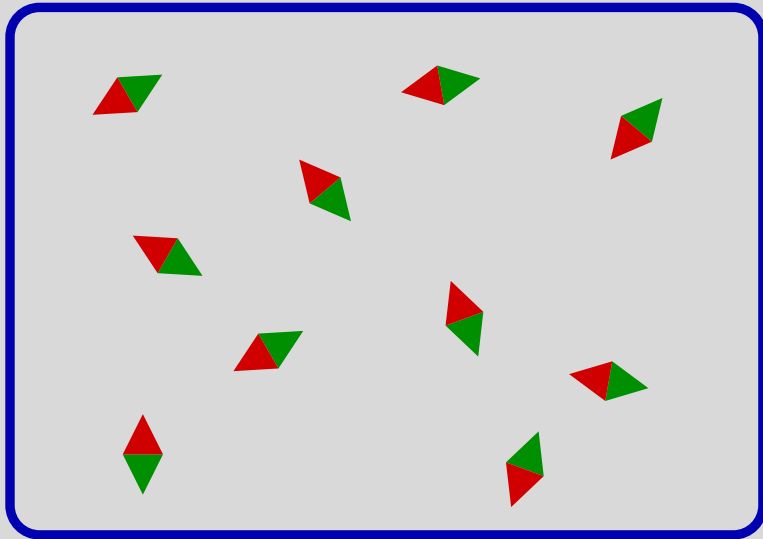
elementare magnetische Momente

→ permanente Momente

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung **magnetischer Momente** aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



Richtungen statistisch verteilt

Gesamtmoment: $\sum_i m_i = 0$

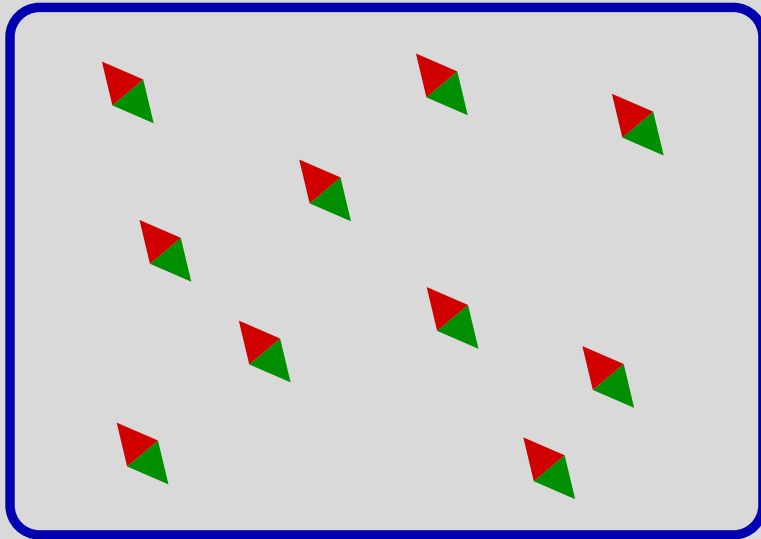
verschwindende Magnetisierung

→ Paramagnetismus

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung **magnetischer Momente** aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



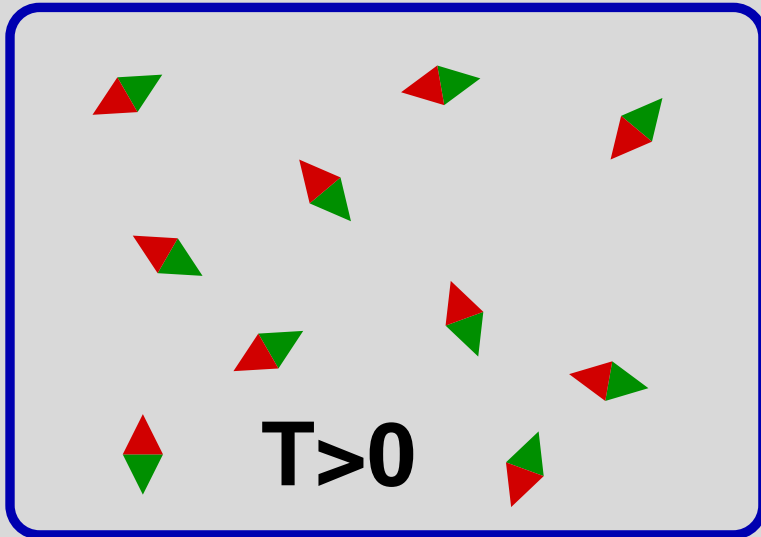
nicht verschwindende
Magnetisierung erfordert:

→ kollektive Ordnung der Momente

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der **kollektiven Ordnung** magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



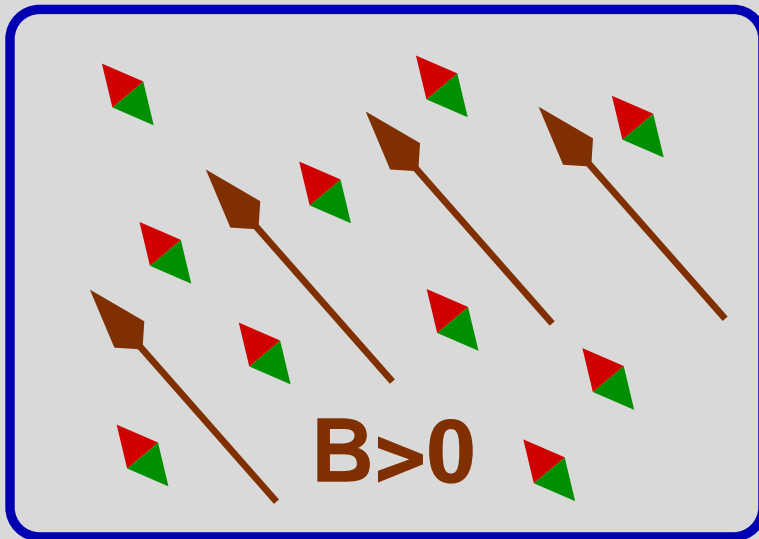
thermische Fluktuationen zerstören
magnetische Ordnung

→ Stabilität der Ordnung?

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der **kollektiven Ordnung** magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



äußeres Magnetfeld

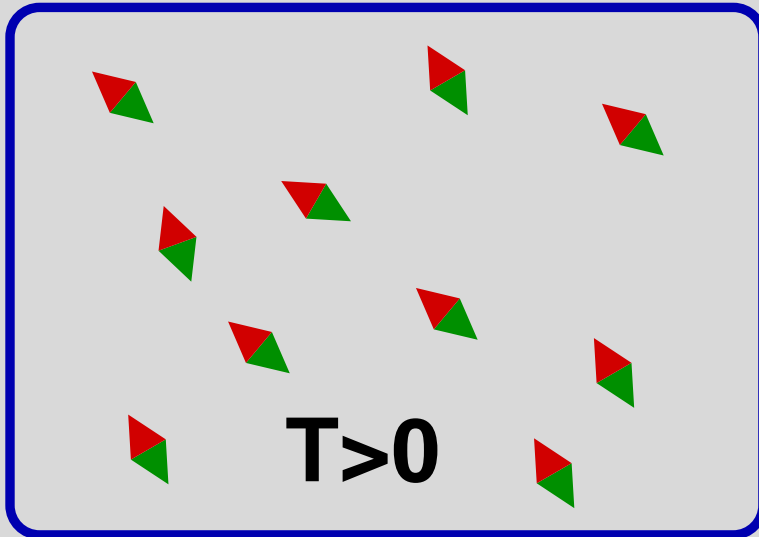
$$H \rightarrow H - \sum_i m_i B$$

→ induzierte magnetische Ordnung

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven **Ordnung** magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



kollektive, nicht-induzierte Ordnung

$$\sum_i \mathbf{m}_i \neq 0 \text{ für } T > 0$$

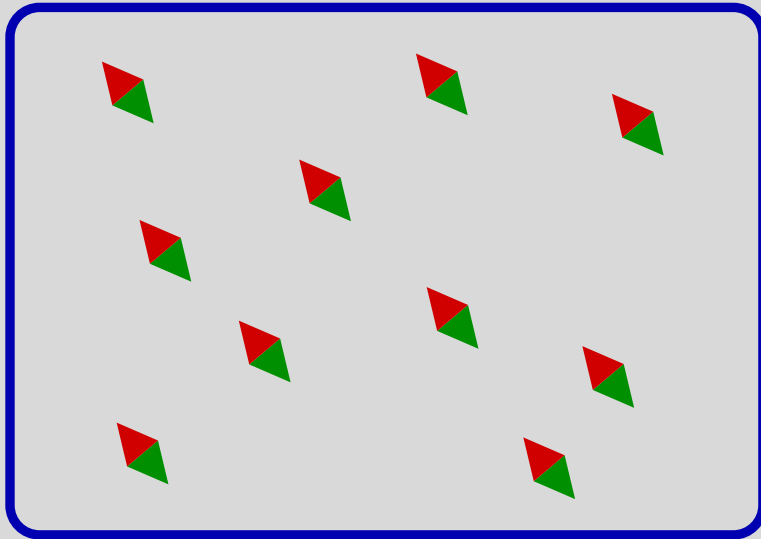
$$\sum_i \mathbf{m}_i = 0 \text{ für } T \rightarrow \infty$$

→ spontane Ordnung

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der **kollektiven Ordnung** magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus

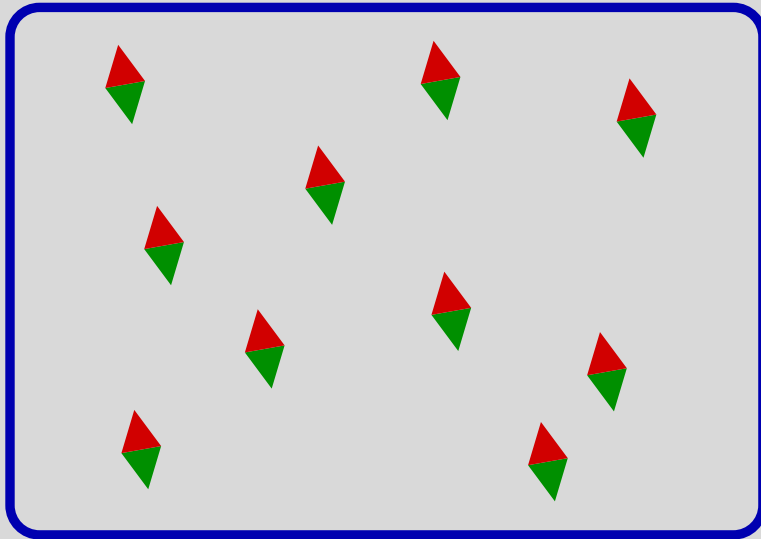


Richtung der Magnetisierung?

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der **kollektiven Ordnung magnetischer Momente** aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus

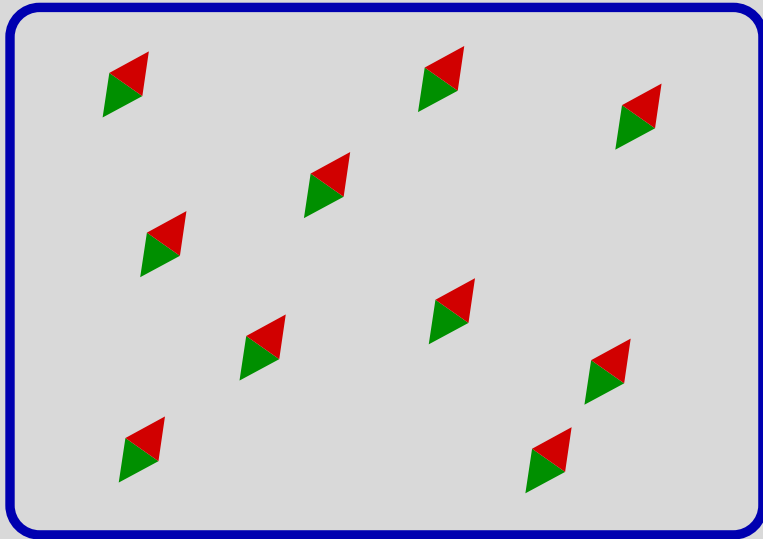


Richtung der Magnetisierung?

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der **kollektiven Ordnung magnetischer Momente** aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



H : magnetisch isotrop

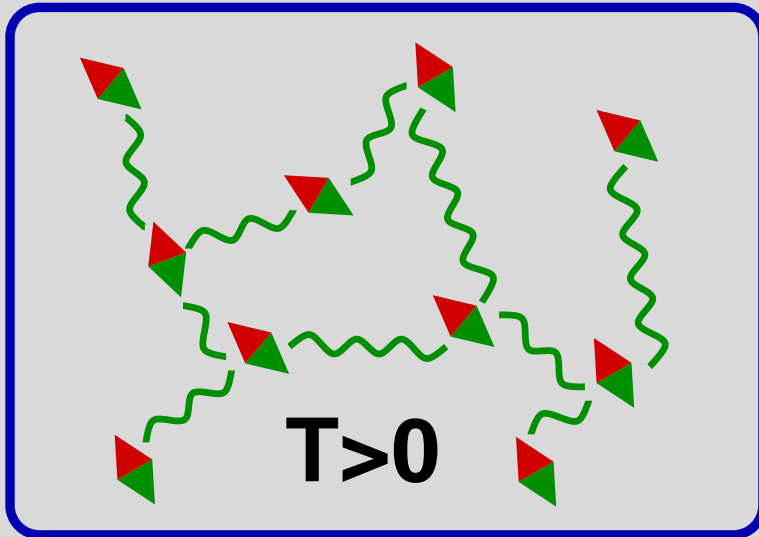
$|\Psi\rangle$: geringere Symmetrie

→ spontane Symmetriebrechung

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der **kollektiven Ordnung magnetischer Momente** aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



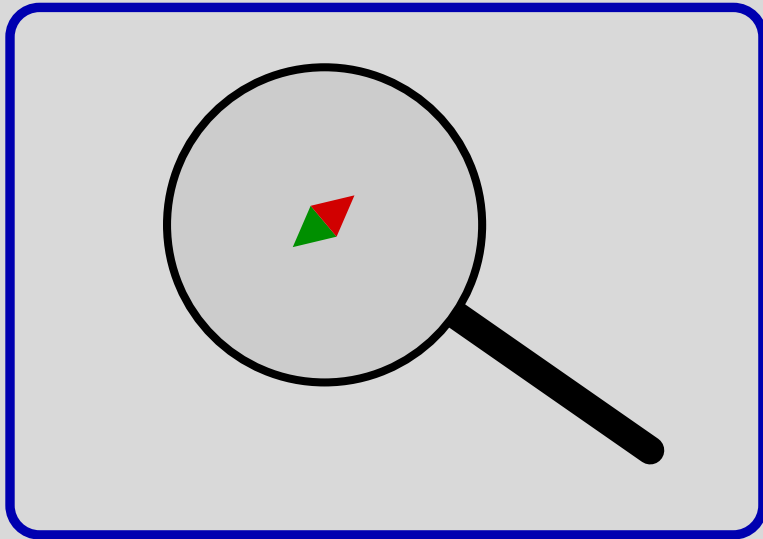
spontane kollektive Ordnung
erfordert:

→ Wechselwirkung

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung magnetischer **Momente** aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-**wechselwirkenden** und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus

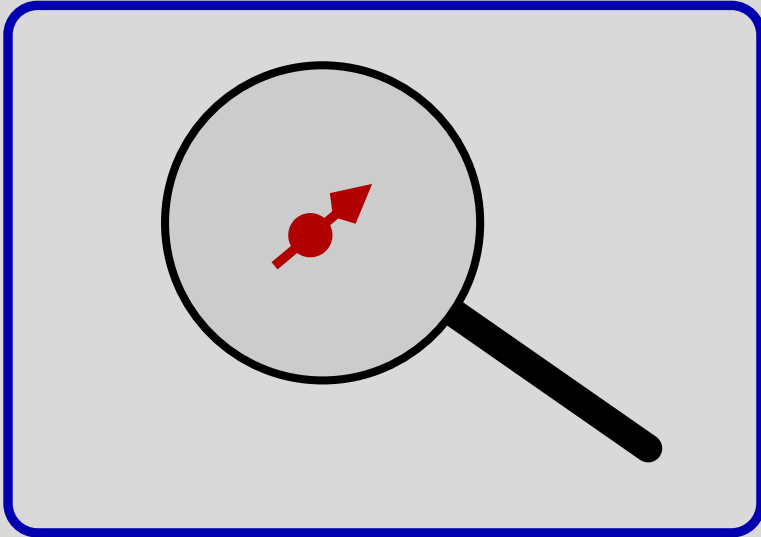


→ Ursache magnetischer Momente?

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung **magnetischer Momente** aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



Drehimpuls \rightarrow magnetisches Moment

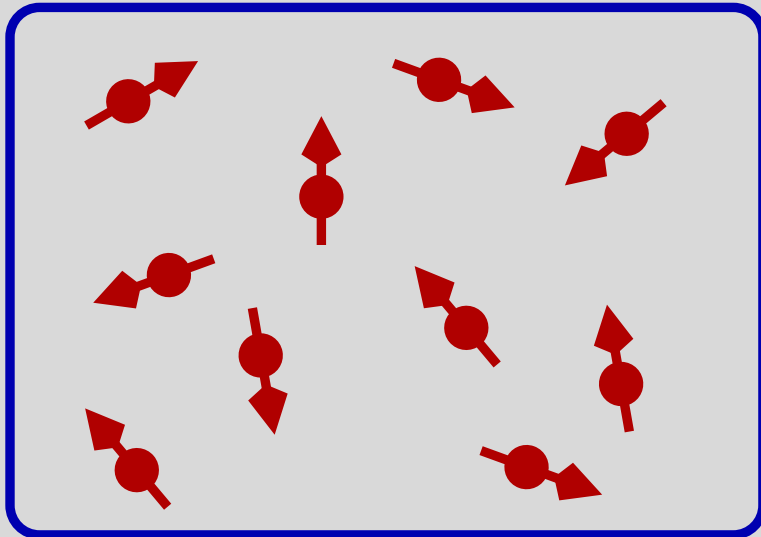
Bahndrehimpuls \rightarrow orbitales Moment

Spin \rightarrow Spin-Moment

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung **magnetischer Momente** aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus

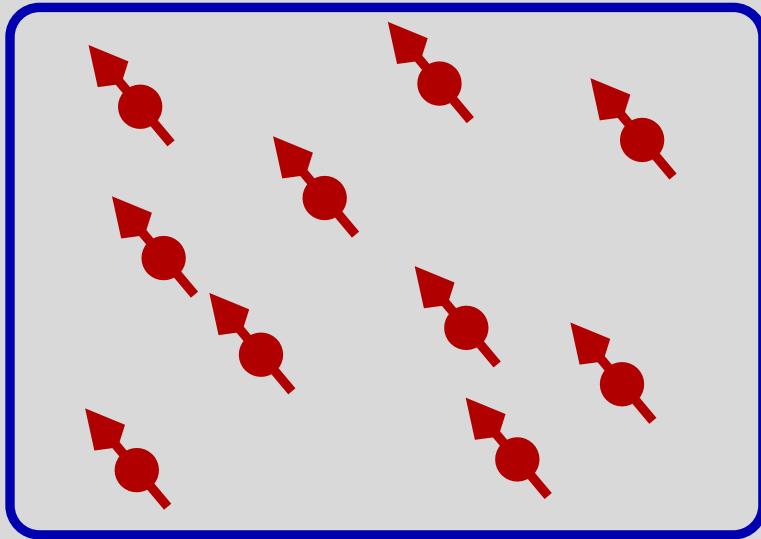


→ Spin-Momente

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten **Viel-Elektronen-Systemen**

Skizze: Kollektiver Magnetismus



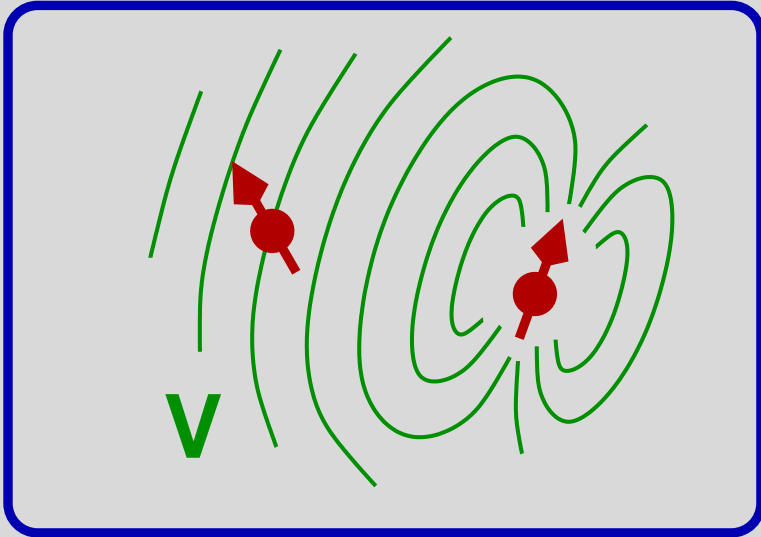
kollektive spontane Ordnung

→ Wechselwirkung ?

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-**wechselwirkenden** und dimensionsreduzierten **Viel-Elektronen-Systemen**

Skizze: Kollektiver Magnetismus



Energie eines magnetischen Moments bei r_i im Dipol-Feld aller anderen Momente:

$$\frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{j \neq i} \frac{r_{ij}^2 \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j - 3(\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j)(\mathbf{m}_j \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5}$$

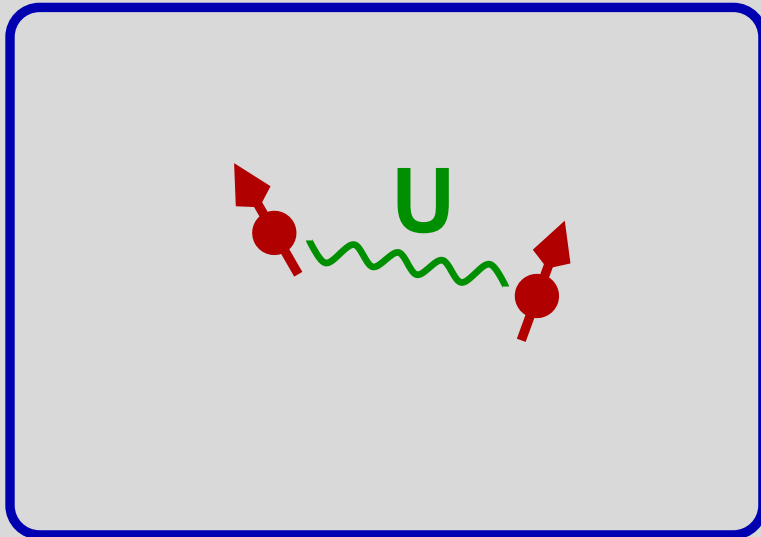
Abschätzung: $\sim 10^{-4}$ eV, 1 T, 1 K

→ Dipol-Wechselwirkung zu schwach

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-**wechselwirkenden** und dimensionsreduzierten **Viel-Elektronen-Systemen**

Skizze: Kollektiver Magnetismus



starke Kopplung über Coulomb-
Wechselwirkung U

$$U \sim W$$

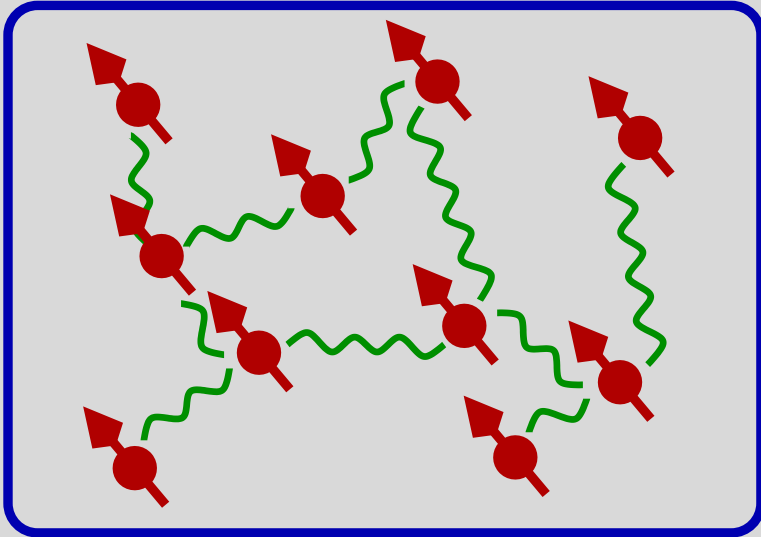
W : kinetische Energie (Bandbreite)

→ starke Coulomb-Wechselwirkung

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung magnetischer Momente aus einem **nichtperturbativen**, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von **Coulomb-wechselwirkenden** und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



Coulomb-Wechselwirkung als
Ursache für kollektiven Magnetismus

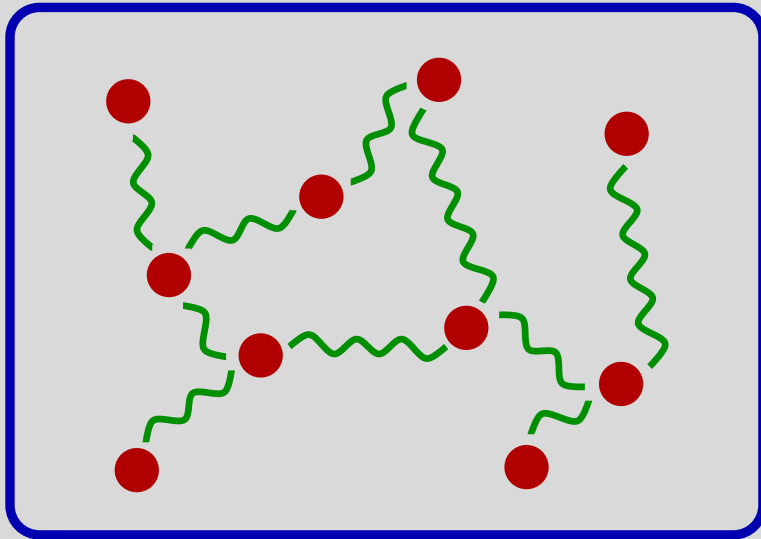
Bohr-van Leeuwen-Theorem:
“Magnetismus kann nicht im
Rahmen klassischer Statistik
beschrieben werden”

→ Quantenstatistik

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung **quantenstatistischer Methoden** zum Verständnis der kollektiven Ordnung magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von **Coulomb-wechselwirkenden** und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



quantenmechanisches System
stark wechselwirkender Fermionen
 $\sim 10^{23}$ gekoppelte Freiheitsgrade

→ Grundproblem der
Theoretischen Physik

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung **quanten**statistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung magnetischer Momente aus einem **nichtperturbativen**, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-**wechselwirkenden** und dimensionsreduzierten **Viel-Elektronen-Systemen**

Skizze: Kollektiver Magnetismus



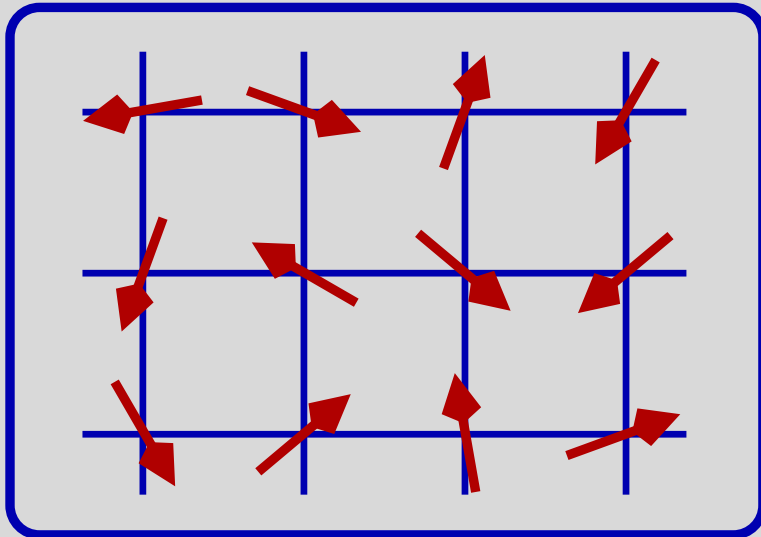
Quantenmechanik:
identische Fermionen sind
ununterscheidbar !

→ Observable: Spin-Dichte

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung **quanten**statistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der **elektronischen Struktur** von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



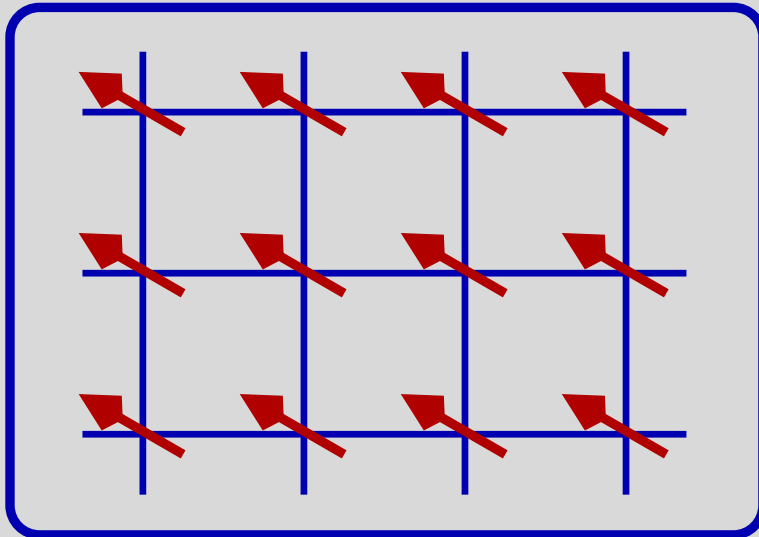
Festkörper: Translationssymmetrie
magnetisches Moment
an einem Gitterplatz

→ lokales magnetisches Moment

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung **quanten**statistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der **elektronischen Struktur** von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



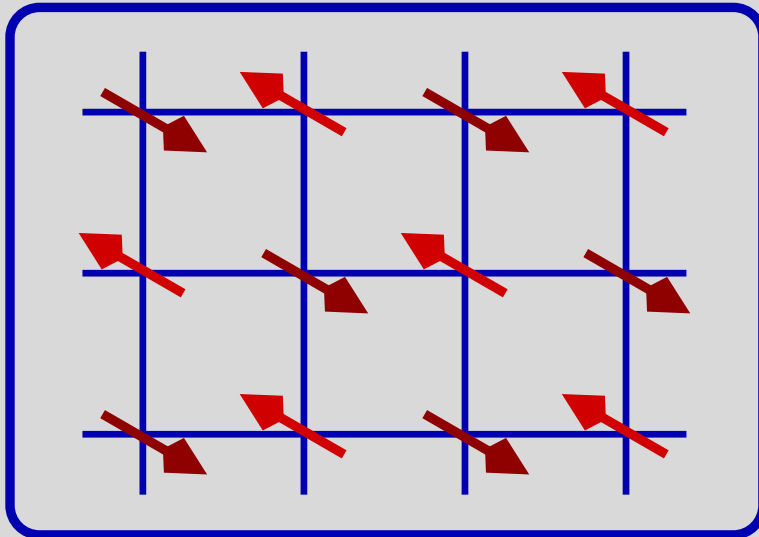
kollektiver Magnetismus:
spontane Ordnung lokaler Momente

→ Ferromagnetismus

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der **kollektiven Ordnung magnetischer Momente** aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der **elektronischen Struktur** von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus

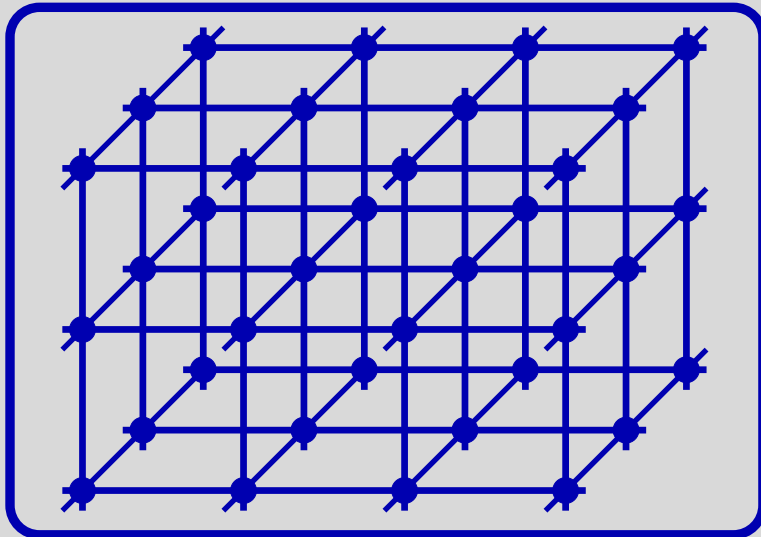


→ Antiferromagnetismus

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der **kollektiven Ordnung magnetischer Momente** aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der **elektronischen Struktur** von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus

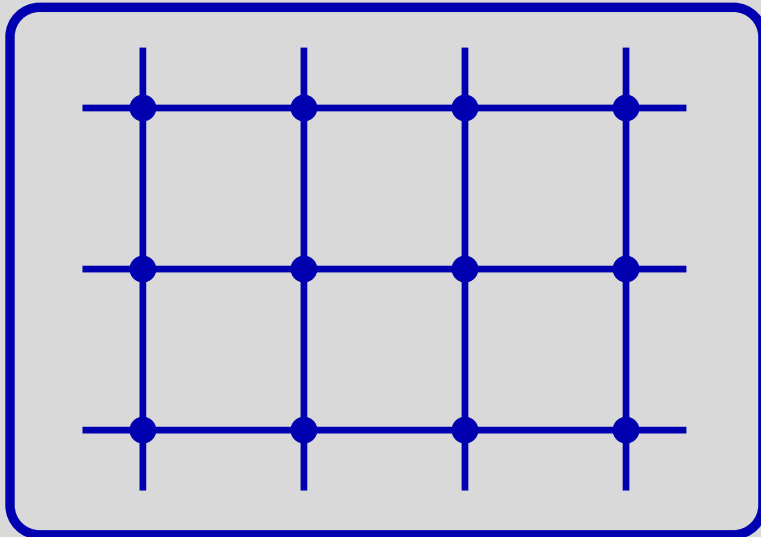


→ Dimensionsreduzierung

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und **dimensionsreduzierten** Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus

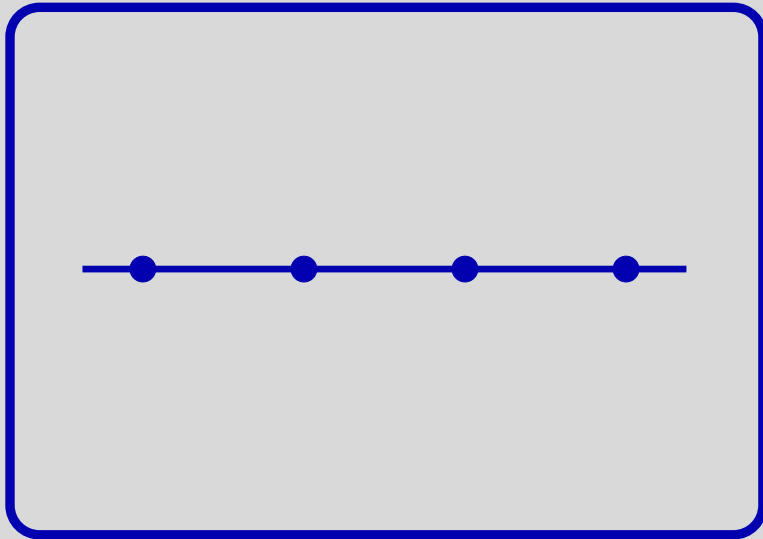


→ Dimensionsreduzierung

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und **dimensionsreduzierten** Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus

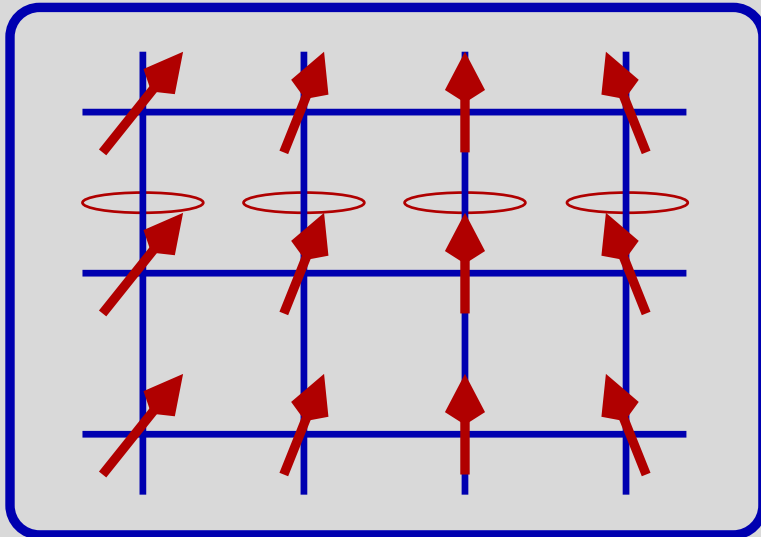


→ Dimensionsreduzierung

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und **dimensionsreduzierten** Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



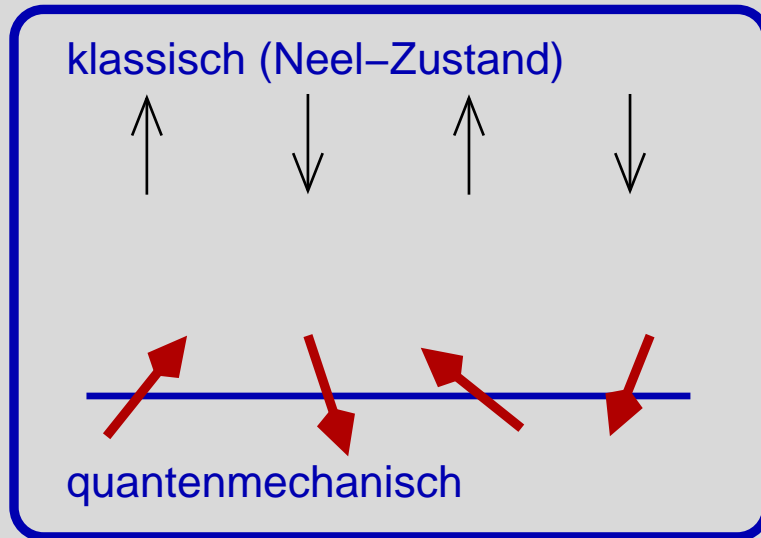
$D = 2$: thermische Anregung
von Magnonen zerstört
kollektive Ordnung

→ Mermin-Wagner-Theorem

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und **dimensionsreduzierten** Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



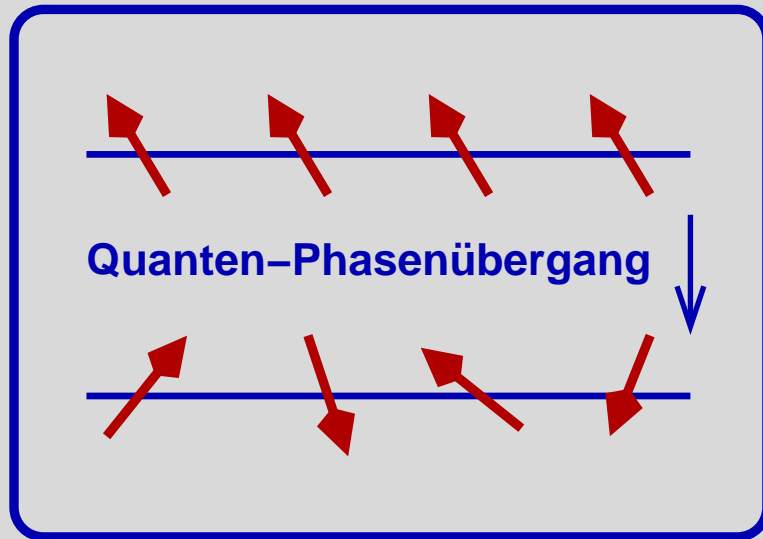
$D = 1$: Fluktuationen bei $T = 0$
zerstören antiferromagnetische
Ordnung

→ Quantenfluktuationen

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und **dimensionsreduzierten** Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



$D = 1$:

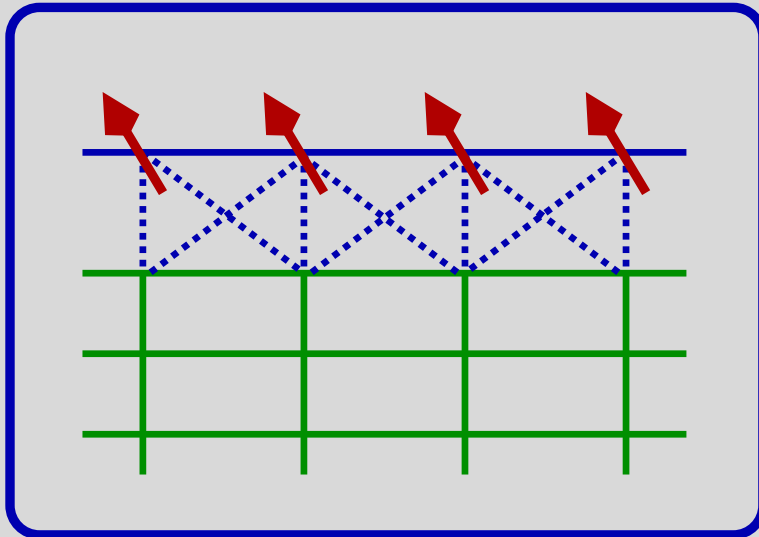
ferromagnetische Ordnung möglich

→ Quantenphasenübergänge

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und **dimensionsreduzierten** Viel-Elektronen-Systemen

Skizze: Kollektiver Magnetismus



- Kopplung an das Substrat
 - gekoppelte magnetische Ketten
 - Inseln, Cluster, ...
 - Anisotropien
 - ...
- magnetische Ordnung ?

Aufgabenstellung:

Entwicklung und Anwendung quantenstatistischer Methoden zum Verständnis der kollektiven Ordnung magnetischer Momente aus einem nichtperturbativen, thermodynamisch konsistenten Bild der elektronischen Struktur von Coulomb-wechselwirkenden und dimensionsreduzierten Viel-Elektronen-Systemen