

F. Atomare Ursachen des Magnetismus

Im Folgenden sollen die atomaren Ursachen für den Magnetismus fester Stoffe erläutert werden. Die meisten Zusammenhänge lassen sich dabei auch auf flüssige und gasförmige Stoffe übertragen. Die zugehörigen mathematischen Gleichungen, die in den meisten Fällen aus der Quantentheorie resultieren, können dabei oftmals nur ohne Herleitung angegeben werden, da dies ansonsten den Rahmen dieser kurzen Zusammenfassung sprengen würde.

1. Magnetisches Moment des Elektrons

Das Elektron weist einen Drehimpuls \vec{L} auf, der mit dessen Bahn um den Atomkern verbunden ist, siehe **Abb. F1**. Klassisch gilt bei einer Kreisfrequenz der Bewegung $\omega=v/r$ (v =Geschwindigkeit, r =Radius der Kreisbahn, m_e =Elektronenmasse):

$$\vec{L} = m_e \cdot r^2 \vec{\omega} \quad (\text{F.1})$$

Das magnetische Moment $\vec{\mu}_L$ des Elektrons kann definiert werden als Produkt eines elektrischen Kreisstroms I um die von ihm umschlossene Fläche A :

$$\vec{\mu}_L = I \cdot d\vec{A} \quad (\text{F.2})$$

Bildet man I aus der den Kern umkreisende Ladung e , so ergibt sich daraus für das magnetische Moment, das aus der Bahnbewegung resultiert:

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e} \vec{L} \quad (\text{F.3})$$

Gleiches ergibt sich aus einer quantenmechanischen Herleitung.

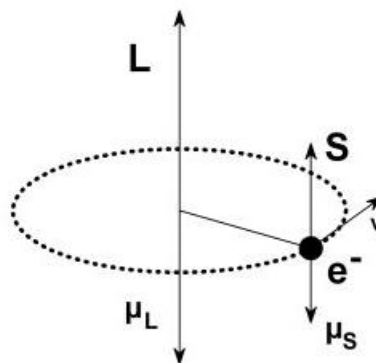


Abb.F1: Drehimpulse \vec{L} und \vec{S} und magnetische Momente bei Kreisbewegung des Elektrons um den Atomkern.

Wie Stern und Gerlach im vergangenen Jahrhundert als erste experimentell feststellten, existiert neben dem Bahndrehimpuls der Bewegung um den Atomkern auch ein Eigendrehimpuls des Elektrons \vec{S} , der auch als Elektronenspin bezeichnet wird. Mittels der relativistischen Quantenmechanik läßt sich zeigen (Dirac), daß diese Eigenbewegung ebenfalls zu einem magnetischen Moment μ_s führt:

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m_e} \vec{S} \quad (\text{F.4})$$

(F.3) bzw. (F.4) werden oftmals auch mit Hilfe des sog. Bohrschen Magnetons ausgedrückt, welches die Einheit eines magnetischen Momentes aufweist:

$$\mu_b = \frac{e \cdot \hbar}{2m_e} \quad (\text{F.5})$$

Hierbei ist $\hbar = h/2\pi = 1.055 \cdot 10^{-34}$ Js. Die Konstante h ist das sog. Plancksche Wirkungsquantum.

Meßbar sind für Drehimpulse nach den Regeln der Quantentheorie lediglich ihr Betrag sowie eine Vektorkomponente, deren Richtung i.a. als z-Richtung definiert wird. Gleiches gilt für die magnetischen Momente. Die für diese Größen möglichen Werte ergeben sich wie im Folgenden kurz skizziert:

Für ein einzelnes Elektron in Zentralpotential V des Atomkerns gilt die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V\right)\psi = E\psi \quad (\text{F.6})$$

Die Wellenfunktion Ψ ergibt diskrete Zustände, die mit Hilfe ganzer Zahlen, der sog. Quantenzahlen n, l, m_l numeriert werden. Diese Zustände können noch zur Berücksichtigung des Elektronenspins S um eine weitere Quantenzahl m_s erweitert werden, so daß für die Wellenfunktion gilt:

$$\psi = \psi(n, l, m_l, m_s) \quad (\text{F.7})$$

Physikalisch meßbare Größen werden in der Quantentheorie Observable genannt und ergeben sich als Erwartungswerte von Operatoren angewandt auf die Wellenfunktionen. Diese Erwartungswerte ergeben sich im Fall des Drehimpulses, wenn L den entsprechenden Operator bezeichnet, z.B. durch:

$$L = \int \psi^* L \psi dV \quad (\text{F.8})$$

Wendet man (F.8) auf konkrete Lösungen der partiellen Differentialgleichung (F.6) gemäß (F.7) an, so erhält man für die Erwartungswerte von Betrag und z-Komponente des Bahndrehimpulses:

$$L = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar \quad (\text{F.9})$$

sowie

$$L_z = m_l \cdot \hbar \quad (\text{F.10})$$

Dabei ist

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n-1) \quad (\text{F.11})$$

und

$$m_l = -l, -(l-1), \dots, (l-1), l$$

In (F.7) bezeichnet n die sog. Hauptquantenzahl des Einelektronenatoms, die im bildlichen Sinne als Schalen räumlich separater Elektronenwolken verstanden werden können. Elektronen mit $l=0,1,2,\dots$ werden auch als s,p,d,f. Elektronen in entsprechenden Unterschalen bezeichnet. Im bildlichen Sinne unterscheiden sich diese Unterschalen (Orbitale) durch die räumliche Form der Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Teilchen.

Analog zu (F.9) und (F.10) gilt für die diskreten Erwartungswerte des Elektronenspins:

$$S = \sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar \quad (\text{F.12})$$

sowie

$$S_z = m_s \cdot \hbar \quad (\text{F.13})$$

Für die beiden Quantenzahlen des Spins s und m_s gilt:

$$S = 1/2 \text{ und } m_s = \pm 1/2 \quad (\text{F.14})$$

Liegt ein externes Feld \mathbf{H} an, so definiert sich hiermit die z-Richtung. **Abb. F2** zeigt die damit resultierenden Komponenten der Drehimpulse in Feldrichtung, wie sich aus der beschriebenen Quantelung mit diskreten Zustände ergibt. L ist hier als Beispiel mit dem Wert 2 dargestellt. Versucht man sich die Verhältnisse bildlich vorzustellen, so identifiziert man das Verhalten häufig mit einer Präzession des Drehimpulses um die Feldrichtung.

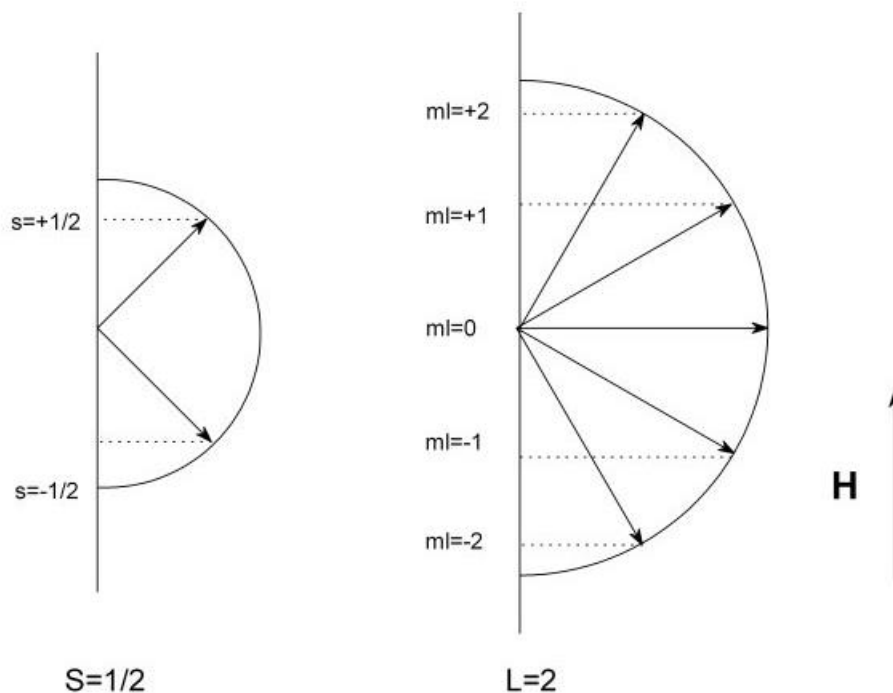


Abb. F2.: Diskrete Zustände von Elektronenspin und Bahndrehimpuls in Richtung eines externen Feldes.

Die Quantelung des Drehimpulses ergibt sich wegen (F.3) und (F.4) in analoger Weise auch für das magnetisch Bahn- und Spinmoment:

und

$$\mu_L = -\mu_B \cdot \sqrt{l(l+1)} \quad (F.15)$$

$$\mu_{LH} = -\mu_B \cdot m_l$$

sowie

und

$$\mu_S = -2 \cdot \mu_B \cdot \sqrt{s(s+1)} \quad (F.16)$$

$$\mu_{SH} = -2 \cdot \mu_B \cdot m_s$$

2. Magnetisches Moment von Atomen

Im Atom addieren sich die einzelnen Drehimpulse der Elektronen zum Gesamtdrehimpuls des Atoms. In Analogie zum Vorherigen ergibt sich hiermit ein magnetisches Gesamtmoment des Atoms. Wegen des quantentheoretischen Verhaltens ergeben sich die resultierenden Werte jedoch weder als Resultate simpler Vektoraddition noch sind hier alle Möglichkeiten gleich wahrscheinlich.

Für den Gesamtdrehimpuls des Atoms \mathbf{J} erhält man für die meisten Atome in der Regel diesen durch die sog. Russel-Saunders-Kopplung. Hierbei koppeln zuerst alle Bahndrehimpulse zum gesamten Bahnimpuls \mathbf{L}_t , und alle Spins zum Gesamtspin \mathbf{S}_t . Anschließend erfolgt die Addition zum Gesamtdrehimpuls.

$$\vec{J} = \vec{L}_t + \vec{S}_t \quad (F.17)$$

Eine alternative Kopplungsmöglichkeit wie Sie für schwere Atome eintritt ist die Spin-Bahnkopplung, wobei zuerst jedes einzelne Elektron in Bahn und Spin koppelt und anschließend alle einzelnen Gesamtimpulse zum Gesamtdrehimpuls des Atoms koppeln.

Welche Zustände bei der Russel-Saunders Kopplung bevorzugt werden, hängt von der konkreten Schalenkonfiguration des Atoms ab. Eine qualitative Beschreibung der Kopplung wird hier durch die sog. Hund'schen Regeln gegeben. Für Betrag und z-Komponente des Gesamtdrehimpulses bei der Russel-Saunders Kopplung gilt:

$$|\vec{J}| = \sqrt{J(J+1)} \cdot \hbar \quad (F.18)$$

und

$$J_z = m_j \cdot \hbar \quad (F.19)$$

wobei $m_j = -J, -(J-1), -(J-2), \dots, J-2, J-1, J$ analog dem Verhalten beim Bahndrehimpuls..

Für das Magnetisches Moment des Atoms ergibt sich bei der Russel-Saunders-Kopplung:

und

$$\mu = -g \cdot \mu_B \cdot \sqrt{J(J+1)} \quad (F.20)$$

$$\mu_z = -g \cdot \mu_B \cdot m_j$$

wobei der sog. Lande-Faktor g folgenden Wert annimmt:

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (\text{F.21})$$

3. Dia-, Para- und Ferromagnetismus

Die mit den Elektronen und Atomen verbundenen magnetischen Momente führen bei angelegten externen Feldern zu einer Ausrichtung. Dies kann quantentheoretisch mit einer energetischen Bevorzugung und damit statistisch höherer Wahrscheinlichkeit bestimmter diskreter Zustände erklärt werden. Die sich ergebenden Unterschiede zwischen Dia-, Para und Ferromagnetismus lassen sich anhand der sich ergebenden Feldabhängigkeit des magnetischen Momentes erklären:

Im diamagnetischen Fall handelt es sich um Systeme, deren Atome durch den Bahndrehimpuls L dominiert werden. Hier sind Zustände von L energetisch am günstigsten, die eine gegenläufige Orientierung von μ und H bewirken und damit auch eine gegenläufige Orientierung der Magnetisierung M zu H . Hiermit wird der klassischen Lenzschen Regel des konträren Verhaltens von Ladungsträgern gegen die Ursachen von Änderungen des Magnetflusses (Induktionsgesetz) genüge getan.

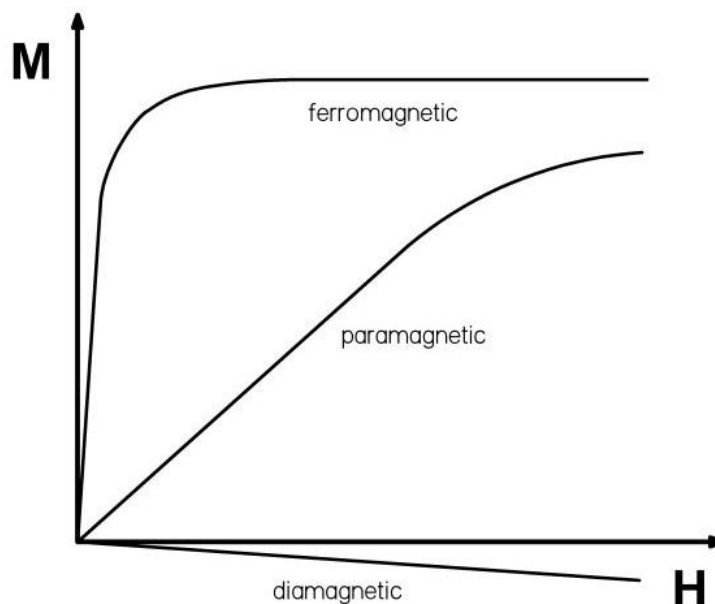


Abb.F.3: Magnetisches Moment als Funktion des externen Feldes für unterschiedliche Körper mit dia-, para- und ferromagnetischen Eigenschaften, schematisch.

Im paramagnetischen Fall sind Drehimpuls-Zustände bevorzugt, die eine parallele Orientierung der hiermit verbundenen Momente μ bzw. von M und dem Feld H determinieren. Die Drehimpulse sind in der Regel S oder J dominiert. Bei sehr hohen Feldern konvergiert das

Moment gegen den Sättigungswert, der sich ergibt, wenn alle magnetischen Momente der Substanz parallel ausgerichtet sind. Die H-Abhängigkeit von M ergibt sich durch Betrachtung der Besetzungswahrscheinlichkeit der m_j -Zustände mittels der Boltzmann-Statistik. Wir erhalten für M:

$$M = M_{\text{sat}} \cdot B_j\left(\frac{\mu_0 g J \mu_B H}{k_B T}\right) \quad (\text{F.22})$$

k_B ist hier die sog. Boltzmann Konstante, M_{sat} die maximal mögliche Magnetisierung, d.h. die Sättigungsmagnetisierung, und B_j bezeichnet die Brillouin-Funktion zum Zustand j :

$$B_j(x) = \frac{2j+1}{2j} \coth\left(\frac{2j+1}{2j} x\right) - \frac{1}{2j} \coth\left(\frac{x}{2j}\right)$$

Der ferromagnetische Fall soll etwas genauer behandelt werden: Hier erfolgt meist eine sehr rasche Ausrichtung der magnetischen Momente. Während bei dia- oder paramagnetischen Substanzen nur isolierte Elektronen oder Atome mit dem Feld wechselwirken, so existiert hier eine zusätzliche Kraft zwischen den einzelnen Atomen oder Elektronen: Die sogenannte Austauschwechselwirkung. Die entsprechende Energie bzw. der quantenmechanische Operator dieser Austauschwechselwirkung wird oft wie folgt dargestellt:

$$H_{ij} = -2I \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (\text{F.23})$$

I bezeichnet hier den Wert des sog. Austauschintegrals, welches die Stärke der Austauschwechselwirkung angibt.

Bei positivem Austauschintegral entnimmt man, daß Zustände mit paralleler Orientierung der Spins energetisch bevorzugt sind. Wird ein externes Feld angelegt, so verursacht die Austauschwechselwirkung neben der Feldwirkung eine viel rascherer Orientierung der magnetischen Momente als beim Paramagnetismus, was zu dem in Abb. F.3 angedeutet starken Anstieg von M führt.

Ist das Austauschintegral negativ, so wird eine antiparallele Orientierung der magnetischen Momente bevorzugt, was zum sog. Antiferromagnetismus führt. Entsprechende Werkstoffe sollen hier nicht behandelt werden, erwähnt sei jedoch, daß heutzutage diese Werkstoffe z.B. für die Funktionsweise von GMR-Sensoren von entscheidender Wichtigkeit sind.

Betrachtet man in (F.23) ein einzelnes Atom und summiert über alle Nachbarmomente, so ergibt sich, daß man die Wirkung der Nachbarmomente als ein Feld H_m darstellen kann, welches proportional zur das Atom umgebenden Magnetisierung ist:

$$H_m = \alpha M \quad (\text{F.24})$$

Dies wird als Weißsche Molekularfeldnäherung bezeichnet. Setzt man (F.24) in (F.22) als zusätzliches Feld ein, so erhält man für Ferromagnetika die Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung zu:

$$M_s = M_{\text{sat}} \cdot B_j\left(\frac{\mu_0 g J \mu_B (H + \alpha M_s)}{k_B T}\right) \quad (\text{F.25})$$

Durch den Index s wird die sog. spontane Magnetisierung bezeichnet, d.h. die Magnetisierung, die sich von selbst, allein durch die Austauschwechselwirkung innerhalb einer ferromagnetischen Domäne einstellt. Numerisches Lösen dieser Gleichung nach M_s unter der Annahme $H \ll \alpha M_s$ ergibt das Bild gemäß Abb. F.4, wobei T_c die Curietemperatur des Phasenübergangs ferromagnetisch-paramagnetisch darstellt.

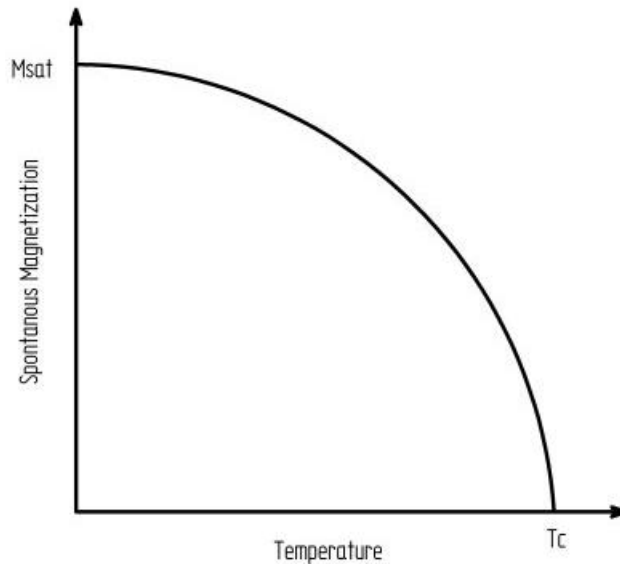


Fig.4: Spontane Magnetisierung in ferromagnetischen Domänen als Funktion der Temperatur.

4. Zusammenfassung

Die atomaren Ursachen der magnetischen Erscheinungen von Festkörpern, Flüssigkeiten und Gasen liegen im Wesentlichen im Drehmoment der Elektronen begründet. Diese weisen sowohl ein Bahndrehmoment als auch ein Eigendrehmoment (Spin) auf. Mit Hilfe der Quantenmechanik ergibt sich, daß mit den Drehmomenten ein magnetisches Moment verbunden ist. Die Drehmomente koppeln zu diskreten Gesamtmomenten nach gewissen quantenmechanischen Gesetzmäßigkeiten, womit sich wiederum auch magnetische Gesamtmomente ergeben.

Die Erscheinungsform des Paramagnetismus erklärt sich durch Orientierung der diskreten magnetischen Momente parallel im externen Magnetfeld. Beim Ferromagnetismus kommt zum externen Feld zusätzlich die sogenannte Austauschwechselwirkung hinzu. Die Austauschwechselwirkung forciert die Parallelstellung der magnetischen Momente der einzelnen Atome, was zum raschen Anstieg der Magnetisierung mit dem externen Feld sowie zur Ausbildung einer Spontanmagnetisierung führt, die mit wachsender Temperatur geringer wird und bei der Curietemperatur verschwindet.

Der Diamagnetismus erklärt sich aus den magnetischen Momenten des Bahndrehimpulses, wobei solche Zustände bevorzugt werden, daß sich die Gesamtmomente antiparallel zum externen Feld ausrichten.

Die vorstehenden Erläuterungen erklären die Existenz der Erscheinungen des Ferromagnetismus, allerdings nicht die Mechanismen, die zur Aufspaltung in hart- und weichmagnetische Materialien führen. Die Entstehung hartmagnetischer Materialien ergibt sich vereinfacht dargestellt aus der Kopplung der magnetischen Momente mit der Kristall- und Mikrostruktur der entsprechenden Festkörper, wodurch eine Umpolung einmal eingestellter Magnetisierungsrichtungen erschwert wird und damit zur Erscheinungsform der magnetischen Hysterese führt. Hiermit soll sich im Detail im nächsten Kapitel beschäftigt werden.

Ebenso wurde sich im Obigen hauptsächlich auf Erklärungen basierend auf isolierte, an Atome gebundene magnetische Momente beschränkt. Auf Modelle, welche die magnetischen Phänomene auf Basis freier oder quasifreier Elektronen erklären, wurde in Obigem verzichtet.