



Frank Welsch (Autor)

Theorie der Spinstrukturen dünner Seltenerdmetall-Schichten: ab-initio Berechnung von Kristallfeldparametern an Oberflächen und thermodynamische Störungstheorie

Frank Welsch

Theorie der Spinstrukturen dünner
Seltenerdmetall-Schichten: ab-initio Berechnung
von Kristallfeldparametern an Oberflächen und
thermodynamische Störungstheorie



Cuvillier Verlag Göttingen

<https://cuvillier.de/de/shop/publications/3154>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen, Germany

Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: <https://cuvillier.de>

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	8
1.1	Magnetismus der schweren Seltenerdmetalle	8
1.2	Ziel und Struktur der Arbeit	11
2	Grundlagen der ab-initio Elektronentheorie	13
2.1	Dichtefunktionaltheorie	14
2.2	Lokale Spindichte-Näherung	16
2.3	Kohn-Sham-Gleichungen im Kristallpotential	16
2.3.1	Das Blochsche Theorem	16
2.3.2	Diskretisierung des reziproken Raums	17
3	Die FLAPW-Methode	19
3.1	Ebene Wellen Basis	19
3.2	Die LAPW-Methode	20
3.2.1	Valenzzustände	21
3.2.2	Lokale Orbitale	24
3.2.3	Rumpfelektronen	25
3.3	Full Potential	25
3.4	Berechnung der FLAPW-Gesamtenergie	26
3.5	Orbitalaufgelöste Valenzladungsdichte in der MT-Kugel	28
4	Magnetische Anisotropie und Kristallfeldparameter	30
4.1	Die asphärische 4f-Schale	31
4.2	Klassische Kristallfeldtheorie	37
4.2.1	Direkte Integration	39
4.2.2	Stevenssche Methode der Äquivalenzoperatoren	39
4.3	Moderne Kristallfeldtheorie	42
4.4	ab-initio Berechnung der Kristallfeldparameter	44
4.4.1	Das Überlappintegral	44
4.4.2	Polarisationseffekte in der Kristallfeldladungsdichte	45
4.5	Valenz- und Gitterbeitrag zum Kristallfeldparameter	48
4.6	Die magnetische Kristallfeldenergie	49

5	Kristallfeldparameter im Volumen	52
5.1	Überprüfung der Störungstheorie	52
5.2	Behandlung der 4f-Schalen in der Umgebung	56
5.3	Rechnerische Details	58
5.3.1	Wahl der Lokalisierungsradien	58
5.3.2	Entwicklungsenergie der 4f-Valenzfunktion	62
5.4	Qualität der berechneten Kristallfeldparameter	63
6	Kristallfeldparameter an der Oberfläche	66
6.1	Überprüfung der Störungstheorie	66
6.2	Werte für die Kristallfeldparameter	69
6.2.1	Analyse des Valenzanteils	72
6.2.2	Relaxationen an der Oberfläche	77
7	Berechnung der Spinstruktur	81
7.1	Thermodynamische Störungstheorie	81
7.1.1	Temperaturabhängigkeit der Kristallfeldanisotropie	83
7.1.2	Konstanten und Koeffizienten	85
7.1.3	Berechnung der ungestörten freien Energie F_0	86
7.1.4	Der winkelabhängige Störbeitrag $\langle V \rangle_0$ zur freien Energie	87
7.1.5	Die praktische störungstheoretische Rechnung	88
7.2	Modifizierung der Störungstheorie	89
7.3	Die magnetische Dipolwechselwirkung	90
7.3.1	Dipolwechselwirkung im Volumen	90
7.3.2	Dipolsummen für Slabgeometrie	93
8	Die Volumenspinstruktur von Holmium	97
8.1	Die Tieftemperaturphase	97
8.1.1	Berücksichtigung der Dipolwechselwirkung	100
8.1.2	Konische Spinstruktur und tilted helix Struktur	101
8.1.3	Vergleich der Methoden	104
8.1.4	Verwendung der ab-initio Kristallfeldparameter	105
8.1.5	Diskussion der Problematik	107
8.2	Temperaturabhängigkeit	108
8.2.1	Kommensurabilität und Spin-Slips	108
8.2.2	Temperaturabhängigkeit der 12-Lagen Struktur	109
9	Spinstruktur der Holmium-Oberfläche	116
9.1	Die Tieftemperaturphase	117
9.1.1	Vergleichsrechnung für einen Slab aus 15 Lagen	117
9.1.2	Slab aus 24 Atomlagen	119
9.2	Temperaturabhängigkeit	125

10 Zusammenfassung / Summary	136
10.1 Deutsche Fassung	136
10.2 English version	138
A Experimentelle Bestimmung der Kristallanisotropie	141
A.1 Ausdrücke für die Kristallanisotropie	141
A.2 Experimentelle Methoden	143
A.3 Experimentelle Ergebnisse für die Anisotropieparameter	145
B Behandlung der Austauschwechselwirkung	147
B.1 Interplanare Austauschkonstanten	147
B.1.1 Theorie	147
B.1.2 Experiment	149
B.2 Mean-field Theorie	153
B.2.1 Allgemein	153
B.2.2 Berechnung im Programm	155
B.3 Spinorientierung im Grundzustand	156
C Kugelflächenfunktionen	159
C.1 Sphärische Harmonische	159
C.2 Kubische Harmonische	160
D Rotationen und Drehmatrizen	162
E Eingabeparameter zur Berechnung der Kristallanisotropie	163
E.1 Gitterparameter	163
E.2 Konvergenzparameter der ab-initio Rechnung	163
F Kristallfeldparameter an der freien Oberfläche	165
F.1 Terbium(0001)	166
F.2 Dysprosium(0001)	168
F.3 Holmium(0001)	170
F.4 Erbium(0001)	172
F.5 Thulium(0001)	174
G Kristallfeldparameter für GdCo_5 und SmCo_5	176
G.1 Volumen: Vergleich mit FLMT0	178
G.2 Die freie Oberfläche	179
H Ferromagnetischer Terbium-Slab	180
I Kristallfeldtheorie schwerer Seltenerdmetallionen in MgB_2	184