

6 Fermiflächen-Nesting und magnetische Phasenübergänge

Gegenstand des vorliegenden Kapitels sind die Fermiflächen von Yttrium und die der schweren Lanthanidmetalle Gadolinium, Terbium und Dysprosium. Der Fokus liegt hierbei auf dem Einfluss der Form der Fermifläche auf die Kopplung lokalisierter magnetischer Momente, wie sie bei den schweren Lanthanidmetallen in Form der $4f$ -Momente vorliegen. Aufgrund des vernachlässigbaren Überlapps der $4f$ -Schalen benachbarter Metallatome wird die Kopplung indirekt von den Valenzelektronen vermittelt (RKKY-Wechselwirkung); sie zeigt ein mit dem Abstand oszillierendes Verhalten.

Die Standardtheorie zum Magnetismus der schweren Lanthanidmetalle, die im Wesentlichen in den fünfziger und sechziger Jahren des vergangenen Jahrhunderts entwickelt wurde, führt die in diesen Materialien beobachteten zahlreichen magnetischen Phasen — sie zeigen beispielsweise ferromagnetische, helikal antiferromagnetische und konisch ferrimagnetische Ordnungen — auf geringfügige Unterschiede bei den Fermiflächen zurück. Zentrale Bedeutung kommt hierbei den von der Theorie vorhergesagten, parallel zueinander verlaufenden Bereichen der Fermiflächen zu, dem sog. *Nesting*. Es liegt in der Nähe des L-Punkts der hexagonalen Brillouinzone und tritt bei einigen Lanthanidmetallen in der paramagnetischen Phase auf. Im Rahmen dieser Theorie wird es bei Tb und Dy (wie auch bei Ho) für das Ausbilden einer helikal antiferromagnetischen Phase unterhalb der jeweiligen Néeltemperatur T_N verantwortlich gemacht [Keet 68, Even 68] (s. auch Ref. [Jack 69]). Die Korrelation zwischen dem Auftreten von Nesting und helikaler Ordnung wird in der Literatur oftmals auch als „Nestinghypothese“ bezeichnet.

Zunächst werden die wesentlichen Aspekte der Standardtheorie zur magnetischen Kopplung dargestellt (Kap. 6.1.1). Sie bedient sich an einigen Stellen starker Näherungen und vernachlässigt dabei physikalisch relevante Aspekte. Dies wird im Hinblick auf die Seltenerd-Metalle diskutiert (Kap. 6.1.2). Anhand einiger Beispiele aus der aktuellen Forschung wird der Zusammenhang zwischen Nesting der Fermifläche und Kopplung magnetischer Momente weiter vertieft (Kap. 6.1.3).

An Y wurde mittels Positronenannihilationspektroskopie von Dugdale *et al.* [Dugd 97] erstmals Nesting in einem direkten Experiment nachgewiesen. Ich beobachte in meinen Photoemissionsmessungen, die auch einen direkten Zugang zur Gestalt der Fermifläche ermöglichen, bei Y ebenfalls ein solches Nesting (Kap. 6.2) und reproduzieren damit die zentralen Aussagen von Dugdale. Die Messungen bestätigen darüber hinaus, dass paramagnetisches Gd kein solches Nesting zeigt (Kap. 6.3). Dies wurde in theoretischen Rechnungen [Keet 68, Even 68] vorher-

gesagt und mittels Positronenannihilationsspektroskopie erstmals von Fretwell *et al.* [Fret 99] direkt experimentell beobachtet. Bislang wurden an reinen schweren Lanthanidmetallen, die eine helikale Ordnung zeigen, noch keine Messungen durchgeführt, die einen direkten Nachweis des Nestings liefern. Für paramagnetisches Tb und Dy zeige ich erstmals experimentell das Nesting bei L (Kap. 6.4).

Zur Aufnahme eines Datensatzes einer vollständigen Fermifläche benötigt die Positronenannihilation bis zu sechs Monate Messzeit. Mit dieser Methode sind daher experimentelle Untersuchungen der temperaturinduzierten Veränderungen der Fermiflächen, wie sie bei magnetischen Metallen mit dem Ausbilden einer magnetischen Ordnung beim Herunterkühlen einhergehen, praktisch schwer durchführbar. Meines Wissens wurden derartige Studien bislang nicht veröffentlicht. Mittels Photoemission benötigt man lediglich eine Zeit von etwa vier Stunden zur Datenaufnahme für eine vollständige Fermifläche. Dies ermöglicht es mir, erstmals in einem direkten Experiment gemessene Datensätze der ferromagnetischen Fermiflächen von Gd, Tb und Dy zu zeigen, die eine komplette Brillouinzone umfassen. Sie wurden bei hinreichend tiefen Temperaturen relativ zur höchsten Ordnungstemperatur aufgenommen; ihre Form entspricht daher der des magnetischen Grundzustands. Wie bereits in den sechziger Jahren anhand theoretischer Vorhersagen vermutet, wird bei den Tieftemperaturfermiflächen kein Nesting bei L beobachtet.

6.1 Nesting der Fermifläche und helikale Ordnung

Die theoretischen Überlegungen, die zahlreichen magnetischen Ordnungsphänomene bei den schweren Lanthanidmetallen auf ein Nesting der Fermifläche zurückzuführen, ist in der Literatur mittlerweile weitestgehend akzeptiert. Das dieser Überlegung zugrunde liegende Modell wird oftmals als die „Standardtheorie“ der magnetischen Kopplung mittels Valenzelektronen bezeichnet, deren Grundzüge im folgenden Kapitel dargelegt werden sollen. Sie baut auf der Theorie von Ruderman und Kittel auf, die eine effektive langreichweitige Wechselwirkung von Kernspins in Metallen beschreibt [Rude 54]. Kasuya [Kasu 56] und Yosida [Yosi 57] wendeten diese Theorie auf die magnetischen Übergangsmetalle an, weshalb dieser Kopplungsmechanismus heute als Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida-Wechselwirkung (RKKY) bezeichnet wird.

Im Folgenden wird die Standardtheorie zur magnetischen Kopplung bei den schweren Lanthanidmetallen in knapper Form dargestellt. Für eine ausführliche Diskussion sei der Leser auf die Übersichtsartikel von Freeman [Free 72] und Liu [Liu 78] verwiesen, denen die Ausführungen dieses Kapitels in Teilen folgen.

6.1.1 Standardtheorie der Kopplung lokalisierter magnetischer Momente mittels itineranter Valenzelektronen

Die Energie E eines Systems magnetischer Spins ist proportional zur Summe über die Kopplungsenergiebeiträge aller Einzelspins:

$$E \propto - \sum_{i,j \neq i} \mathcal{J}(\mathbf{r}_{ij}) \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j. \quad (6.1)$$

Dabei ist $\mathcal{J}(\mathbf{r}_{ij})$ die vom Abstand \mathbf{r}_{ij} der Spins \mathbf{S}_i und \mathbf{S}_j abhängende Kopplungsstärke. Ist die Summe aus (6.1) maximal, so liegt ein Minimum der Energie vor; die Konfiguration der Spins ist stabil.

Gibt es eine räumliche Korrelation zwischen den Orientierungen der Spins, so lässt sich (6.1) vereinfachen. Für den Fall helikal angeordneter magnetischer Momente (s. Abb. 2.4(b)), wie es in den antiferromagnetischen Phasen von Tb, Dy (und auch Ho) der Fall ist, kann dies wie folgt vorgenommen werden: Die Periode der Helix ist gegeben durch den reziproken Längensvektor \mathbf{q} , der im Folgenden o.B.d.A. parallel zur z -Achse des Koordinatensystems ausgerichtet ist: $\mathbf{q} = (0, 0, q_z)$. In der Helix sind bei konstantem z — d.h. in jeder (x, y) -Ebene — alle magnetischen Momente parallel ausgerichtet und liegen in der (x, y) -Ebene; sie stehen somit senkrecht auf \mathbf{q} . Die Orientierung \mathbf{O} der Momente in anderen Ebenen folgt dem Zusammenhang $O_x = \cos(q_z z)$ und $O_y = \sin(q_z z)$. Der Vektor \mathbf{O} rotiert also um die z -Achse mit der Periode $2\pi/q_z$. Das bedeutet, dass die magnetischen Momente der (x, y) -Ebene bei $z = 2\pi/q_z$ parallel zu denen der Ebene bei $z = 0$ ausgerichtet sind. Entspricht hierbei $2\pi/q_z$ dem doppelten Abstand d benachbarter Atomebenen des Metalls, so dreht sich die Helix zwischen den beiden Ebenen um 180° . Es liegt Antiferromagnetismus mit antiparallel ausgerichteten Momenten benachbarter Ebenen vor. Der Spezialfall ferromagnetischer Ordnung wird mit $q_z = 0$ ebenfalls beschrieben: In einer Helix mit unendlicher Periode $\lim_{q_z \rightarrow 0} 2\pi/q_z$ sind alle magnetischen Momente parallel ausgerichtet.

Ist nun $\mathcal{J}(\mathbf{q})$ die Fouriertransformierte der Austauschkopplung in einem solchen helikalen System, so ist die Gesamtenergie $E(\mathbf{q})$ der magnetischen Momente proportional zur negativen Kopplungsstärke:

$$E(\mathbf{q}) \propto -\mathcal{J}(\mathbf{q}). \quad (6.2)$$

Die Kopplungsstärke $\mathcal{J}(\mathbf{q})$ ist wiederum proportional zur Responsefunktion $\chi(\mathbf{q})$ der Leitungselektronen auf das effektive Austauschfeld der lokalisierten Momente:

$$\mathcal{J}(\mathbf{q}) \propto \chi(\mathbf{q}). \quad (6.3)$$

Für das $\mathbf{q}=\mathbf{q}_{max}$, bei dem $\chi(\mathbf{q})$ und damit auch $\mathcal{J}(\mathbf{q})$ maximal wird, liegt ein Minimum der Energie vor. Die Konfiguration, bei der die magnetischen Momente in einer Helix mit der Periode $2\pi/q_{z,max}$ angeordnet sind, ist stabil.

Der Zusammenhang zwischen $\chi(\mathbf{q})$ und Eigenschaften der Fermifläche wird nun

diskutiert. Dabei wird im Besonderen darauf eingegangen, welche Merkmale der Fermifläche zu einem Maximum von $\chi(\mathbf{q})$ führen. Die magnetische Suszeptibilität $\chi(\mathbf{q})$ eines Metalls lässt sich aus folgender Summation über seine elektronischen Zustände berechnen:

$$\chi(\mathbf{q}) \propto \sum_{\mathbf{k}, n, n'} \frac{|M_{n, n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q})|^2 f_{\mathbf{k}, n} (1 - f_{\mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{G}, n'})}{\epsilon_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{G}) - \epsilon_n(\mathbf{k})}. \quad (6.4)$$

Hierbei bezeichnen \mathbf{k} die Wellenvektoren der elektronischen Valenzzustände, n und n' die jeweiligen Bänder, $M_{n, n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q})$ Übergangsmatrixelemente, $f_{\mathbf{k}, n}$ die Fermifunktion für Band n an der Stelle \mathbf{k} der Brillouinzone, $\epsilon_n(\mathbf{k})$ die Einteilchenenergie des elektronischen Zustands (n, \mathbf{k}) und \mathbf{G} ist der reziproke Gittervektor, der gegebenenfalls notwendig ist, um $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ zurück in die erste Brillouinzone zu falten. Die Matrixelemente $M_{n, n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q})$ geben die Übergangswahrscheinlichkeiten für die Streuung eines Valenzelektrons (n, \mathbf{k}) am magnetischen Moment der $4f$ -Elektronen in den Zustand $(n', \mathbf{k} + \mathbf{q})$ an. Dieser Streuprozess hängt vom Austauschintegral aller Elektronen in der $4f$ -Schale mit dem Valenzelektron ab. Die Berechnung des Austauschintegrals über die Wellenfunktionen der beteiligten elektronischen Zustände ist aufwendig und überstieg die numerischen Möglichkeiten der 60er und 70er Jahre des vorigen Jahrhunderts bei weitem. Es wurden daher untereinander nicht wechselwirkende, freie elektronenartige Bänder angenommen, für die $M_{n, n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q})$ konstant ist. Das Austauschintegral zwischen den lokalisierten $4f$ -Elektronen und den Valenzzuständen wird damit vernachlässigt, welches eine stark unphysikalische Näherung darstellt. Auf die Bedeutung dieser Näherung für die Aussagekraft der Theorien bei den metallischen Seltenen Erden wird weiter unten eingegangen. So approximiert entspricht $\chi(\mathbf{q})$ der Responsfunktion der Bandelektronen auf ein räumlich sinusförmig moduliertes Magnetfeld.

Aus (6.4) ist ersichtlich, dass ein großer Beitrag zu $\chi(\mathbf{q})$ dann erfolgt, wenn die Energie eines besetzten Zustands $\epsilon_n(\mathbf{k})$ und die eines unbesetzten Zustands $\epsilon_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})$ ungefähr gleich sind. Bei tiefen Temperaturen sind nahezu alle Zustände unterhalb der Fermienergie besetzt und die oberhalb unbesetzt. Daher muss \mathbf{k} knapp innerhalb und $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ knapp außerhalb der Fermifläche liegen. Auch bei Raumtemperatur, bei der die Fermifunktion in einem Energiebereich von ca. 100 meV Breite von besetzt nach unbesetzt übergeht, spielen sich die relevanten Anregungsprozesse in der Nähe der Fermifläche ab.

Der Einfluss der Form der Fermifläche auf $\chi(q)$ soll nun anhand dreier idealisierter Beispiele diskutiert werden (im Folgenden ist dabei $q := |\mathbf{q}| = |(0, 0, q_z)|$). Für ein isotropes dreidimensionales freies Elektronengas mit der Dispersion $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m_e$ entspricht die Fermifläche einer Kugel mit dem Radius k_F . Für $T = 0$ K lässt sich (6.4) analytisch lösen und führt zu dem in der untersten Kurve von Abbildung 6.1 dargestellten Verlauf für $\chi(q)$. Normiert auf $\chi(0)$, d.h. auf den Respons der Leitungselektronen auf ein homogenes Magnetfeld, fällt $\chi(q)$ streng monoton mit ansteigendem q ab. Bei $q = 2k_F$, wenn q dem Durchmesser der Fermikugel entspricht, geht die Steigung gegen $-\infty$. Diese Singularität ist für das räumlich

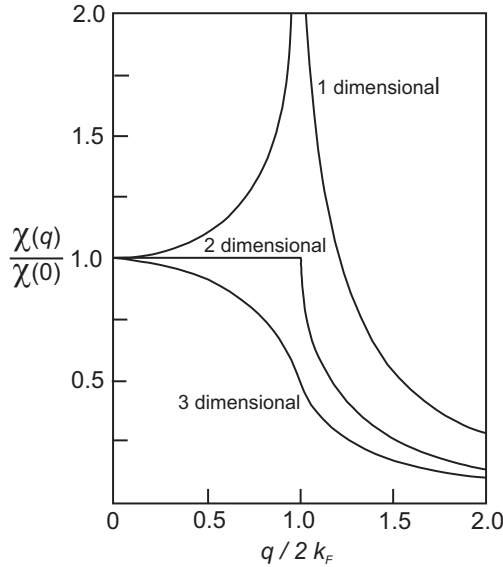


Abbildung 6.1: Magnetische Suszeptibilität $\chi(q)$ eines freien Elektronengases in Abhängigkeit eines hypothetischen Magnetfelds mit räumlich sinusförmig modulierter Feldstärke der reziproken Periode q (normiert auf $\chi(0)$, d.h. auf das homogene, unmodulierte Magnetfeld). Die einzelnen Kurven geben den Verlauf der Suszeptibilität für verschiedendimensionale Fermiflächen wieder (aus Ref. [Liu 78]).

oszillatorische Verhalten der RKKY-Wechselwirkung (s. Glng. (2.3)) verantwortlich.

Ist die Dispersion der Bänder zweidimensional, also beispielsweise unabhängig von x , mit $E(\mathbf{k}) = \hbar^2(k_y^2 + k_z^2)/2m_e$, so ist die Fermifläche zylinderförmig¹ mit der x -Achse als Zentrum und dem Zylinderdurchmesser $2k_F$. Auch in diesem Fall lässt sich $\chi(q)$ analytisch berechnen. Die Abhängigkeit von q ist ebenfalls in Abbildung 6.1 dargestellt (mittlere Kurve). Bis $q = 2k_F$ ist $\chi(q)$ konstant und fällt bei größeren q streng monoton ab.

Der im Zusammenhang dieser Arbeit interessanteste Fall ist die eindimensionale, nur von z abhängende Energiedispersion $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 k_z^2/2m_e$. Aus ihr resultiert eine Fermifläche, die aus zwei parallelen xy -Ebenen besteht², die den Abstand $2k_F$ aufweisen. Die analytische Lösung von (6.4) ergibt ein $\chi(q)$, das bei $q = 2k_F$ eine logarithmische Singularität zeigt (s. Abb. 6.1, oberste Kurve).

Die Fermiflächen realer Metalle sind nie perfekt flache und parallele Ebenen. Allerdings ist der oben diskutierte ideale Fall weit weniger unrealistisch, als es auf den ersten Blick erscheinen mag. Können Bereiche einer beliebigen Fermifläche mit dem Verbindungsvektor \mathbf{Q} in punktwisen Kontakt gebracht werden, so tritt eine Singularität in der Suszeptibilität bei $\chi(\mathbf{Q})$ auf, wobei \mathbf{Q} nicht notwendigerweise senkrecht auf den Flächen stehen muss. Das Auftreten solcher parallelen Segmente einer Fermifläche wird in der Literatur als *Nesting* (englisch für Nisten) oder auch

¹Dies gilt für ein dreidimensionales System mit einer zweidimensionalen Banddispersion. In Kap. 2.3 werden die freie-elektronenartigen Fermiflächen in zwei- bzw. eindimensionalen Systemen diskutiert. Setzt man den Fermiflächenring des zweidimensionalen Systems in die dritte Dimension fort, so erhält man eine zylinderförmige Fermifläche.

²In einem eindimensionalen System besteht die Fermifläche des freien Elektronengases aus zwei Punkten. Die Fortsetzung in zwei weitere Dimensionen (Verschiebung der beiden Punkte um alle Translationen in der xy -Ebene) führt zu der aus zwei parallelen Ebenen bestehenden Fermifläche.

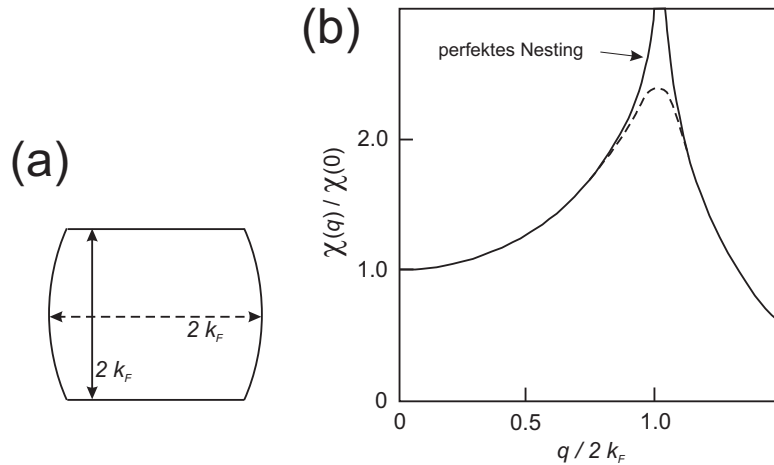


Abbildung 6.2: Magnetische Suszeptibilität $\chi(q)$ für perfektes und nicht perfektes Nesting (nach Ref. [Liu 78]). (a) Zeigt einen Schnitt durch eine hypothetische Fermifläche, die in vertikaler Richtung perfektes Nesting aufweist, mit einem Abstand der Ebenen von $2k_F$. In horizontaler Richtung liegt ein nicht perfektes Nesting vor (ebenfalls mit $2k_F$), die Fermifläche ist leicht gekrümmt. Bei perfektem Nesting divergiert die magnetische Suszeptibilität für $q = 2k_F$ (durchgezogene Linie in (b)). Bei leicht gekrümmter Fermifläche verbleibt bei $q = 2k_F$ ein Maximum in $\chi(q)$ (gestrichelte Linie in (b)).

als *Webbing* bezeichnet. In realen Metallen sind die nestenden Flächensegmente nicht einmal perfekt flach, wie es der obigen Diskussion zugrunde liegt. Welche Auswirkungen Abweichungen vom perfekten Nesting nach sich ziehen, wurde von Roth [Roth 66], Liu [Liu 68] und Rice [Rice 70] untersucht. Ein einfaches Beispiel für eine leichte Abweichung wird nach Liu [Liu 78] im Folgenden betrachtet.

Abbildung 6.2 (a) zeigt einen Querschnitt durch eine hypothetische Fermifläche, die in vertikaler Richtung ein perfektes (durchgezogener Doppelpfeil) und in horizontaler Richtung ein nicht perfektes Nesting (gestrichelter Doppelpfeil) mit einer leichten Krümmung aufweist. Für das perfekte Nesting zeigt die magnetische Suszeptibilität $\chi(q)$ in (b) die oben diskutierte Singularität (durchgezogene Linie). Im Fall einer leicht gekrümmten Fermifläche bildet sich an Stelle der Singularität bei $q = 2k_F$ ein Maximum von $\chi(q)$ aus (gestrichelte Linie), das in Abhängigkeit der Krümmung stärker oder schwächer ausgeprägt ist. Ein deutliches Maximum in $\chi(q)$, dessen Einfluss stark genug ist, eine helikale antiferromagnetische Ordnung zu stabilisieren, kann folglich nur dann entstehen, wenn die nestenden Bereiche der Fermifläche hinreichend groß sind.

6.1.2 Anwendung der Theorie auf die schweren Lanthanidmetalle

Keeton und Loucks [Keet 68] wie auch Evenson und Liu [Even 68] wendeten die oben diskutierten theoretischen Vorstellungen auf die Lanthanidmetalle an. Sie berechneten paramagnetische elektronische Bandstrukturen für Gd, Dy, Er und

Lu mithilfe der RAPW-Methode (*relativistic augmented-plane-wave*) und führten damit die Summation aus (6.4) durch. Sie identifizierten Maxima der verschiedenen $\chi(q)$ mit nestenden Bereichen der entsprechenden Fermiflächen. Dabei wurden gute Übereinstimmungen mit Neutronenstreuexperimenten erzielt. Für Dy und Er entsprachen die Längen der Nestingvektoren den gemessenen Perioden der Helices in den antiferromagnetischen Phasen knapp unterhalb der jeweiligen Ordnungstemperatur. Für Gd fanden sie in ihren Rechnungen kein Nesting und auch kein ausgeprägtes Maximum in $\chi(q)$. Sie interpretierten dies als die Ursache dafür, dass Gd beim Herunterkühlen eine ferromagnetische Ordnung ausbildet, ohne zunächst eine helikal antiferromagnetische Phase zu durchlaufen.

Ein zentraler Punkt bei der Berechnung von $\chi(q)$ und der anschließenden Interpretation im Hinblick auf magnetische Ordnung findet in den oben zitierten Arbeiten keine Berücksichtigung: die Übergangsmatrixelemente $M_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q})$. Die Austauschwechselwirkung der Valenzelektronen mit den lokalisierten $4f$ -Elektronen hängt stark vom jeweiligen Überlapp der beteiligten Wellenfunktionen ab, welcher einen entscheidenden Einfluss auf die Matrixelemente hat. Erste einfache Abschätzungen von Evenson und Liu [Even 69] zur Auswirkung der Matrixelemente auf $\chi(q)$ zeigten, dass bereits die Annahme von sich leicht mit q ändernden Matrixelementen zu einer Verschiebung der Maxima in $\chi(q)$ führt³. Stark variierende Matrixelemente können den tatsächlichen Verlauf von $\chi(q)$ sogar derart beeinflussen, dass sich ein Maximum in ein Minimum umkehrt bzw. das Maximum dort auftaucht, wo bei konstantem M das Minimum liegt⁴. Freeman kommt daher zu dem Schluss, dass Aussagen von Rechnungen, die keine Matrixelemente berücksichtigen, nur mit Vorsicht zu verwenden sind [Free 72]. Darüber hinaus spielt auch die im Rahmen der Theorie vernachlässigte Coulombwechselwirkung der Leitungselektronen untereinander eine wichtige Rolle bei der Bestimmung von $\chi(q)$ ⁵.

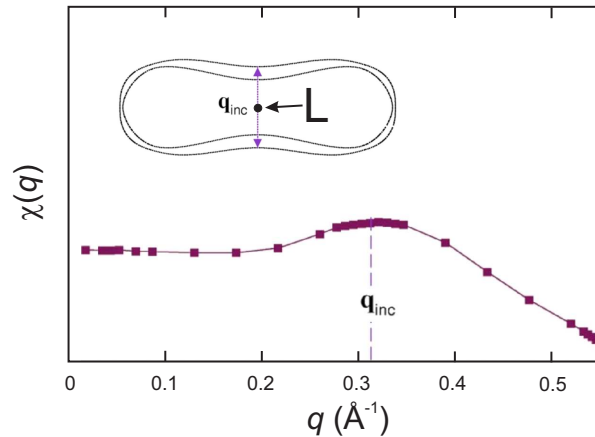
Ein zwangsläufiger Zusammenhang zwischen dem Auftreten eines Nestings der Fermifläche und dem Ausbilden einer helikal antiferromagnetischen Ordnung ist somit vor dem Hintergrund der oben diskutierten Folgen der Vernachlässigung der Matrixelemente nicht notwendigerweise gegeben. Die zum Teil sehr gute Übereinstimmung zwischen den in Neutronenstreuexperimenten beobachteten Perioden helikaler Phasen und theoretischen Vorhersagen für Nestingvektoren legt allerdings auch nahe, dass der Einfluss der Fermifläche auf $\chi(q)$ bei den schweren Lanthanidmetallen so stark ist, dass er für die magnetische Ordnung bestimmend ist. Sind beispielsweise bei den relevanten q die Übergangsmatrixelemente aus (6.4) nahezu konstant oder kompensieren sich dort Änderungen der Matrixelemente mit

³Beispielsweise wurde ein gaußförmiges $|M(q)|^2$ angenommen, das zur Folge hat, dass das Maximum in $\chi(q)$ weniger deutlich ausgeprägt ist und hin zu kleineren q verschoben ist, als bei konstantem $|M|^2$.

⁴siehe das in Ref. [Free 72] gezeigte Beispiel für paramagnetisches Cr

⁵Das in Ref. [Free 72] angeführte Beispiel für Pd-Metall zeigt eine zehn- bis fünfzehnfache Verstärkung von $\chi(0)$ bei wechselwirkenden Elektronen gegenüber den Rechnungen für $\chi(0)$ eines freien Elektronengases.

Abbildung 6.3: Magnetische Suszeptibilität $\chi(q)$ von Y sowie Fermiflächenquerschnitt (Band 3 und Band 4), der den zugehörigen Nestingvektor q_{inc} zeigt (nach Ref. [Thak 03]).



anderen Effekten, so ist die Form der Fermifläche der dominante Beitrag.

Auch in den folgenden Jahrzehnten lieferten zahlreiche theoretische und experimentelle Untersuchungen starke Hinweise für die Gültigkeit der Nestinghypothese⁶. Dabei berücksichtigen moderne theoretische Berechnungen von $\chi(q)$ die Übergangsmatrixelemente und bedienen sich bei ihrer Berechnung spezieller Näherungsverfahren. Sie gehen damit zentrale Probleme an, die den Vorhersagen der sechziger Jahre anhafteten. In der Literatur wird daher heutzutage weitgehend akzeptiert, dass das Vorhandensein von Nesting in der paramagnetischen Fermifläche die treibende Kraft für das Ausbilden einer helikal antiferromagnetischen Phase ist. Nur vereinzelt zweifeln Arbeiten diesen Zusammenhang an, wie beispielsweise die theoretische Arbeit von Takeuchi *et al.* [Take 00].

6.1.3 Beispiele aus der aktuellen Forschung

An konkreten Beispielen für Y und schwere Lanthanidmetalle wird nun der Zusammenhang zwischen Nesting der Fermifläche, Maxima der magnetischen Suszeptibilität und magnetischer Kopplung genauer diskutiert.

Die theoretische Studie von Thakor *et al.* [Thak 03] beschäftigt sich mit der Suszeptibilität $\chi(q)$ von Y (und auch der von Sc)⁷. Für Y ist $\chi(q)$ in Abbildung 6.3 dargestellt. Sie zeigt ein Maximum bei $q = q_{inc}$, wie es gemäß der im vorherigen Kapitel diskutierten Theorie für das nicht perfekte Nesting eines realen Metalls zu erwarten ist. Ebenfalls abgebildet ist ein Schnitt der Y-Fermifläche mit der MKHL-Ebene der Brillouinzone (s. *Inset*). In dem Querschnitt durch den nestenden Bereich der Fermifläche von Y ist der Nestingvektor q_{inc} bei L markiert, der die (nahezu) parallelen Flächensegmente verbindet. Dieser Vektor hat die Länge von

⁶siehe beispielsweise Ref. [Nord 00, Thak 03, Dugd 97, Fret 99, Andr 00, Andr 03, Andr 05, Crow 04, Hugh 07]

⁷Relativistische Effekte wie Spin-Bahn-Kopplung sind in den selbstkonsistenten *ab initio* RDMFT-Rechnungen (*relativistic density-functional theory*) berücksichtigt. Für Details zu dem verwendeten theoretischen Modell sei auf Ref. [Thak 03] und auf darin zitierte Arbeiten verwiesen.

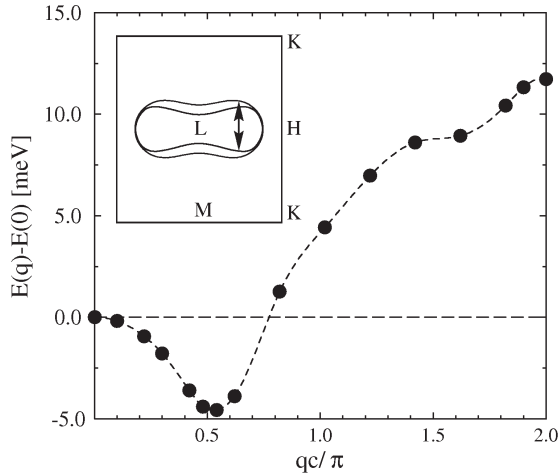


Abbildung 6.4: Gesamtenergie E pro Einheitszelle von Tm in Abhängigkeit des Wellenvektors der Helix q . Die Lage des Minimums in $E(q)$ entspricht der Länge des Nestingvektors. *Inset:* Schnitt durch den nestenden Bereich der Fermifläche entlang MKHL (Band 3 und Band 4); der Pfeil zeigt den Nestingvektor (aus Ref. [Nord 00]).

0.31 \AA^{-1} ; sie entspricht der Position des Maximums von $\chi(q)$. Für Sc — es weist ebenfalls eine hexagonale Struktur mit einem d und zwei s Valenzelektronen auf — finden die Autoren eine analoge Übereinstimmung zwischen dem Nestingvektor und $\chi(q)$ (hier nicht gezeigt).

Nordström und Mavromaras [Nord 00] finden in ihrer theoretischen Untersuchung zum magnetischen Ordnen der schweren Lanthanide bei einigen Metallen nestende Bereiche der Fermifläche⁸. Die zugehörigen Nestingvektoren stimmen gut mit den von ihnen vorhergesagten Perioden der Helices in den antiferromagnetischen Phasen überein. Wie am Beispiel von Tm in Abbildung 6.4 gezeigt, berechnen sie dazu die Gesamtenergie E des Systems pro Einheitszelle in Abhängigkeit der reziproken Periode der Helix q . Hierbei entspricht das Minimum in $E(q)$ der energetisch stabilen Spinkonfiguration. Im Widerspruch zu den meisten anderen Studien (insbesondere auch zu Thakor *et al.*), identifizieren sie einen Nestingvektor als verantwortlich für die antiferromagnetische Helix, der zwar in der Nähe des L-Punkts liegt, diesen aber nicht kreuzt (s. *Inset* Abb. 6.4).

Es liegen erste experimentelle Hinweise vor, dass der von Nordström und Mavromaras gefundene Nestingvektor für die Kopplung magnetischer Momente relevant ist. Im Rahmen der Diplomarbeit von M. Wietstruk [Wiet 06] haben wir Studien zur magnetischen Interlagenkopplung (*interlayer exchange coupling, IEC*) in Tb/Y/Gd-Trilagen durchgeführt (s. auch Ref. [Dobr 07b] und [Prie 05]). Dabei wurde die Kopplung der magnetisch weichen Gd-Lage an die magnetisch harte Tb-Lage abhängig von Temperatur und Y-Schichtdicke untersucht. Die Messungen wurden mittels XMOKE (*x-ray magneto-optical Kerr effect*) im weichen Röntgenbereich bei BESSY II durchgeführt. Die elektronische Valenzbandstruktur der paramagnetischen Y-Zwischenschicht ist für die IEC verantwortlich und führt zu einer mit der Y-Schichtdicke (und auch mit der Temperatur) oszillierenden Kopplung der Gd-Schicht an die Tb-Schicht. Die Messungen sind dabei so

⁸Die Autoren führen *ab initio* LAPW-Rechnungen (*linearized augmented plane-wave*) durch, die $4f$ -Elektronen werden als Teil des Elektronenrumpfs betrachtet (*Open-Core Treatment*), Näheres in Ref. [Nord 00].

angelegt, dass sie die Projektion der Kopplung auf die Richtung eines von außen angelegten Magnetfelds messen. Eine helikale IEC äußert sich in dieser Projektion als sinusförmig oszillierend zwischen ferro- und antiferromagnetisch. Die experimentell beobachtete Oszillationsperiode stimmt gut mit der Periode überein, die man aufgrund des Nestings bei Y erwartet. Der hierbei involvierte Nestingvektor ist der von Nordström *et al.* gefundene (s. *Inset* Abb. 6.4): Er kreuzt nicht den L-Punkt. Dennoch stellen unsere Ergebnisse keinen Widerspruch zu den Resultaten von Thakor *et al.* dar. Der q -Bereich, über den sich in Abbildung 6.3 das Maximum von $\chi(q)$ erstreckt und in dem es nahezu ein Plateau bildet (von ca. $0.27\text{--}0.35 \text{ \AA}^{-1}$), umfasst die Längen beider Nestingvektoren. Das breite Maximum in $\chi(q)$ zieht für die Kopplungsenergie ein ebenso breites Minimum nach sich, so dass Spinkonfigurationen mit verschiedenen q stabil sind. Alle Nestingvektoren, deren Längen innerhalb von $q = 0.27\text{--}0.35 \text{ \AA}^{-1}$ liegen, kommen also als reziproke Perioden der Helix in Frage. Welcher der Nestingvektoren relevant für die Kopplung ist oder ob möglicherweise eine Kombination der Einzelbeiträge verschiedener Vektoren die Periode der Helix bestimmt, kann aus den Rechnungen von Thakor *et al.* nicht abgeleitet werden.

Die von uns gemessene reziproke Periode der oszillatorischen Kopplung in Tb/Y/Gd-Trilagen von $0.42 \pm 0.03 \text{ \AA}^{-1}$ ist größer als von Thakor *et al.* vorhergesagt; sie liegt oberhalb des Maximums von $\chi(q)$. Allerdings ergeben im Rahmen unserer Kooperation mit dem Forschungszentrum Jülich von G. Bihlmayer durchgeführte Rechnungen für Y, einen größeren Nestingvektor der Länge 0.39 \AA^{-1} , der sehr gut zu den experimentellen Ergebnissen passt. (Ein zu Abb. 6.3 analoger Querschnitt durch die Y-Fermifläche entlang MKHL ist in Abb. 6.8 dargestellt.) Dies zeigt, dass das in Referenz [Thak 03] vorhergesagte Nesting zu klein ist.

Das folgende Kapitel beschäftigt sich eingehend mit der Fermifläche von Y. Es werden hierbei die Ergebnisse meiner Photoemissionsstudie mit den Rechnungen von G. Bihlmayer verglichen und Positronenannihilationsmessungen gezeigt, welche die ersten Messungen der Fermifläche von Y darstellen, die eine vollständige Brillouinzone abdecken.

6.2 Yttrium: Experiment und Theorie

Wie bereits erwähnt, dient die elektronische Struktur von Y vielen experimentellen und theoretischen Studien als Referenzbeispiel. An Y lassen sich wesentliche Aspekte der Valenzbänder und Fermiflächen untersuchen, ohne hierbei die magnetischen $4f$ -Momente der Lanthanidmetalle berücksichtigen zu müssen. So zeigt Y beispielsweise ein ebensolches Nesting der Fermifläche, wie jenes, das im Rahmen der Standardtheorie der magnetischen Kopplung (Kap. 6.1.1) für das Ausbilden einer helikal antiferromagnetischen Ordnung bei einigen schweren Lanthanidmetallen verantwortlich gemacht wird. Das Nesting in Y wurde erstmals von Dugdale *et al.* [Dugd 97] mittels Positronenannihilationsspektroskopie direkt experimentell nachgewiesen. Die Autoren zeigen dazu dreidimensionale Abbilder

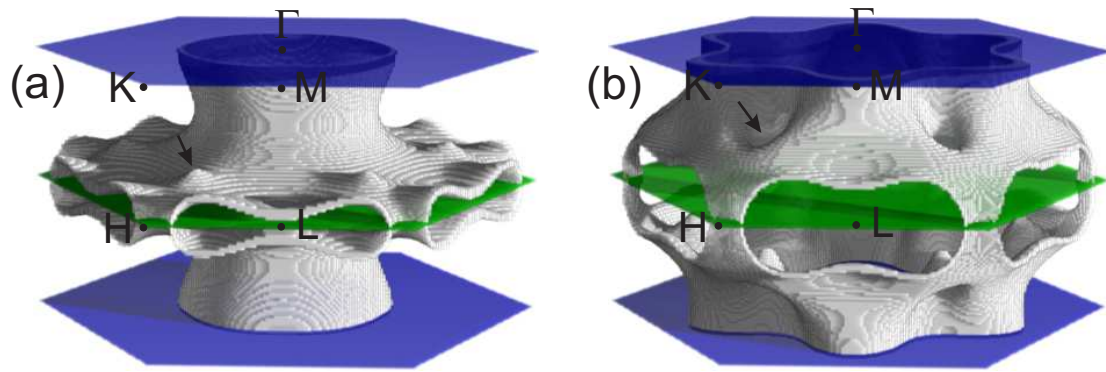


Abbildung 6.5: Berechnete Fermifläche von Y nach Ref. [Bihl 06]. In (a) ist die von Band 3 geformte Fläche gezeigt, die bei der Γ MK-Ebene (blau) eine zentrale säulenförmige Form aufweist und sich in der ALH-Ebene (grün) Richtung HL auswölbt (Nesting); (b) zeigt Band 4, welches Band 3 umschließt und ebenfalls ein Nesting bei L bildet.

der Fermifläche von Y, die eine komplette Brillouinzone abdecken. Die prinzipielle Möglichkeit, mittels Photoemission ebenfalls vollständige Datensätze von Fermiflächen eines dreidimensionalen Systems aus Seltenerd-Metallen aufzunehmen, ist lange bekannt, meines Wissens nach liegen allerdings bislang noch keine solchen Arbeiten vor. Der direkte Vergleich mit Positronenannihilationsdaten stellt folglich einen Nachweis der Leistungsfähigkeit und Zuverlässigkeit der Methode dar; er soll nun am Beispiel von Y (und im nächsten Kapitel auch für paramagnetisches Gd) erfolgen.

Zunächst werden anhand theoretischer Daten die allgemeinen Merkmale der Y-Fermifläche aufgezeigt. Band 3 formt eine zentrale säulenförmige Struktur um Γ A (Abb. 6.5(a)), die sich in der Nähe der ALH-Ebene (grün) ausbuchtet und den Rand der Brillouinzone in der Nähe der LH-Linie erreicht. Es bildet dort einen nestenden Bereich. Der Durchmesser des Nestings senkrecht zur LH-Linie und damit der entsprechende Nestingvektor, ist hierbei kleiner als der von Thakor *et al.* [Thak 03] vorhergesagte (vgl. auch Abb. 6.3 und 6.8). An der mit dem Pfeil markierten Stelle ist die Fläche von Band 3 hin zu Γ MK ausgebuchtet und berührt an der Spitze der Ausbuchtung Band 4. An dieser Stelle der Brillouinzone liegt eine Entartung der elektronischen Zustände bezüglich der Δ_1 - und der Δ_2 -Symmetrie vor (s. Kap. 2.4.4). Entsprechend ist an derselben Stelle die Fläche von Band 4 (Abb. 6.5(b)) in Richtung ALH „eingedellt“ (ebenfalls mit einem Pfeil markiert). Band 4 umschließt die von Band 3 gebildete Fläche und zeigt ebenfalls ein Nesting bei L. Der zugehörige Nestingvektor ist größer als in den Rechnungen von Thakor *et al.*

Abbildung 6.6 zeigt die mittels Photoemission gemessene Fermifläche von Y; es sind Beiträge der Bänder 3 und 4 vorhanden. Die Photoemissionsdaten sind wie in Anhang A beschrieben normiert und symmetrisiert und entlang der ALH-Ebene gespiegelt. Sie repräsentieren den Photonenenergiebereich von 105–130 eV, in welchem die Δ_2 -artigen Bänder mit hohen Intensitäten zu beobachten sind

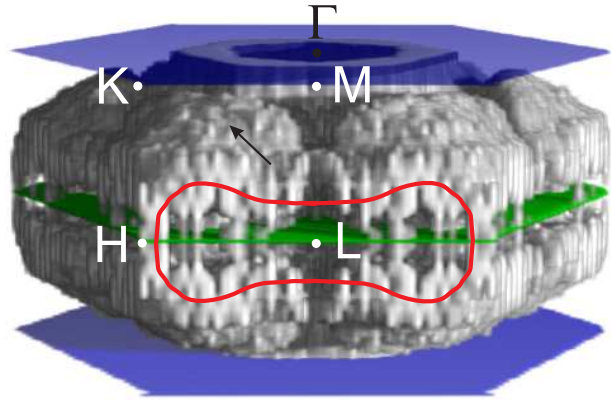


Abbildung 6.6: Mittels Photoemission gemessene Fermifläche von Y, bestehend aus Beiträgen der Bänder 3 und 4, die nicht getrennt aufgelöst werden. Sie zeigt ein Nesting bei L, dessen Querschnitt mit dem MKHL-Zonenrand mit einer roten Hilfslinie markiert ist.

(hier Band 3). Zusätzlich sind auch Beiträge des Δ_1 -artigen Bands 4 zu sehen (vgl. auch Diskussion zu Abb. 4.2). Sie sind besonders stark in der Nähe der ALH-Ebene, entlang der die elektronischen Zustände bezüglich der Δ_1 - und Δ_2 -Symmetrie entartet sind. Dort werden die Bänder 3 und 4 von der Photoemission nicht separat aufgelöst.

In der Γ MK-Ebene (blau) ist die zentrale (nahezu) ringförmige Struktur der Y-Fermifläche zu erkennen, deren Querschnitt bereits in Abbildung 5.1 gezeigt ist, und die von Band 3 geformt wird. Außerhalb von Γ MK wölbt sich die Fermifläche in Richtung des MKHL-Zonenrands aus, zeigt zunehmend Beimischungen von Band 4 und formt das Nesting in der Nähe von L. Es besteht aus (annähernd) zur ALH-Ebene parallelen Flächensegmenten. Die Fermikontur, die der Schnitt des Nestings mit der MKHL-Ebene bildet, ist mit einer roten Hilfslinie markiert. Sie repräsentiert einen Mittelwert aus Band 3 und 4 die hier nicht getrennt aufgelöst werden. In Übereinstimmung mit der Theorie kreuzt sie die LH-Linie in der Nähe von H. Ein detaillierter Vergleich des Nestings ist in Abbildung 6.8 gezeigt (MKHL-Querschnitt der Fermifläche).

In dem Bereich der Brillouinzone um die Γ H-Diagonale, in dem die Bänder 3 und 4 entartet sind, sind die Beiträge zur Photoemissionsintensität von Band 4 besonders stark. Aus diesem Grund folgt die gemessene Fermifläche dort dem Verlauf von Band 4 und zeigt die mit dem Pfeil markierte Ausbuchtung. Hierbei wird die enge schlauchförmige Einbuchtung der von Band 4 geformten Fläche (Abb. 6.5(b)) experimentell nicht aufgelöst.

Die mittels Positronenannihilation gemessene Fermifläche aus Referenz [Dugd 97] ist in Abbildung 6.7 gezeigt. Auf den ersten Blick vorhandene Unterschiede können auf die verschiedenen physikalischen Prozesse zurückgeführt werden, die beiden Methoden zugrunde liegen und die den Kontrast zwischen hohen und niedrigen Intensitätsmesswerten bedingen. Bei der Photoemission zeigen die Bereiche der Brillouinzone eine hohe Intensität, in denen elektronische Zustände bei $E = E_F$ vorliegen; diese sind in Abbildung 6.6 gezeigt. Die Positronenannihilation unterscheidet elektronen- und lochartige Bereiche der Brillouinzone. Band 3 formt eine lochartige Fermifläche, sodass die Region innerhalb dieser Fläche einen

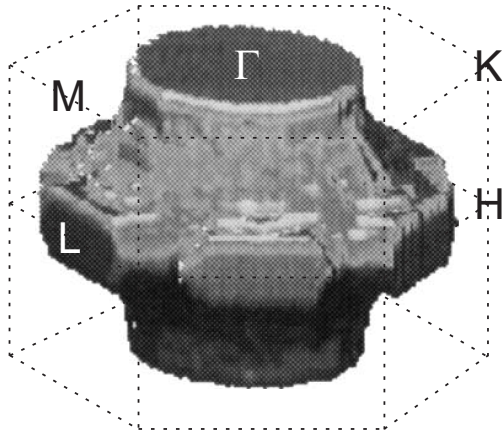


Abbildung 6.7: Positronenannihilationsdaten der Fermifläche von Y nach Ref. [Dugd 97].

starken Kontrast liefert [Dugd 94, Dugd 97, Fret 99]. Dieser Bereich ist in Abbildung 6.7 dargestellt und repräsentiert daher den Teil der Brillouinzone, der innerhalb der mittels Photoemission gemessenen Fermifläche liegt. Dies gilt ebenso für das Nesting bei L: Die in Abbildung 6.7 dargestellte Struktur liegt innerhalb der Photoemissionsfermifläche (dies wird auch anhand des in Abb. 6.8 gezeigten Vergleichs deutlich). Darüber hinaus wird klar, warum die Positronenannihilation im Wesentlichen die Fermifläche von Band 3 zeigt. Beiträge von Band 4 liegen vollständig außerhalb von Band 3 und damit im elektronenartigen Bereich der Brillouinzone.

Berücksichtigt man obige Überlegungen, so wird deutlich, dass die Übereinstimmung zwischen Photoemission und Positronenannihilation bei der Form der Fermifläche sehr gut ist. In Bereichen, in denen die Photoemission ausschließlich Beiträge von Band 3 zeigt, ist die Übereinstimmung direkt ersichtlich. Um die Γ MK-Ebene findet sich die zentrale ringförmige Struktur in beiden Abbildungen 6.6 und 6.7 wieder.

In Abbildung 6.8 wird das Nesting anhand des Querschnitts mit dem MKHL-Zonenrand genauer untersucht. Es werden Photoemission, Theorie und Positronenannihilation verglichen. Die dunklen Bereiche in den Photoemissionsdaten (a) zeigen den „hundeknochenförmigen“ Querschnitt durch das Nesting; sie entsprechen einer hohen gemessenen Intensität. Der grüne Doppelpfeil verbindet die Intensitätsmaxima, die sich aus Beiträgen von Band 3 und 4 zusammensetzen und repräsentiert den Nestingvektor der Länge $0.4 \pm 0.1 \text{ \AA}^{-1}$. Die Breite der Maxima beruht auf der intrinsischen Auflösung der Photoemission senkrecht zur Probenoberfläche (hier parallel zu KH) von $\pm 0.05 \text{ \AA}^{-1}$. Dies ist auch der Grund dafür, dass sich die Lage der ALH-Ebene mit einer Genauigkeit von $\pm 0.05 \text{ \AA}^{-1}$ bestimmen lässt. Die Spiegelung der Daten in Abb. 6.8 um die HL-Linie führt zu einem Fehlerbalken von $\pm 0.1 \text{ \AA}^{-1}$ bei Angaben zur Länge von Nestingvektoren. Als Nestingvektor wurde hier der Verbindungsvektor markiert, der nicht den L-Punkt kreuzt. Es ist der in den Rechnungen von Nordström *et al.* [Nord 00] als relevant für die Kopplung magnetischer Momente identifizierte Nestingvektor, der gut zu der Periode der von uns untersuchten magnetischen Kopplung in Y

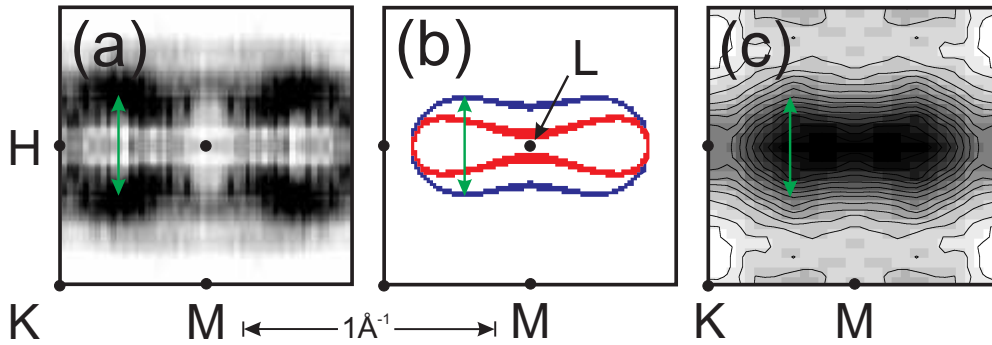


Abbildung 6.8: Schnitte durch die Fermifläche von Y entlang der MKHL-Ebene der hexagonalen Brillouinzone, die einen Querschnitt durch das Nesting zeigen; (a) Photoemission, (b) Theorie nach Ref. [Bihl 06] und (c) Positronenannihilation nach Ref. [Dugd 97]. Der Nestingvektor q (grüner Doppelpfeil) mit der Länge 0.4 \AA^{-1} verbindet die gemessenen Intensitätsmaxima in (a), denen dunkle Graustufen entsprechen. Sowohl Theorie als auch Positronenannihilation zeigen ein vergleichbares Nesting, wie anhand der grünen Pfeile in (b) und (c) zu erkennen ist.

passt [Wiet 06]. In (b) ist der entsprechende Querschnitt durch die theoretische Fermifläche von Y gezeigt (nach Ref. [Bihl 06]). Die Verläufe von Band 3 (rot) und Band 4 (blau) sind zu erkennen, der grüne Doppelpfeil entspricht dem Nestingvektor der Photoemission aus (a). Es wird eine sehr gute Übereinstimmung erzielt. Die in (c) abgebildeten Positronenannihilationsdaten sind Referenz [Dugd 97] entnommen und dort ebenfalls entlang der Linien ML und HL gespiegelt. Bänder 3 und 4 werden nicht getrennt aufgelöst, wobei der Bereich dunkler Graustufen bei L im Wesentlichen dem Innern der von Band 3 geformten Kontur entspricht. Der mit dem grünen Doppelpfeil markierte Nestingvektor aus (a) ist eingezeichnet und verdeutlicht die gute Übereinstimmung mit der Photoemission. Für den Nestingvektor, der L kreuzt (analog zu Thakor *et al.* Abb. 6.3), geben die Autoren eine Länge von $0.30 \pm 0.01 \text{ \AA}^{-1}$ an, welches ebenfalls im Rahmen der experimentellen Fehlerbalken mit den Ergebnissen der Photoemission übereinstimmt. In den Referenzen [Chil 65, Waka 74] wurden mittels Neutronenstreuung an Y, das mit einem geringen Anteil Tb legiert wurde, magnetische Strukturen mit einer vergleichbaren reziproken Periode beobachtet; auch für die Legierung $\text{Y}_{0.995}\text{Er}_{0.005}$ fanden sich analoge Perioden [Caud 90].

Aus dem hier gezeigten Vergleich von Photoemissions- und Positronenannihilationsmessungen der Fermifläche von Y kann die Schlussfolgerung gezogen werden, dass beide Verfahren gut miteinander vergleichbare Ergebnisse liefern. Dies gilt insbesondere für den direkten experimentellen Nachweis des Nestings einer Fermifläche. Im Folgenden wird die Fermifläche von Gd behandelt. Für paramagnetisches Gd liegen ebenfalls Daten der Positronenannihilation vor, die einen Vergleich erlauben.

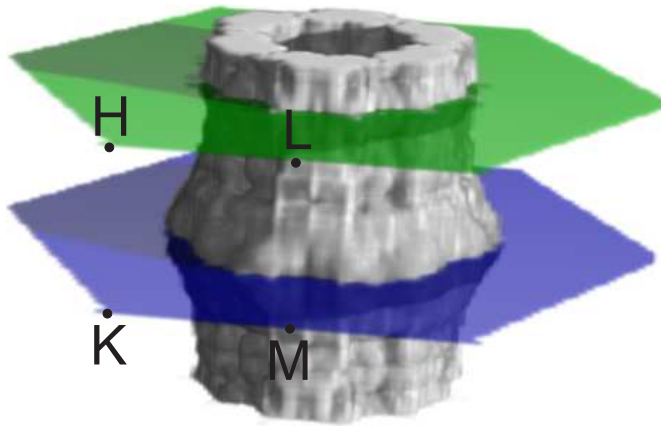


Abbildung 6.9: Fermifläche von paramagnetischem Gd ($T = 300$ K), mittels Photoemission gemessen. Band 3 formt eine zentrale säulenartige Struktur (um die Γ A-Linie), die in der Γ MK-Ebene (blau) den größten Durchmesser aufweist.

6.3 Gadolinium

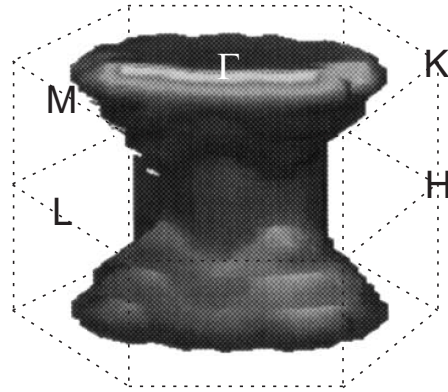
Gadolinium ist das erste Metall dieser Studie, bei dem mittels Photoemission in einer kompletten Brillouinzone die Änderungen der Fermifläche untersucht werden, die der Phasenübergang para- nach ferromagnetisch hervorruft. Hierbei sind ausschließlich Beiträge des Δ_2 -artigen Bandes 3 zu sehen. Das Δ_1 -artige Band 4 zeigt im untersuchten Photonenenergiebereich eine vernachlässigbar geringe Photoemissionsintensität, in Übereinstimmung mit den Abbildungen der Bandstrukturen aus Kapitel 4 (Abb. 4.4(a) und 4.6(a)).

6.3.1 Paramagnetische Fermifläche

Abbildung 6.9 zeigt die Fermifläche von Gd bei Raumtemperatur. Die Photoemissionsdaten sind wie in Anhang A beschrieben normiert und symmetrisiert sowie an der Γ MK-Ebene (blau) gespiegelt; gleiches gilt für alle weiteren mit Photoemission gemessenen Fermiflächen, die im Folgenden gezeigt werden. Es ist eine säulenartige, um die Γ A-Linie zentrierte Struktur zu erkennen, die vom Δ_2 -artigen Band 3 geformt wird (Photonenenergiebereich 85–105 eV). Die Gd-Fermifläche zeigt den Bereich größten Durchmessers in der Γ MK-Ebene (blau) und verjüngt sich in Richtung ALH-Ebene (grün). Dies entspricht dem in Abbildung 5.6(a) dargestellten Verhalten von Band 3, den Brillouinzonrand auf halbem Weg zwischen A und L zu kreuzen. Bei Gd gibt es somit kein Nesting der paramagnetischen Fermifläche, nicht wie bei Y, bei dem Band 3 den Zonenrand entlang der ML-Linie nahe bei L erreicht (s. Abb. 5.5). Dieser entscheidende Unterschied zwischen Gd und Y ist bereits aus den in Kapitel 4 gezeigten Bandstrukturen ersichtlich. Bei Gd liegt Band 3 sowohl am M-Punkt (Abb. 4.4(a)) als auch am L-Punkt (Abb. 4.5) unterhalb der Fermienergie. Eine Kreuzung mit E_F entlang ML, die zu Nesting führt, tritt somit nicht auf. Anders verhält es sich bei Y; Band 3 liegt bei M unterhalb und bei L oberhalb der Fermienergie (s. Abb. 4.2 bzw. 4.3 und auch Theorie Abb. 4.1).

Die von Fretwell *et al.* [Fret 99] mittels Positronenannihilation gemessene pa-

Abbildung 6.10: Mit Positronenannihilation gemessene Fermifläche von paramagnetischem Gd nach Ref. [Fret 99], entlang Γ MK aufgeschnitten. Wie auch in der Photoemission wird eine zentrale säulenartige Struktur beobachtet, mit maximalem Durchmesser in der Γ MK-Ebene.



ramagnetische Gd-Fermifläche (Abb. 6.10) beinhaltet ebenfalls nur Beiträge von Band 3 (lochartige Bereiche der Brillouinzone, analog zu Y). Die Autoren bewiesen erstmals in einem direkten Experiment, dass die Gd-Fermifläche kein Nesting aufweist. Die Daten sind entlang der Γ MK-Ebene aufgeschnitten, bei welcher die Fermifläche den größten Durchmesser zeigt. Die Photoemissionsdaten bestätigen mit einer sehr guten Übereinstimmung die in Referenz [Fret 99] beobachtete Form der Fermifläche.

6.3.2 Ferromagnetische Fermifläche

Wie bereits erwähnt liegt der entscheidende Vorteil der Photoemission in der kurzen Zeit zur Datenaufnahme: wenige Stunden im Vergleich von bis zu sechs Monaten bei der Positronenannihilation [Crow 04]. Dies ermöglicht die Untersuchung der Fermiflächen bei magnetischen Phasenübergängen.

In Kapitel 5.1.2 wurden im Zusammenhang der Gd-Fermikonturen in der Γ MK-Ebene die Auswirkungen des Phasenübergangs auf die elektronischen Zustände bereits angesprochen. Es wurde erläutert, dass die im Paramagnetischen spinentarteten Zustände durch die Austauschspaltung der ferromagnetischen Phase in einen Majoritäts- und einen Minoritätsanteil aufspalten und sich bei tiefen Temperaturen weiter voneinander entfernen. Lochartige Majoritätsfermiflächen schrumpfen und bewegen sich dabei in Richtung ihres Zentrums. Dies ist anhand des Vergleichs beider Fermiflächen aus Abbildungen 6.9 (paramagnetisch) und 6.11 (ferromagnetisch) deutlich zu erkennen. Die zentrale säulenartige Struktur der ferromagnetischen Gd-Fermifläche ($T = 50$ K, $h\nu = 85\text{--}105$ eV) wird von Band $3\uparrow$ geformt. Sie ist von einer hexagonalen Struktur umgeben, die von Band $3\downarrow$ gebildet wird und ebenfalls lochartig ist. Lochartige Minoritätsfermiflächen werden größer und entfernen sich mit zunehmender Austauschspaltung von ihrem Zentrum.

In Abbildung 6.11 ist, wie auch bei den anderen ferromagnetischen Fermiflächen dieses Kapitels, ein kleiner Teil der von Band $3\downarrow$ geformten Fermifläche nicht zu sehen ist. Es handelt sich um den nahezu parallel zur Γ MK-Ebene verlaufenden Bereich, der am oberen und unteren Rand der hexagonalen Struktur anschließt (mit Pfeilen markiert) und sich Richtung des MKHL-Zonenrands ausdehnt. Ursa-

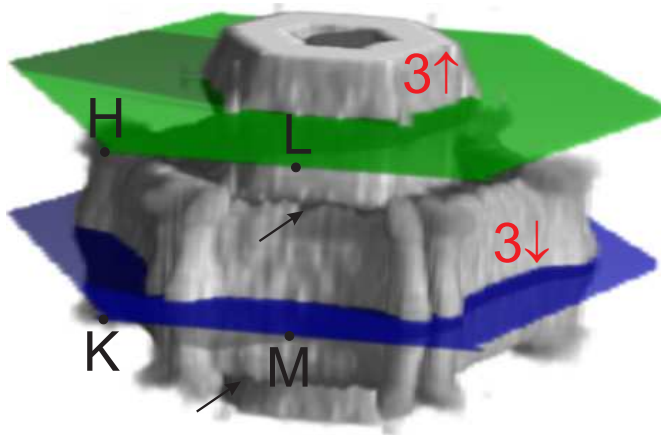


Abbildung 6.11: Fermifläche von ferromagnetischem Gd ($T = 50$ K), Photoemissionsdaten. Band 3 ist austauschungsgepalten. Das Majoritätsband formt die zentrale säulenartige Struktur, die bei Γ MK von einem Hexagon umgeben ist, welches von Band $3\downarrow$ gebildet wird.

che hierfür ist, dass die Bänder in der Nähe des MKHL-Zonenrands einen geringen Photoemissionswirkungsquerschnitt aufweisen, welches bereits aus den Abbildungen der Bandstrukturen in Kapitel 4 ersichtlich ist. Der Verlauf der ferromagnetischen Fermiflächen von Gd kann in dieser Region der Brillouinzone dennoch abgeschätzt werden, nämlich aus dem in Abbildung 5.6(b) gezeigten Schnitt durch die Photoemissionsdaten entlang Γ ALM. Die horizontalen Bereiche von Band $3\downarrow$ sind dort trotz geringer Intensität zu erkennen. Die berechnete Fermifläche von ferromagnetischem Tb in Abbildung 6.16 zeigt den Verlauf von Band $3\downarrow$ in der Nähe des Zonenrands, der sich analog zu Gd verhält.

6.4 Terbium und Dysprosium

In den bisher veröffentlichten Studien wurde die Existenz des Nestings in den paramagnetischen Fermiflächen von Y [Dugd 97] und der Legierung $\text{Gd}_{0.62}\text{Y}_{0.38}$ [Fret 99] experimentell nachgewiesen. Letztere weist eine helikal antiferromagnetische Phase unterhalb von $T = 200$ K auf. Für ein reines Metall der Lanthanidserie, welches eine helikale Ordnung zeigt, steht ein solcher Nachweis noch aus. Dazu werden im Folgenden die bei Tb und Dy sehr ähnlichen Fermiflächen in der paramagnetischen Phase untersucht. Wie auch bei Gd werden die Beiträge von Band 3 diskutiert, welches im untersuchten Photonenenergiebereich eine hohe Intensität zeigt.

6.4.1 Paramagnetische Fermiflächen

Die Fermifläche von paramagnetischem Tb ist ähnlich zu der von Y. Dies ist aus der in Abbildung 6.12 gezeigten Rechnung ersichtlich. Die zentrale säulenförmige Struktur ist erkennbar, die in der Γ MK-Ebene einen vergrößerten Radius aufweist. In der Nähe der ALH-Ebene ist sie in Richtung des LH-Zonenrands ausgewölbt und formt das Nesting senkrecht zu LH, welches hier entlang des ALH-Zonenrands aufgeschnitten ist. Die von Band 4 geformte Fermifläche ist hier nicht gezeigt.

Abbildung 6.12: Berechnete Fermifläche von paramagnetischem Tb nach Ref. [Bihl 06]. Es ist der Beitrag von Band 3 dargestellt, der ein Nesting senkrecht zur LH-Linie aufweist (entlang ALH aufgeschnitten).

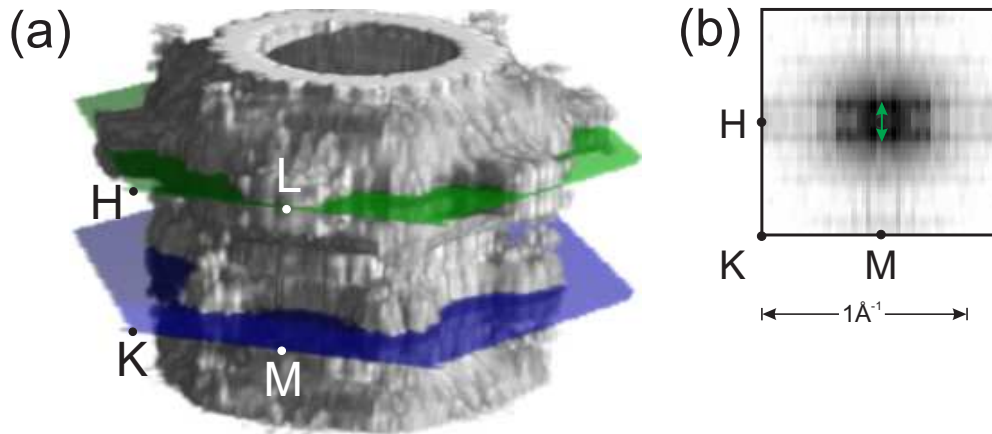
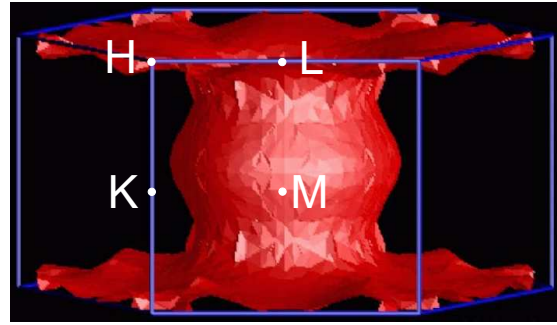


Abbildung 6.13: (a) Fermifläche von paramagnetischem Tb ($T = 240$ K); sie zeigt ein Nesting bei L, wie hier erstmals im Experiment direkt beobachtet. (b) Photoemissionsintensitäten entlang des MKHL-Zonenrands (Querschnitt durch Nesting). Der grüne Doppelpfeil gibt die Ausdehnung des Bereichs maximaler Intensität bei L wieder.

Wie auch bei Y (s. Abb. 6.5(b)) umschließt sie die Struktur des Bandes 3 und formt ein Nesting bei L. Die hier gezeigten theoretischen Ergebnisse zeigen gute qualitative Übereinstimmung mit den ersten Rechnungen zur paramagnetischen Tb-Fermifläche, die von Jackson im Jahre 1969 durchgeführt wurden [Jack 69].

Abbildung 6.13(a) zeigt die mittels Photoemission gemessene paramagnetische Fermifläche von Tb ($T = 240$ K, $h\nu = 105\text{--}130$ eV), die aus der zentralen säulenartigen Band 3-Struktur besteht. Bei L zeigt sie ein Nesting, welches von geringerer Ausdehnung ist als bei Y, mit entsprechend kleinerem Nestingvektor. Für ein reines Lanthanidmetall wurde von mir hiermit erstmals das Nesting direkt experimentell beobachtet. Die von der Theorie vorhergesagte „Hundeknochenform“ mit größer werdendem Nestingvektor hin zu H wird nicht beobachtet bzw. nicht aufgelöst. Dies ist auch anhand der Photoemissionsintensitäten entlang des MKHL-Zonenrands (Abb. 6.13(b)) zu erkennen, der einen Querschnitt durch das Nesting zeigt. Bei L liegt ein Bereich hoher Intensität vor, dessen Maximum in ML-Richtung $0.2 \pm 0.1 \text{ \AA}^{-1}$ ausgedehnt ist (grüner Doppelpfeil). Die geringe Größe des Nestings wird im Rahmen der Standardtheorie mit dem kleinen Temperaturintervall von ca. 10 K in Verbindung gebracht, in dem sich die helikal antiferroma-

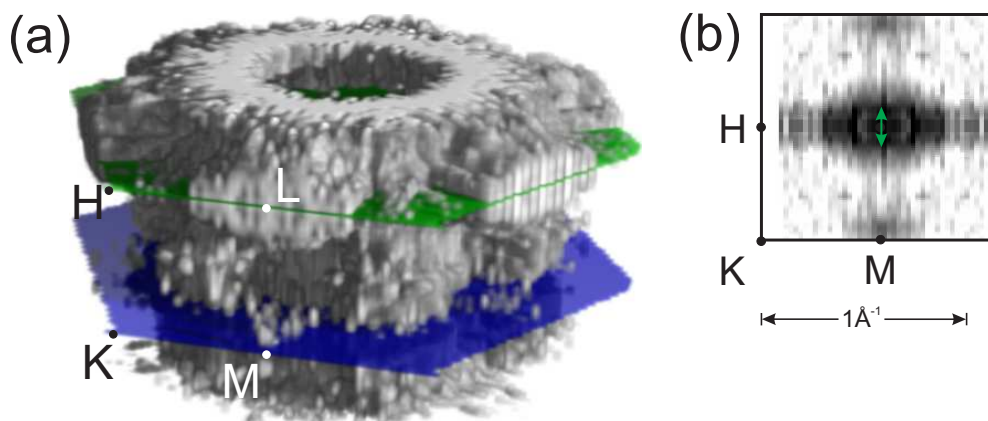


Abbildung 6.14: (a) Die Fermifläche von paramagnetischem Dy ($T = 200$ K) zeigt ebenfalls ein Nesting, das in LH-Richtung weiter ausgedehnt ist als bei Tb. (b) Photoemissionsintensitäten entlang MKHL; die Breite des Bereichs maximaler Intensität bei L ist mit einem grünen Doppelpfeils markiert.

netische Phase ausbildet ($T_N = 230$ K, $T_C = 220$ K). In Abbildung 6.13(a) sind darüber hinaus in der Γ MK-Ebene Ausbuchtungen der Fermifläche in Richtung K zu sehen. Sie werden von Band 2 bedingt, das entlang der Γ K-Linie der Fermienergie nahe kommt, diese aber nicht kreuzt (vgl. Abb. 4.2 und 4.4(a), die für Y bzw. Gd Photoemissionsmessungen der Bandstruktur zeigen). Aufgrund der endlichen Energieauflösung der Photoemission — im vorliegenden Experiment ca. 60 meV (FWHM) — trägt es zur gemessenen Intensität bei $E = E_F$ bei, allerdings mit einer deutlich geringeren Maximalintensität als Band 3.

Die paramagnetische Fermifläche von Tb nimmt verglichen mit Y und Gd eine Zwischengestalt ein. Gleiches gilt für paramagnetisches Dy, welches im Folgenden betrachtet wird. Die Ursachen für die unterschiedlichen Fermiflächen von Gd, Tb und Dy wird weiter unten diskutiert.

Die paramagnetische Fermifläche von Dy (Abb. 6.14(a)), gemessen bei $T = 200$ K im Photonenenergiebereich von 105–130 eV, ist in weiten Teilen sehr ähnlich zu Tb (Es sind hier ebenfalls Beiträge von Band 3 dargestellt). Als Unterschied fällt auf, dass das Nesting in LH-Richtung weiter ausgedehnt ist. Dies kann mit dem größeren Temperaturbereich von etwa 100 K in Verbindung gebracht werden, in dem Dy helikal antiferromagnetisch ordnet ($T_N = 180$ K, $T_C = 90$ K). Zur genaueren Untersuchung des Nestings sind in (b) die Photoemissionsintensitäten entlang des MKHL-Zonenrands dargestellt. Bei L zeigt sich das Nesting als Bereich starker Intensität, dessen Maximum in ML-Richtung $0.2 \pm 0.1 \text{ \AA}^{-1}$ ausgedehnt ist (grüner Pfeil). Neutronenstreuexperimente zu den Perioden der Helices von Tb und Dy knapp unterhalb von T_N geben für Dy und Tb reziproke Perioden von 0.26 \AA^{-1} bzw. 0.13 \AA^{-1} [Wilk 61, Diet 67, Koeh 72]. Gemäß der Standardtheorie der magnetischen Kopplung bei Lanthanidmetallen kann man daraus für Dy auf einen doppelt so langen Nestingvektor schließen. Dies ist vereinbar mit meinen Photoemissionsmessungen, die bei der Bestimmung von Nes-

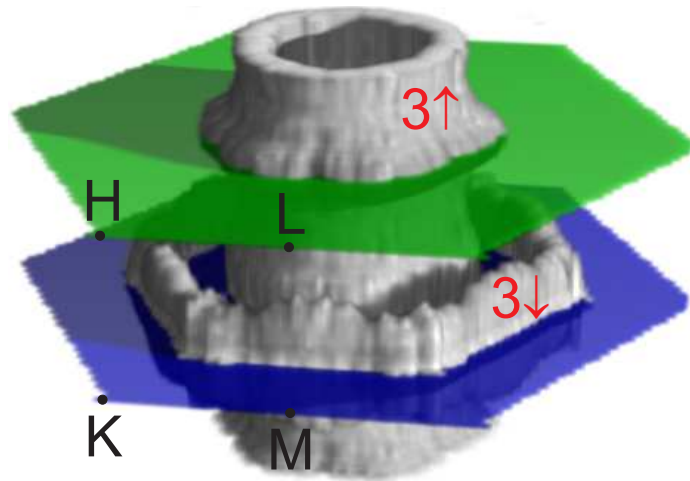


Abbildung 6.15: Bei ferromagnetischem Tb ($T = 25$ K) besteht die Fermifläche aus einem Majoritätsanteil (zentrale säulenförmige Struktur) und aus einem hexagonalen Minoritätsanteil um die Γ MK-Ebene (analog zu Gd).

tingvektoren in ML-Richtung den experimentellen Fehlerbalken von $\pm 0.1 \text{ \AA}^{-1}$ aufweisen. Theoretische Vorhersagen für das hier erstmals experimentell beobachtete Nesting bei paramagnetischem Dy finden sich in Referenz [Keet 68]. Die in Abbildung 6.14(b) beobachtete bei M leicht erhöhte Photoemissionsintensität ist wahrscheinlich auf Band 4 zurückzuführen, welches dort sehr dicht unterhalb des Fermi-niveaus verläuft.

Die wesentlichen Unterschiede zwischen metallischem Gd, Tb und Dy sind — abgesehen von der $4f$ -Besetzung — geringfügig kleiner werdende c/a -Verhältnisse sowie die aufgrund der Lanthanidenkontraktion kleiner werdenden Wigner-Seitz-Zellen. Welchen Einfluss diese Parameter auf die Form der Fermiflächen und auf das magnetische Ordnungsverhalten haben, wurde erstmals systematisch in der kürzlich veröffentlichten theoretischen Studie von Hughes *et al.* [Hugh 07] untersucht. Die Autoren kommen zu dem Ergebnis, dass beides, ein kleineres c/a -Verhältnis und eine kleinere Wigner-Seitz-Zelle, das Fermiflächen-Nesting und die Tendenz, eine inkommensurable antiferromagnetische Helix auszubilden, verstärken. (Abb. 3 in Ref. [Hugh 07] zeigt das vorhergesagte Ordnungsverhalten in Abhängigkeit von c/a und der Zellengröße.) Die Gitterkonstanten von Gd liegen in dem Parameterbereich, in dem kein Nesting auftritt. Geringfügig abweichende Parameter bei Tb führen zu einem schwach ausgeprägten Nesting; bei Dy ist das Nesting stärker ausgeprägt aufgrund des noch kleineren c/a und der Lanthanidenkontraktion. Meine experimentell bestimmten Fermiflächen bestätigen die Vorhersagen für Gd, Tb und Dy.

Auf Gemeinsamkeiten und Unterschiede der Fermiflächen der drei Metalle in der ferromagnetischen Phase wird im Folgenden eingegangen.

6.4.2 Ferromagnetische Fermiflächen

Ein Kühlen der Proben auf $T = 25$ K (in die ferromagnetische Phase) bringt das Nesting bei L zum Verschwinden. Es ist in der Fermifläche von Tb, gemessen bei $h\nu = 105\text{--}130$ eV, nicht vorhanden (Abb. 6.15). Grund ist die Austauschspal-

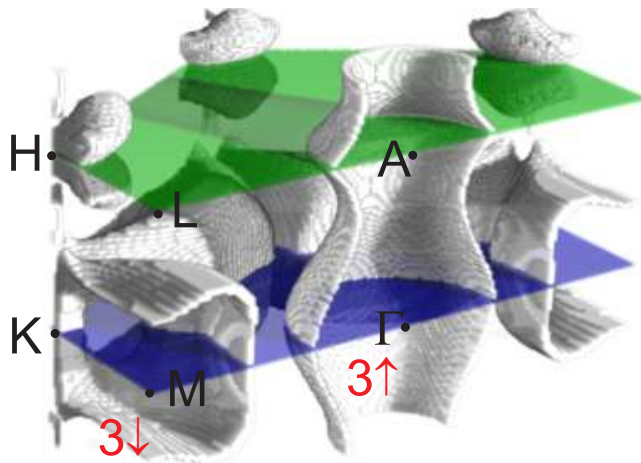


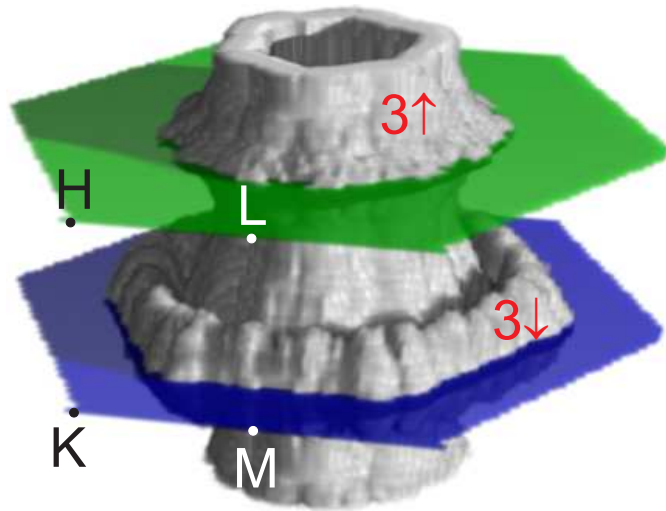
Abbildung 6.16: Berechnete Fermifläche von ferromagnetischem Tb nach Ref. [Bihl 06]. Sowohl die von Band $3\uparrow$ geformte zentrale Struktur als auch der sie umgebende Beitrag von Band $3\downarrow$ sind zu erkennen.

tung, die von L ausgehend Majoritätszustände in Richtung A und Minoritätszustände in Richtung M verschiebt, welches schließlich zu einem Aufreißen des Nestings und zu dessen Verschwinden führt. In der Tieftemperaturphase ist die Fermifläche von ähnlicher Gestalt wie bei Gd. Band $3\uparrow$ bildet die zentrale Struktur, die etwas größer ist als bei Gd (aufgrund der geringeren Austauschspaltung). Auch das von Band $3\downarrow$ geformte Hexagon findet sich wieder. Wie bereits im Zusammenhang mit Gd erwähnt, sind die parallel zur ΓMK -Ebene verlaufenden Bereiche der Band $3\downarrow$ -Fermifläche nicht zu sehen. Sie zeigen eine zu geringe Photoemissionsintensität, aufgrund kleiner Übergangsmatrixelemente in der Umgebung des MKHL -Zonenrands. Ihr Verlauf ist jedoch aus dem Schnitt entlang ΓMLA (Abb. 5.6(d) und 5.7(b)) ersichtlich, welcher gut mit den Vorhersagen der Theorie (Abb. 5.7(c)) übereinstimmt.

Abbildung 6.16 zeigt die berechnete Fermifläche von ferromagnetischem Tb (Beiträge der Δ_2 -artigen Bänder). Die hexagonale Struktur von Band $3\downarrow$ in der Nähe der ΓMK -Ebene ist zu sehen, wie auch deren Abknicken und Fortsetzung in Richtung des MKHL -Zonenrands (nahezu parallel zu ΓMK). Für die zentrale Struktur (Band $3\uparrow$) ist die Übereinstimmung mit den experimentellen Daten in der ΓMK -Ebene exzellent (s. auch Abb. 5.3). In Richtung A zeigt die theoretische Fermifläche jedoch einen zu geringen Durchmesser; sie erreicht die ALH -Ebene zu dicht bei A (s. hierzu auch den Vergleich entlang ΓMLA aus Abb. 5.7(c)). Um die KH -Linie zeigt die Theorie einen dünnen, linienförmigen Bereich der Fermifläche, der sich in der Nähe von H zu einem tropfenförmigen Gebilde ausbuchtet. Dieser Teil der Fermifläche wird von Beiträgen der Bänder $1\downarrow$ und $2\downarrow$ geformt, die entlang KH entartet sind (s. Abb. 4.11(b)). In der Photoemission finden sich Anzeichen dieser Struktur, die sich in einer gegenüber dem Untergrund sehr leicht erhöhten Intensität entlang der KH -Linie niederschlägt. Beispielsweise ist dies am K-Punkt in Abbildung 5.3(a) erkennbar.

Bei der in Abbildung 6.17 dargestellten ferromagnetische Fermifläche von Dy ($T = 25 \text{ K}$, $h\nu = 105\text{--}130 \text{ eV}$) fällt auf, dass das Minoritätshexagon und die zentrale säulenförmige Majoritätsstruktur in der ΓMK -Ebene dichter beieinander

Abbildung 6.17: In der ferromagnetischen Phase von Dy ($T = 25$ K) bildet das Majoritätsband eine zentrale säulenförmige Struktur, die in der Γ MK-Ebene einen größeren Durchmesser besitzt als bei Tb und Gd. Dadurch ist der Abstand zum Minoritätshexagon geringer.



liegen als bei Tb und Gd. Gründe hierfür sind die bei Dy geringere Austauschspaltung und die bei Γ MK stärker nach außen gewölbte Majoritätsfermifläche (s. auch Schnitte entlang Γ MLA in Abb. 5.6).

6.4.3 Weiterführende Experimente

Ich haben im Verlauf des vorliegenden Kapitels gezeigt, dass die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Photoemissionsmessungen in hohem Maße geeignet sind, die Gestalt der Fermiflächen der schweren Lanthanidmetalle und die des verwandten Y zu untersuchen. Für die paramagnetischen Fermiflächen von Y und Gd liefert die Photoemission Ergebnisse, die mit den Resultaten der Positronenannihilation sehr gut vergleichbar sind. Für paramagnetisches Tb und Dy zeige ich erstmals experimentell das Nesting bei L. Diese Ergebnisse sind im Einklang mit der in der Literatur weitgehend akzeptierten Standardtheorie der magnetischen Kopplung der schweren Lanthanidmetalle, die das Ausbilden der helikal antiferromagnetischen Phasen bei Tb und Dy — wie auch bei Ho — auf das Auftreten des Nestings bei L in der paramagnetischen Fermifläche zurückführt. Meine experimentellen Ergebnisse stützen damit die Nestinghypothese.

Weiterhin zeigte ich erstmals in einem direkten Experiment die Gestalt der ferromagnetischen Fermiflächen von Gd, Tb und Dy, aus denen deutlich wird, dass bei tiefen Temperaturen kein Nesting vorliegt. Das experimentelle Nachvollziehen der Umstrukturierung der Fermifläche über einen Temperaturbereich, der die para-, antiferro- und ferromagnetischen Phasen abdeckt, ist für künftige Messungen von sehr großem Interesse. Erste von mir durchgeführte vorläufige Messungen an Tb und Dy sind äußerst vielversprechend. Sie zeigen die Grenzen der Gültigkeit im Rahmen der Standardtheorie formulierten Nestinghypothese auf, welche ausschließlich von der paramagnetischen Bandstruktur ausgeht. Der in Kapitel 6.1 formulierte Zusammenhang von Fermiflächen-Nesting und einer helikalen Anordnung der magnetischen Momente ist daher nur bei der Temperatur gültig, bei

welcher sich erstmals eine langreichweitige magnetische Ordnung ausbildet. Behandelt man die mit der magnetischen Ordnung einhergehende Austauschspaltung der Bänder als Störung des paramagnetischen Systems, so lassen sich die Überlegungen aus Kapitel 6.1 erweitern.

In dem Übersichtsartikel von Liu [Liu 78] wird anhand einer perfekt nestenden Fermifläche (s. Abb. 6.2) diskutiert, welche Auswirkung eine beginnende Austauschspaltung der elektronischen Zustände bei Temperaturen unterhalb des magnetischen Phasenübergangs auf $\chi(q)$ hat. In einem einfachen Modell zeigt er, dass sich bei Zunahme der Austauschspaltung ein Maximum in $\chi(q)$ zu kleineren q verschiebt und dabei breiter wird und betragsmäßig abnimmt (s. auch Ref. [Even 69]). Dies bringt er mit dem Aufreißen des Nestings in Verbindung: Majoritäts- und Minoritätsbänder spalten auf und verschieben ihre Energielagen relativ zur paramagnetischen Bandstruktur. Ihre Schnittpunkte mit dem Fermi-niveau verschieben sich und das Nesting verschwindet (in Kap. 5.2.2 diskutiert). Liu zieht die (vorsichtige) Schlussfolgerung, dass das bei tiefen Temperaturen kleiner werdende und zu kleineren q verschobene $\chi(q)$ den Phasenübergang helikal antiferromagnetisch nach ferromagnetisch (bei Tb) erklären kann (s. Ref. [Liu 78], S. 324).

Moderne Rechnungen für die schweren Lanthanidmetalle bestätigen das von Liu gefundene Verhalten für $\chi(q)$ qualitativ. Nordström *et al.* [Nord 00] finden in ihren Rechnungen (für Ho) bei zunehmender Austauschspaltung ein Minimum der freien Energie $E(q)$, das sich zu kleineren q verschiebt und dabei betragsmäßig kleiner wird.

Für die antiferromagnetische Helix bedeutet dieses Verhalten von $\chi(q)$ und $E(q)$ zum einen, dass ihre reziproke Periode bei abnehmender Temperatur kleiner wird. Dies wurde auch in Neutronenstreuexperimenten beobachtet⁹. Zum anderen wird der Energiebeitrag, der auf das Nesting zurückzuführen ist und der eine Spin-helix stabilisiert, bei tiefen Temperaturen kleiner und sein Einfluss geringer. Es ist daher naheliegend, dass insbesondere bei Temperaturen im Übergangsbereich zwischen antiferro- und ferromagnetischer Ordnung die Energiebeiträge weiterer Effekte berücksichtigt werden müssen, aus deren Zusammenspiel sich die vorliegende magnetische Ordnung ergibt. Mittels Photoemission kann man hierbei experimentell die Form der Fermifläche untersuchen und nachvollziehen, ob ein Nesting vorliegt.

Abbildung 6.18(a) zeigt die Fermifläche von Tb bei einer Temperatur $T = 210$ K ($h\nu = 105\text{--}130$ eV), die knapp unterhalb der Curietemperatur liegt. Klar zu sehen ist das Nesting bei L, welches trotz der bei dieser Temperatur vorliegenden ferromagnetischen Ordnung noch vorhanden ist. Eine mögliche Ursache ist, dass ein schwacher Beitrag des Nestings von Matrixelementeffekten kompensiert wird, die das Maximum von $\chi(q)$ zu $q = 0$, d.h. ferromagnetische Ordnung, verschieben können. Eine weitere denkbare Ursache für eine unterdrückte antiferromagnetische

⁹Abbildung 3.3 in dem Übersichtsartikel von Koehler [Koeh 72] fasst die Ergebnisse der Neutronenstreuexperimente für Tb, Dy, Ho, Er und Tm zusammen.

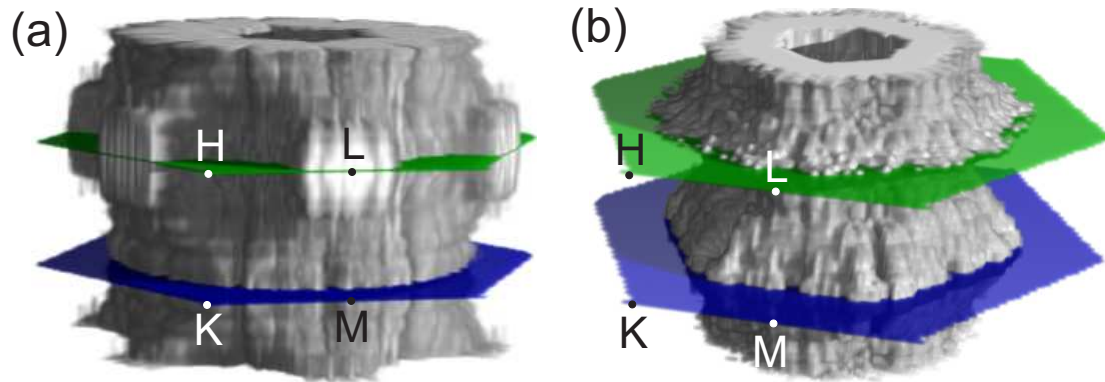


Abbildung 6.18: (a) Fermifläche von Tb bei $T = 210$ K, knapp unterhalb der Curie-temperatur. Trotz bei diesen Temperaturen vorliegender ferromagnetischer Ordnung ist das Nesting bei L vorhanden. (b) Fermifläche von Dy bei $T = 140$ K. In diesem Temperaturbereich liegt eine antiferromagnetische Ordnung vor, obwohl kein Nesting bei L vorhanden ist.

Helix ist der Einfluss der Spin-Bahn-Kopplung (*spin-orbit coupling*, SOC), die in der Standardtheorie keine Berücksichtigung findet. Die bei Terbium sehr starke SOC koppelt die Orientierung des $4f$ -Moments an das Kristallfeld und führt zu einer starken magnetischen Anisotropie und magnetoelastischen Effekten. In diesem Zusammenhang ist die Durchführung neuer Rechnungen wünschenswert, die solche Effekte berücksichtigen. Auch experimentell stehen wir hier noch am Anfang. Für Tb sind weitere Messungen notwendig, die zeigen, bei welchen Temperaturen das Nesting verschwindet und wie sich die Umstrukturierung der Fermifläche hin zu tiefen Temperaturen vollzieht.

Für Lanthanidmetalle, wie auch für solche Legierungen mit Y oder Sc, die eine helikale Ordnung zeigen, sind in der Literatur Messungen einer Fermifläche in der antiferromagnetischen Phase bislang nicht gezeigt. Wir haben hierzu erste vorläufige Messungen an Dy durchgeführt, die in Abbildung 6.18(b) dargestellt sind ($h\nu = 105\text{--}130$ eV). Bei der Temperatur von $T = 140$ K ist Dy helikal antiferromagnetisch geordnet (s. Ref. [Ott 07]). In der ALH-Ebene hat sich die Fermifläche von L in Richtung A zurückgezogen, allerdings noch nicht so weit, wie bei tiefen Temperaturen. Trotz antiferromagnetischer Ordnung liegt kein Nesting bei L vor.

Vor dem Hintergrund der bei $T = 140$ K vorhandenen Austauschspaltung der Bänder von $\Delta E_{ex} = 0.45$ eV ist dies nicht verwunderlich. Bei dieser Temperatur beträgt die Austauschspaltung von Dy bereits etwa 70% ihres Maximalwertes von 0.65 eV bei $T = 0$ K [Schu 00]. Grund für das Nesting bei Dy ist, dass das paramagnetische Band 3 bei M besetzt und bei L unbesetzt ist; es liegt dort ca. 0.14 eV oberhalb von E_F [Liu 78]. Eine Austauschspaltung $\Delta E_{ex}(T = 140 \text{ K}) = 0.45$ eV zerstört nach den Überlegungen von Liu das Nesting bei L und damit auch das daraus resultierende Maximum in $\chi(q)$.

Die bei $T = 140$ K vorliegende helikale Ordnung kann nicht mittels der Nesting-

hypothese erklärt werden. Es ist allerdings möglich, dass diese von den Übergangsmatrixelementen $|M_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q})|^2$ aus (6.4) hervorgerufen wird. Abhängigkeiten der $|M_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q})|^2$ von \mathbf{q} können ein Maximum von $\chi(q)$ bei $q = 0$ zu endlichen q -Werten verschieben und so eine helikal antiferromagnetische Ordnung bedingen — auch ohne Nesting [Free 72].

Zu meinen Ergebnissen — helikale Ordnung ohne Nesting — passen Neutronenstreuexperimente, die zeigen, dass bei Dy auch in der ferromagnetischen Phase ein Maximum in $\chi(q)$ verbleibt, welches nicht bei $q = 0$ liegt [Mack 72, Liu 78]. Die magnetische Kopplung in Dy weist somit auch bei tiefen Temperaturen eine *Tendenz* zur Spinhelix auf, obwohl diese zugunsten einer ferromagnetischen Ordnung unterdrückt ist. Die Untersuchungen aus Kapitel 6.4.2 zeigen eindeutig, dass bei tiefen Temperaturen kein Nesting der Fermifläche vorliegt, welches also nicht die Ursache für die beobachtete Tendenz zur Helix sein kann.

Weiterführende Messungen, die untersuchen, bei welcher Temperatur das Nesting bei Dy verschwindet und wie sich die weitere Umstrukturierung der Fermifläche hin zu tiefen Temperaturen gestaltet, sind von größtem Interesse. Vergleichende Untersuchungen an Holmium sind geplant. Es zeigt im Temperaturbereich von etwa 130 K bis 20 K helikal antiferromagnetische Ordnung, bei tieferen Temperaturen ist es ferrimagnetisch geordnet und bildet eine konische Spinhelix.

Aus den im vorliegenden Kapitel diskutierten Beispielen wird ersichtlich, dass die Standardtheorie der Kopplung magnetischer Momente in der Lage ist, den Magnetismus der schweren Lanthanidmetalle weitgehend zu erklären. Insbesondere lässt sich das Auftreten einer helikal geordneten Phase mit der Existenz eines Nestings der paramagnetischen Fermifläche in Verbindung bringen. Der Temperaturbereich um T_C und der Phasenübergang von der Spinhelix zur ferromagnetischen Ordnung wird allerdings nicht zufriedenstellend beschrieben. Es müssen dort andere Effekte die dominante Rolle spielen.

Das komplexe Zusammenspiel der einzelnen energetischen Beiträge bei der Stabilisierung einer magnetischen Ordnung kann mittels moderner theoretischer Modelle, die relativistische Effekte wie die SOC berücksichtigen, in Kombination mit den heutzutage verfügbaren numerischen Möglichkeiten, näher untersucht werden. Die Durchführung solcher Rechnungen ist in Zusammenarbeit mit G. Bihlmayer und S. Blügel, Forschungszentrum Jülich, geplant. Künftige temperaturabhängige Photoemissionsmessungen der Umstrukturierung der Fermifläche im Zuge der magnetischen Phasenübergänge können tiefere Einsichten vermitteln, welche Bedeutung die Gestalt der Fermifläche für die Kopplung magnetischer Momente und das Ausbilden magnetischer Ordnung bei den schweren Lanthanidmetallen zukommt.

