

## Ferromagnetismus in der Eisengruppe

Von Franz Bader

Institut für theoret. und angew. Physik der Technischen Hochschule und Max-Planck-Institut für Metallforschung, Abt. Prof. U. Dehlinger, Stuttgart

(Z. Naturforschg. 8a, 334 [1953]; eingeg. am 23. März 1953)

Entsprechend der von Ganzhorn<sup>1</sup> gruppentheoretisch entwickelten homöopolaren Auffassung verteilen sich in einem kubischen Kristall die ersten fünf 3d-Elektronen auf ein unteres Dreier- und Zweierband ( $d^3$  bzw.  $d^2$ ) mit je 3 bzw. 2 Elektronen/Atom, die mit Nachbarn 1. bzw. 2. Sphäre bindende Überlappungen mit antiparallelem Spin eingehen. Bei Cr sind diese Bänder gerade aufgefüllt. Die restlichen 5 d-Elektronen besetzen von Mn ab das obere  $d^3$ - und  $d^2$ -Band, wo sie mit entsprechenden Nachbarn lockernde Bindungen mit parallelem Spin eingehen und somit Magnetismus hervorrufen können. Infolge der Austauschenergie (1. Näherung) stellen sich diese Elektronen in den schmalen d-Bändern parallel, soweit es mit dem Pauli-Prinzip, welches auch im Kristall für das Einzelatom Gültigkeit haben soll, vereinbar ist. Wegen der Doppelbesetzung jeden Zustandes nehmen das obere Dreier- und Zweier-Band maximal 1,5 bzw. 1 Plus-Spin/Atom auf. Darüber hinaus müssen mit zunehmender Elektronenzahl Minus-Spins eintreten, welche das magnetische Moment wieder gleichmäßig erniedrigen. Daraus folgt zwangsläufig das Maximum der Sättigungsmagnetisierung in der raumzentrierten Fe-Co-Legierung mit  $2,5 \mu_B$ /Atom (gemessen  $2,46 \mu_B$ ; Abb. 1). Das vorzeitige Umbiegen der Kurve bei der Fe-Ni-Legierung erklärt sich aus dem homöopolaren Charakter des benutzten Modells.

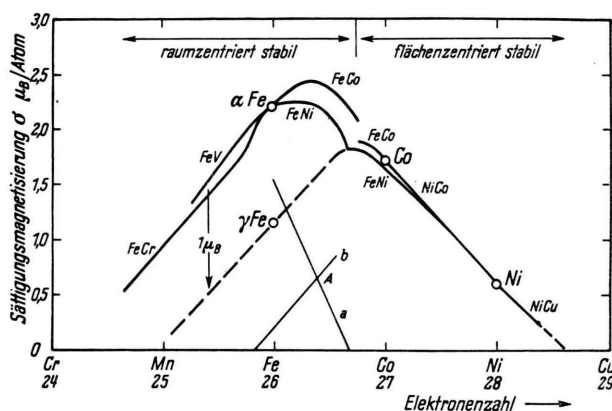


Abb. 1. Sättigungsmagnetisierung in Bohrschen Magnetonen pro Atom über der Elektronenzahl aufgetragen. Gestrichelte Gerade, sowie Gerade (a) und (b): s. Text.

<sup>1</sup> K. Ganzhorn, Stuttgarter Diplomarbeit 1950; Stuttgarter Dissertation 1952; Z. Naturforschg. 7a, 291—292 [1952].

<sup>2</sup> E. C. Stoner, Rep. Progr. Physics 11, 43—112 [1948].

Da im flächenzentrierten Gitter von 12 nächsten Nachbarn höchstens 8 entgegengesetzten und mindestens 4 parallelen Spin aufweisen, sättigen sich aus den Dreierbändern 1 bindendes und 1 lockerndes Elektron im Atom selbst ab, so daß die oberen Bänder zusammen nur mit maximal 2 Plus- und 2 Minus-Spins besetzt werden können. Die Auffüllung dieser oberen Bänder erfolgt deshalb im flächenzentrierten Gitter längs der gestrichelten Geraden der Abb. 1 bis zum Maximum  $2 \mu_B$  (gemessen etwa  $1,94 \mu_B$ ). Auf dieser Kurve liegt  $\gamma$ -Fe. Wo die raumzentrierte Kurve diesen flächenzentrierten Zweig trifft, hat die magnetische Energie, welche die raumzentrierte Phase stabilisiert, soweit abgenommen, daß bei  $T = 0$  die flächenzentrierte Phase stabil wird, zumal bei ihr in den oberen lockernden Bändern 1 Elektron weniger auftritt. Die zunächst theoretisch postulierte, gestrichelte Gerade der Abb. 1 ist experimentell bestätigt<sup>3</sup>.

Links von den beiden Umkehrpunkten ist antiferromagnetisches Verhalten mit dem Pauli-Prinzip verträglich, wobei die unteren Bänder antiferromagnetisch ausgerichtete Teilgitter ausbilden (Neutroneninterferenzen zeigen Antiferromagnetismus bei Cr, Mn, Fe<sup>4</sup>). Die antiferromagnetische Wirkung von 0,56 Elektronen/Atom, die bei  $\alpha$ -Fe in beiden Teilgittern gegeneinander ausgerichtet sind, wird aber durch die ferromagnetische Wirkung von 1,22 Elektronen des oberen  $d^3$ -Bandes, die sich über den ganzen Elementarbezirk hinweg parallel ausrichten, überwunden. Für das flächenzentrierte Gitter gibt die Gerade (a) der Abb. 1 die Zahl der antiferromagnetisch wirksamen Elektronen an, die Gerade (b) die Zahl der Elektronen des oberen  $d^3$ -Bandes, welche über beide antiferromagnetische Teilgitter hinweg parallel ausgerichtet sind. Links vom Schnittpunkt A überwiegt antiferromagnetisches Verhalten ( $\gamma$ -Fe), rechts Ferromagnetismus. In der flächenzentrierten Fe-Ni-Legierung liegt A bei etwa 20% Ni. Eine Extrapolation der gemessenen Curie-Temperatur ergibt in dieser Legierung bei etwa gleicher Konzentration  $0^\circ \text{K}^3$ .

Ferner zeigt sich in Übereinstimmung mit der Erfahrung<sup>5</sup>, daß bei  $\alpha$ -Fe die spezifische Wärme der Elektronen über dem Curie-Punkt etwa 4mal größer ist, als man aus Tieftemperaturmessungen zu erwarten hätte. Dies bedingt das Auftreten der  $\delta$ -Phase<sup>6</sup>. Für Fe ergibt sich in Übereinstimmung mit der Erfahrung ein positives, für Ni ein negatives Vorzeichen der Hall-Konstanten.

Aus den entwickelten Vorstellungen heraus kann für das Verhältnis der magnetischen Kopplung bei Co, Fe und Ni  $2,193:1,73:1$  angegeben werden, während die experimentell gemessenen Curie-Temperaturen sich verhalten wie  $2,192:1,66:1$ . Die geringe Abweichung bei Fe dürfte auf die verschiedene Gitterstruktur zurückzuführen sein.

<sup>3</sup> M. Peschard, Revue Métallurgie 22, 581 [1925], Abb. 25, Abb. 36, Kap. IV § 9.

<sup>4</sup> C. G. Shull, Abstract in Washington Conference on Magnetism, Sept. 1952.

<sup>5</sup> E. C. Stoner, J. Physique Radium 12, 372 [1951].

<sup>6</sup> U. Dehlinger, Z. Naturforschg. 8a, 87 [1953].

