Elektronentheorie der dissipativen Magnetisierungsdynamik

Anisotrope und nichtlokale Effekte

Von der Fakultät Mathematik und Physik der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines Doktors der
Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

Jonas Seib

geboren in Ludwigsburg

Hauptberichter:	Prof. Dr. H.-R. Trebin
Mitberichter:	Prof. Dr. G. Wunner
Tag der Einreichung:	15. Juli 2010
Tag der mündlichen Prüfung:	21. Oktober 2010

Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart
Institut für Theoretische und Angewandte Physik, Universität Stuttgart

2010

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **7**

2 Spindichtefunktionaltheorie mit Nebenbedingungen **11**
2.1 Dichtefunktionaltheorie 11
2.1.1 Theoreme von Hohenberg und Kohn 13
2.1.2 Kohn-Sham-Formalismus 14
2.2 Spindichtefunktionaltheorie 16
2.2.1 Lokale-Spin-Dichte-Näherung 18
2.3 SDFT mit Nebenbedingungen 19
2.3.1 SQA-Projektion 20
2.3.2 Lagrange-Zwangsfelder 22
2.3.3 Drehmomente 23
2.4 Atomare Größen 25
2.4.1 Atomkugelnäherung 26
2.4.2 Zwangsfelder für atomare Momente 27
2.4.3 Atomare Zwangsfelder + Spin-ASA 28
2.5 Magnetic-Force-Theorem 28
2.5.1 Harris-Foulkes-Funktional 28
2.5.2 MFT 31
2.6 Spin-Bahn-Kopplung 34

3 Dissipative Magnetisierungsdynamik **35**
3.1 Vorbemerkungen 35
3.1.1 Zeitskalen 35
3.1.2 Dissipationskanäle 36
3.1.3 Übersicht 37
3.2 Phänomenologische Bewegungsgleichung – die Gilbertgleichung 38
3.3 Verallgemeinertes Breathing-Fermi-Surface-Modell 42
3.3.1 Idee des Breathing-Fermi-Surface-Modells 42

3.3.2 Die Bewegungsgleichung des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells 45
3.3.3 Verallgemeinerungen gegenüber der Gilbertgleichung 48
3.3.4 Kollineare und nichtkollineare Systeme 49
3.3.5 Bemerkungen zur Relaxationszeit $\boldsymbol{\tau}$ – Anregung von Elektron-Loch-Paaren als treibende Kraft 54
3.3.6 Reichweite der Nichtlokalität 56
3.4 Dissipation durch Bildung von Elektron-Loch-Paaren 58
3.4.1 Torque-Correlation-Modell 59
3.4.2 „Matrix-Torque-Correlation-Modell“ 62
3.4.3 Physik der Dämpfung durch Elektron-Loch-Paarbildung 64
3.4.4 Anregung von Elektron-Loch-Paaren – Torque-Correlation-Formel 67

4 FMR-Linienbreite und effektive Dämpfung 69
4.1 Bewegungsgleichung mit anisotroper Dämpfungsmatrix . . . 70
4.2 FMR-Linienbreite für Bewegungsgleichung mit anisotroper Dämpfungsmatrix 71
4.3 Betrachtung der dissipierten Leistung mit der Dissipationsfunktion 75

5 Ergebnisse des „Matrix-Torque-Correlation-Modells“ 79
5.1 Orientational Anisotropie 80
5.2 Rotational Anisotropie 82

6 Ergebnisse des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells in 3d-Übergangsmetallen 87
6.1 Kollineare Konfigurationen in Fe, Ni und Co 89
6.1.1 Numerische Ergebnisse in fcc-Ni 91
6.1.2 Numerische Ergebnisse in bcc-Fe 91
6.1.3 Numerische Ergebnisse in hcp-Co 94
6.1.4 Numerische Ergebnisse in monoatomarer hcp-Co Schicht 96
6.1.5 Diskussion der Ergebnisse in kollinearen Konfigurationen 97
6.2 Nichtkollineare Konfigurationen in Fe und Co 99
6.2.1 Einfachste Konfiguration – zwei verkippte Momente 101

6.2.2 Zwei verkippte Momente in ferromagnetischer Umgebung 109
6.2.3 Allgemeine Bemerkungen zur Dämpfung in der Dynamik von Spinwellen und Domänenwänden 115

7 Breathing-Fermi-Surface-Modell im Seltenerdmetall Gd 117
7.1 Bewegungsgleichungen für $\mathbf{M}_{4f}$ und $\mathbf{m}$ 118
7.2 Ergebnisse des Breathing-Fermi-Surface-Modells für $\mathbf{A}^{\mathrm{Gd}}_{5d6sp}$ 123

8 Zusammenfassung 127
8.1 Deutsche Zusammenfassung 127
8.2 English summary 133

Literaturverzeichnis 141

1 Einleitung

Die Untersuchung der ultraschnellen Magnetisierungsdynamik spielt eine Schlüsselrolle bei der Entwicklung zukünftiger Speicher- und Datenverarbeitungstechnologien auf magnetischer Basis. Besonders bei der Kontrolle von Schalt- und Ummagnetisierungsprozessen ist das Verständnis von dissipativen Dämpfungs- und Relaxationsprozessen von entscheidender Bedeutung.

Theoretische Untersuchungen dynamischer Magnetisierungsprozesse auf der Zeitskala von einigen Pikosekunden bis in den Nanosekundenbereich beruhen zumeist auf Simulationen im Rahmen des Mikromagnetismus [1]. Die zugrunde liegende dissipative Bewegungsgleichung ist dann die phänomenologische Gilbertgleichung [2]. Diese beschreibt sowohl die Präzession des Magnetisierungsvektors $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$ um das effektive Feld $\mathbf{H}_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ als auch die Relaxation hin zur Gleichgewichtslage parallel zum Feld. Der dämpfende Relaxationsprozess wird in der Gilbertgleichung durch den phänomenologischen Dämpfungsskalar α beschrieben.

Es stellt sich nun zum einen die Frage, ob die Beschreibung der Magnetisierungsdämpfung durch einen konstanten Skalar allgemein genug ist und zum anderen, welche mikroskopischen Prozesse für die Dämpfung der Magnetisierung verantwortlich sind und wie diese in mikroskopischen Modellen behandelt werden können. Gilbert selbst schlägt bereits auf phänomenologischer Basis eine Verallgemeinerung des Skalars α auf eine nichtlokale Dämpfungsmatrix vor [2, 3].

Auf mikroskopischer Basis ist in 3d-Übergangsmetallen die Anregung von Elektron-Loch-Paaren und deren anschließende Relaxation durch Elektronenstreuung an Phononen und Defekten der dominierende [4] Prozess der zur Magnetisierungsdämpfung führt. Das in dieser Arbeit untersuchte verallgemeinerte Breathing-Fermi-Surface-Modell [5, 6] beschreibt die Dämpfung durch Bildung von Intraband-Elektron-Loch-Paaren und ist eine Erweiterung des von Kamberský eingeführten Breathing-Fermi-Surface-Modells [7] von kollinearen (ferromagnetischen) Magnetisierungskonfigurationen auf nichtkollineare (verkippte) Konfigurationen. Es führt auf ei-

ne Gilbert-artige dissipative Bewegungsgleichung für atomare magnetische Momente $\mathbf{M_R}$, in der der Skalar α durch eine im Allgemeinen nichtlokale, von der Magnetisierungskonfiguration abhängige Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ ersetzt ist.

Das ebenfalls von Kamberský eingeführte Torque-Correlation-Modell [8] berechnet den Gilbertskalar α in kollinearen Systemen verursacht durch die Anregung von Intra- und Interband-Elektron-Loch-Paaren.

In den folgenden Absätzen soll zuerst eine Übersicht über die Ziele und danach über den inhaltlichen Aufbau der vorliegenden Arbeit gegeben werden.

Ziel dieser Arbeit ist es zum einen, die Ableitung des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells darzustellen und die Eigenschaften der im Allgemeinen nichtlokalen Bewegungsgleichung und der dadurch beschriebenen mikroskopischen Prozesse zu diskutieren. Zum anderen werden die Eigenschaften der Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$, insbesondere ihre Konfigurationsabhängigkeit und die enthaltene Nichtlokalität an einfachen Modellkonfigurationen in 3d-Übergangsmetallen quantitativ im Rahmen der Spindichtefunktionaltheorie untersucht. Ein erweitertes Torque-Correlation-Modell wird vorgestellt, mit dem es möglich ist, in kollinearen Systemen eine anisotrope Dämpfungsmatrix zu berechnen. Die anisotropen Eigenschaften der Dämpfungsmatrix werden in Abhängigkeit von der Elektronenstreurate quantitativ untersucht. Außerdem wird untersucht, inwieweit die anisotropen Eigenschaften einer Dämpfungsmatrix in kollinearen Konfigurationen in einem FMR-Experiment (Ferromagnetische Resonanz) beobachtbar sind. Für das Seltenerdmetall Gd werden im Breathing-Fermi-Surface-Modell Dämpfungsparameter für das Valenzmoment berechnet und ein Modell entwickelt, das deren Einfluss auf das 4f-Moment beschreibt.

Der inhaltliche Aufbau ist wie folgt gegliedert: In Kapitel 2 werden die Grundlagen der Spindichtefunktionaltheorie in der benötigten Form dargestellt. Dabei wird ein magnetisches Force-Theorem abgeleitet, das für die Einführung des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells in Abschnitt 3.3 notwendig ist. Kapitel 3 ist der Darstellung und Ableitung verschiedener Bewegungsgleichungen und Modelle gewidmet, die die dissipative Magnetisierungsdynamik beschreiben. Begonnen wird mit der rein phänomenologischen Gilbertgleichung (Abschnitt 3.2). In 3.3 werden die Bewegungsgleichung des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells abgeleitet und ihre Eigenschaften diskutiert. Kapitel 3.4 betrachtet das physikalische Bild der Anregung von Elektron-Loch-Paaren, die zur Ma-

gnetisierungsdämpfung führt, nochmals genauer, stellt das konventionelle Torque-Correlation-Modell und die Abbildung der Anregungsprozesse auf die Torque-Correlation-Formel vor. Außerdem wird die Erweiterung auf ein „Matrix-Torque-Correlation-Modell“ abgeleitet, in dem eine anisotrope Dämpfungsmatrix berechnet werden kann. Kapitel 4 erarbeitet, inwieweit die Linienbreite der absorbierten Leistung in einem FMR-Experiment Informationen über anisotrope Eigenschaften einer Dämpfungsmatrix liefern kann. Außerdem wird ein effektiver Dämpfungsparameter für elliptische Trajektorien definiert. Die anisotropen Eigenschaften der Dämpfungsmatrix werden in Kapitel 5 im Rahmen des „Matrix-Torque-Correlation-Modells“ quantitativ in Abhängigkeit von der Elektronenstreurate untersucht. Kapitel 6 zeigt numerische Resultate im Rahmen des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells. Dabei werden zuerst atomare Dämpfungsmatrizen in kollinearen Konfigurationen betrachtet und im Anschluss die Konfigurationsabhängigkeit und Nichtlokalität atomarer Dämpfungsmatrizen in einfachen nichtkollinearen Systemen numerisch untersucht. Die Berechnung von Dämpfungsparametern für das Valenzmoment in kollinearem Gd folgt in Kapitel 7. Außerdem wird ein Modell entwickelt, das den Einfluss der Valenzdämpfung auf das 4f-Moment beschreibt.

2 Spindichtefunktionaltheorie mit Nebenbedingungen

Ein Schwerpunkt dieser Arbeit ist die Untersuchung des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells [5, 6], in dessen Rahmen eine Bewegungsgleichung für eine dissipative Magnetisierungsdynamik abgeleitet werden kann. Die detaillierte Ableitung der dissipativen Bewegungsgleichung in diesem Modell ist Bestandteil von Kapitel 3.3 und [5, 6]. Aber bereits an dieser Stelle sei verraten, dass es sich um eine Kombination der elektronischen Ab-initio-Spindichtefunktionaltheorie (SDFT) mit einem phänomenologischen Relaxationsansatz für Besetzungzahlen von Einelektronenzuständen handelt.

Im nun folgenden Kapitel wird die SDFT in dem Ausmaß und der Form dargestellt, wie es zum Verständnis dieser Arbeit und für die Verwendung im Breathing-Fermi-Surface-Modell notwendig ist. In Kapitel 6 und 7.2 werden im Rahmen der SDFT numerische Ergebnisse für Dämpfungsparameter berechnet. Die folgenden Abschnitte stellen also auch die theoretische Grundlage dieser numerischen Untersuchungen dar.

Grundlegende Details zur Dichtefunktionaltheorie (DFT) und Spindichtefunktionaltheorie sind z.B. in [9] zu finden. Die Darstellung der SDFT und SDFT mit Nebenbedingungen ist im Folgenden aufgrund der thematischen Nähe stark an [10, 11] angelehnt.

2.1 Dichtefunktionaltheorie

Die elektronische Dichtefunktionaltheorie beschäftigt sich mit den Grundzustandseigenschaften von wechselwirkenden nichtrelativistischen Vielelektronensystemen in einem gegebenen externen Potential V_{ext}. Bei der Untersuchung der Elektronenstruktur eines Festkörpers, der aus negativ geladenen Elektronen und positiv geladenen Kernen besteht, ist V_{ext} dann durch das Potential der Kerne gegeben, falls keine zusätzlichen äußeren

Felder berücksichtigt werden sollen. Die Freiheitsgrade der Kerne sind im Sinne der Born-Oppenheimer-Näherung von den elektronischen Freiheitsgraden entkoppelt. Die Positionen der Kerne gehen nur parametrisch in die Form von V_{ext} ein.

Bei der mikroskopischen Beschreibung eines Vielelektronensystems ist die Vielelektronenwellenfunktion $|\Psi\rangle$ die fundamentale Größe. Die stationäre Grundzustandswellenfunktion $|\Psi_0\rangle$ ist Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \tag{2.1}$$

mit der Grundzustandsenergie $E = E_0$. Dabei enthält der Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + \frac{1}{2}\sum_{ij}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_i V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i) \tag{2.2}$$

den Operator der kinetischen Energie, den Operator der Wechselwirkungsenergie und die Wechselwirkung mit dem externen Potential. Die enthaltenen Summen laufen jeweils über alle im System enthaltenen Elektronen.

Die Lösung der Vielteilchen-Schrödingergleichung ist eine sehr komplizierte Aufgabenstellung und verlangt Lösungsverfahren, deren Aufwand für reale Systeme im Allgemeinen nicht mehr beherrschbar ist.

Anstatt das Elektronensystem durch die Vielteilchenwellenfunktion $|\Psi\rangle$ zu beschreiben und den Grundzustand $|\Psi_0\rangle$ als Lösung der Vielteilchenschrödingergleichung (2.1) zu suchen, geht man in der elektronischen Dichtefunktionaltheorie dazu über, das Elektronensystem allein durch die Elektronendichte $n(\mathbf{r})$ zu beschreiben. Alle Eigenschaften des Elektronensystems im Grundzustand, insbesondere die gesamte elektronische Energie $\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle$ sind dann Funktionale der Elektronendichte. Das Funktional der gesamten elektronischen Energie hat dann die folgende allgemeine Gestalt:

$$E[n] = F[n] + \int V_{\text{ext}}(\mathbf{r})n(\mathbf{r})\mathrm{d}^3r = T[n] + E_{\text{WW}}[n] + \int V_{\text{ext}}(\mathbf{r})n(\mathbf{r})\mathrm{d}^3r\,, \tag{2.3}$$

mit den unbekannten Funktionalen $T[n]$ und $E_{\text{WW}}[n]$ der kinetischen Energie und der elektronischen Wechselwirkungsenergie. Das Fundament dieser Beschreibung des Elektronensystems durch die Dichte $n(\mathbf{r})$ bilden die Theoreme von Hohenberg und Kohn [12].

2.1.1 Theoreme von Hohenberg und Kohn

Hohenberg und Kohn konnten für das Energiefunktional $E[n]$ und die Elektronendichte $n_0(\mathbf{r})$ im Grundzustand die folgenden beiden Theoreme [12] ableiten:

1. Theorem Das bis auf eine Konstante eindeutige externe Potential $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$, in dem sich das Elektronensystem befindet, legt die Grundzustandselektronendichte $n_0(\mathbf{r})$ eindeutig fest. Umgekehrt legt die Grundzustandselektronendichte $n_0(\mathbf{r})$ das Potential $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ bis auf eine Konstante eindeutig fest.

Damit sind alle Grundzustandseigenschaften Funktionale der Grundzustandsdichte n_0. Dies ist durch folgenden Gedankengang einzusehen. Durch n_0 ist V_{ext} festgelegt. V_{ext} geht in die Schrödingergleichung (2.1) ein und legt damit die Grundzustandswellenfunktion $|\Psi_0\rangle$ fest, aus der alle Eigenschaften des Elektronensystems im Grundzustand durch Bildung der entsprechenden Erwartungswerte erhalten werden können.

Auch die Grundzustandsenergie E_0 ist also ein eindeutiges Funktional der Elektronendichte und es gilt:

$$E_0 = E[n_0]\,. \tag{2.4}$$

2. Theorem Man erhält bei gegebenem Potential $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ die Grundzustandselektronendichte $n_0(\mathbf{r})$, indem man das Funktional $E[n]$ der gesamten Energie bezüglich n minimiert.

Die Berechnung der Grundzustandsenergie des Vielelektronensystems ist damit auf die Minimierung des Energiefunktionals $E[n]$ abgebildet. Die Beschreibung des Grundzustandes durch die Elektronendichte stellt eine erhebliche Vereinfachung gegenüber der Beschreibung durch die Vielelektronenwellenfunktion dar.

Eine numerische Berechnung der Grundzustandsenergie und der Grundzustandsdichte ist durch die theoretische Vorschrift der Minimierung von $E[n]$ allerdings noch nicht möglich, da das allgemeine Funktional $F[n] = T[n] + E_{WW}[n]$ nicht bekannt ist. Die praktische Anwendung der Dichtefunktionaltheorie ist durch den im Folgenden skizzierten Kohn-Sham-Formalismus [13] möglich.

2.1.2 Kohn-Sham-Formalismus

Für die Anwendung der Dichtefunktionaltheorie ist ein geeigneter Ansatz für das unbekannte Funktional $F[n]$ notwendig. Das von Kohn und Sham entwickelte Verfahren geht dabei wie folgt vor:

Das unbekannte Funktional $T[n]$ der kinetischen Energie des wechselwirkenden Elektronensystems wird durch das bekannte Funktional $T_s[n]$ der kinetischen Energie eines Systems von nichtwechselwirkenden Elektronen derselben Dichte ausgedrückt, die sich in einem effektiven Potential $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ befinden:

$$T[n] = T_s[n] + (T[n] - T_s[n])\,, \tag{2.5}$$

mit

$$T_s = \sum_i^{occ.} \langle \phi_i | \hat{T}_s | \phi_i \rangle = \sum_i^{occ.} \langle \phi_i | -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i | \phi_i \rangle \tag{2.6}$$

und

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i^{occ.} \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r})\,. \tag{2.7}$$

Außerdem wird das Funktional der elektronischen Wechselwirkungsenergie $E_{\text{WW}}[n]$ durch das Funktional der Hartree-Energie $E_{\text{H}}[n]$ ausgedrückt, das nur die elektrostatische Wechselwirkungsenergie und keine Austauscheffekte enthält:

$$E_{\text{WW}}[n] = E_{\text{H}}[n] + (E_{\text{WW}}[n] - E_{\text{H}}[n])\,, \tag{2.8}$$

mit

$$E_{\text{H}}[n] = \frac{e^2}{2} \int \frac{n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \mathrm{d}^3 r \mathrm{d}^3 r'\,. \tag{2.9}$$

Der Grundgedanke dieses Vorgehens liegt darin, die numerisch großen Anteile von $T[n]$ und $E_{\text{WW}}[n]$, nämlich $T_s[n]$ und $E_{\text{H}}[n]$ exakt zu beschreiben, so dass nur für die vergleichsweise kleinen Differenzen, ausgedrückt durch das Austausch-Korrelations-Energiefunktional $E_{\text{xc}}[n]$ ein Näherungsansatz

gemacht werden muss. Für das Kohn-Sham-Funktional der Gesamtenergie gilt dann:

$$E[n] = T_s[n] + E_{\mathrm{H}}[n] + E_{\mathrm{xc}}[n] + \int V_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) \mathrm{d}^3 r \,, \tag{2.10}$$

mit dem unbekannten Austausch-Korrelations-Energiefunktional

$$E_{\mathrm{xc}}[n] = (T[n] - T_s[n]) + (E_{\mathrm{WW}}[n] - E_{\mathrm{H}}[n]) \,, \tag{2.11}$$

für das ein geeigneter Näherungsansatz gemacht werden muss.

Das effektive Potential $V_{\mathrm{eff}}(\mathbf{r})$, in dem sich das nichtwechselwirkende Elektronensystem befindet, wird so konstruiert, dass sich bei der Minimierung der Energiefunktionale des wechselwirkenden Systems und des nichtwechselwirkenden Systems bei Erhaltung der Elektronenzahl dieselbe Dichte ergibt. Es gilt:

$$V_{\mathrm{eff}}(\mathbf{r}) = V_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r}) + V_{\mathrm{H}}(\mathbf{r}) + V_{\mathrm{xc}}(\mathbf{r}) \,, \tag{2.12}$$

mit

$$V_{\mathrm{H}}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{\mathrm{H}}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} = e^2 \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \mathrm{d}^3 r' \tag{2.13}$$

und

$$V_{\mathrm{xc}}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{\mathrm{xc}}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} \,. \tag{2.14}$$

Die Einelektronenwellenfunktionen $\phi_i(\mathbf{r})$, die die Zustände der nichtwechselwirkenden Elektronen im effektiven Potential beschreiben, gehorchen der effektiven Einelektronenschrödingergleichung (Kohn-Sham-Gleichung)

$$(\hat{T}_s + V_{\mathrm{eff}}(\mathbf{r}))\phi_i = \varepsilon_i \phi_i \,, \tag{2.15}$$

wobei die effektiven Einelektronenenergien ε_i und die Einelektronenzustände $\phi_i(\mathbf{r})$ auch Kohn-Sham-Energien und Kohn-Sham-Orbitale genannt werden.

Die Minimierung des Funktionals der Gesamtenergie und das Finden der Grundzustandsdichte ist somit auf die selbstkonsistente Lösung des Systems der Gleichungen (2.15), (2.12) und (2.7) abgebildet. Die Grundzustandsdichte $n_0(\mathbf{r})$, die das Energiefunktional $E[n]$ minimiert, ist genau

die, deren effektives Potential V_{eff} in den Kohn-Sham-Gleichungen (2.15) die Kohn-Sham-Orbitale ϕ_i als Lösung besitzt, die mit (2.7) die Dichte selbst reproduzieren.

Ersetzt man im Ausdruck (2.10) für das Energiefunktional die kinetische Einelektronenenergie durch die Kohn-Sham-Energien ε_i, ergibt sich

$$E[n] = \sum_i^{occ.} \varepsilon_i - E_{\text{H}}[n] + E_{\text{xc}}[n] - \int V_{\text{xc}}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) \mathrm{d}^3 r \,, \tag{2.16}$$

wobei die Summe über ε_i oft als Bandenergie und der verbleibende Ausdruck als Doppelzählungsterm bezeichnet wird.

2.2 Spindichtefunktionaltheorie

Im bis hier behandelten Kohn-Sham-Formalismus sind die Elektronenzustände bezüglich des Spinfreiheitsgrades entartet. Die zentrale Größe der elektronischen Dichtefunktionaltheorie ist die skalare Elektronendichte $n(\mathbf{r})$. Um magnetische Systeme beschreiben zu können, muss die Dichtefunktionaltheorie erweitert werden. Geht man zu spinpolarisierten Systemen über, ist die Entartung des Spinfreiheitsgrades aufgehoben und die entsprechende Erweiterung der Dichtefunktionaltheorie ist die Spindichtefunktionaltheorie [14], in der zur Elektronendichte $n(\mathbf{r})$ die Spindichte $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ als zentrale Größe zur Beschreibung des Elektronensystems hinzukommt. Man geht dabei von den skalaren Kohn-Sham-Orbitalen $\phi_i(\mathbf{r})$ zu zweikomponentigen Spinoren $\underline{\phi}_i(\mathbf{r})$ über. Für Ladungs- und Spindichte $n(\mathbf{r})$ und $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ gilt dann:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i^{occ.} \sum_\alpha \phi^*_{i,\alpha}(\mathbf{r}) \phi_{i,\alpha}(\mathbf{r}) \tag{2.17}$$

und

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \sum_i^{occ.} \sum_{\alpha\beta} \phi^*_{i,\alpha}(\mathbf{r})\, \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}\, \phi_{i,\beta}(\mathbf{r}) \,, \tag{2.18}$$

mit dem Vektor $\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}$ der Paulimatrizen.

Die Beschreibung des Elektronensystems durch Ladungs- und Spindichte $n(\mathbf{r})$ und $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ ist äquivalent zur Beschreibung durch die Spindichtematrix $\underline{\underline{\rho}}(\mathbf{r})$:

$$\rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \sum_{i}^{occ.} \phi^*_{i,\alpha}(\mathbf{r})\phi_{i,\beta}(\mathbf{r})\,, \tag{2.19}$$

wobei zwischen $\underline{\underline{\rho}}(\mathbf{r})$ einerseits und $n(\mathbf{r})$ und $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ andererseits eine eineindeutige Abbildung besteht:

$$\underline{\underline{\rho}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(n(\mathbf{r})\underline{\underline{1}} + \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}})\,, \tag{2.20}$$

und

$$n(\mathbf{r}) = \rho_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}) + \rho_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}) = \mathrm{Tr}\underline{\underline{\rho}}(\mathbf{r})\,, \qquad \mathbf{m}(\mathbf{r}) = \mathrm{Tr}\underline{\underline{\rho}}(\mathbf{r})\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}\,. \tag{2.21}$$

Das Funktional der Gesamtenergie kann nun als Funktional $E[\underline{\underline{\rho}}]$ oder äquivalent dazu als Funktional $E[n, \mathbf{m}]$ geschrieben werden. Im Grundzustand ist das Funktional der Gesamtenergie minimal bezüglich einer Variation von $\underline{\underline{\rho}}$ und bezüglich einer Variation von n und $\mathbf{m}$.

Die Kopplung an skalare Felder $V(\mathbf{r})$ und Magnetfelder $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ wird bei der Darstellung mit der Spindichtematrix durch die Spurbildung mit der Potentialmatrix

$$\underline{\underline{W}}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})\underline{\underline{1}} + \mu_\mathrm{B}\mathbf{B}(\mathbf{r}) \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \tag{2.22}$$

beschrieben:

$$\mathrm{Tr}\underline{\underline{W}}(\mathbf{r})\underline{\underline{\rho}}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) + \mu_\mathrm{B}\mathbf{B}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r})\,. \tag{2.23}$$

Im zu (2.10) und (2.16) analogen Kohn-Sham-Funktional der Gesamtenergie tritt nun zusätzlich die Kopplung an ein externes Magnetfeld auf:

$$\begin{aligned} E[\underline{\underline{\rho}}] &= \sum^{occ.} \langle \underline{\phi}_i | \hat{T}_s | \underline{\phi}_i \rangle + E_\mathrm{H}[n] + E_\mathrm{xc}[\underline{\underline{\rho}}] \\ &\quad + \int (V_\mathrm{ext}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) + \mu_\mathrm{B}\mathbf{B}_\mathrm{ext}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}))\mathrm{d}^3r \end{aligned} \tag{2.24}$$

$$\begin{aligned} &= \sum^{occ.} \varepsilon_i - E_\mathrm{H}[n] + E_\mathrm{xc}[\underline{\underline{\rho}}] \\ &\quad - \int (V_\mathrm{xc}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) + \mu_\mathrm{B}\mathbf{B}_\mathrm{xc}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}))\mathrm{d}^3r\,, \end{aligned} \tag{2.25}$$

wobei

$$\mathbf{B}_{\mathrm{xc}}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{\mathrm{xc}}[\underline{\underline{\rho}}]}{\delta \mathbf{m}(\mathbf{r})} \tag{2.26}$$

das Austausch-Korrelationsfeld ist. In Gleichung (2.25) wurde die kinetische Einelektronenenergie mithilfe der Kohn-Sham-Gleichungen

$$(\hat{T}_s + V_{\mathrm{H}} + \underline{\underline{W}}_{\mathrm{xc}} + \underline{\underline{W}}_{\mathrm{ext}})\underline{\phi}_i = \varepsilon_i \underline{\phi}_i \tag{2.27}$$

ersetzt, wobei

$$\underline{\underline{W}}_{\mathrm{xc}}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{\mathrm{xc}}[\underline{\underline{\rho}}]}{\delta \underline{\underline{\rho}}(\mathbf{r})} \tag{2.28}$$

die Austausch-Korrelations-Potentialmatrix ist.

2.2.1 Lokale-Spin-Dichte-Näherung

Durch den Kohn-Sham-Formalismus wurde das Funktional der Gesamtenergie so umgeformt, dass deren numerisch großen Anteile durch die exakt bekannte kinetische Energie $T_s[n, \mathbf{m}]$ nichtwechselwirkender Elektronen in einem effektiven Potential und durch die Hartree-Energie $E_{\mathrm{H}}[n]$ beschrieben werden.

Für die praktische Anwendung der Spindichtefunktionaltheorie ist noch ein Näherungsansatz für das unbekannte Funktional $E_{\mathrm{xc}}[n, \mathbf{m}]$ der Austausch-Korrelationsenergie notwendig. Ein in vielen Systemen erfolgreicher Ansatz ist die Lokale-Spin-Dichte-Näherung (local spin density approximation, LSDA), mit

$$E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}[\underline{\underline{\rho}}] = E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}[n, |\mathbf{m}|] = \int n(\mathbf{r}) \varepsilon_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}(n(\mathbf{r}), |\mathbf{m}(\mathbf{r})|) \mathrm{d}^3 r\,. \tag{2.29}$$

Dabei verwendet man die Austausch-Korrelations-Energiedichte $\varepsilon_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}$ des homogenen Elektronengases, die eine lokale Funktion der Elektronendichte $n(\mathbf{r})$ und der Spindichte $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ ist. Aufgrund der Isotropie des homogenen Elektronengases, hängt $\varepsilon_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}$ nur vom Betrag $m = |\mathbf{m}|$ der Spindichte ab. Für die Austausch-Korrelations-Energiedichte gibt es verschiedene analytische Parametrisierungen, die man durch Anpassung an Ergebnisse von Verfahren wie Quanten-Monte-Carlo erhält.

Für das Austausch-Korrelationsfeld gilt dann:

$$\begin{aligned}\mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}(n(\mathbf{r}),m(\mathbf{r})) &= \frac{\delta E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}[n,m]}{\delta \mathbf{m}(\mathbf{r})} \\ &= \frac{\delta E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}[n,m]}{\delta m(\mathbf{r})}\frac{\partial m(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{m}(\mathbf{r})} \\ &= \frac{\delta E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}[n,m]}{\delta m(\mathbf{r})}\,\mathbf{e}^{\mathbf{m}}(\mathbf{r})\,, \end{aligned} \tag{2.30}$$

wobei $\mathbf{e}^{\mathbf{m}}(\mathbf{r})$ die Richtung der Spindichte $\mathbf{m}(\mathbf{r}) = m(\mathbf{r})\mathbf{e}^{\mathbf{m}}(\mathbf{r})$ ist. $\mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}$ ist also an jedem Ort $\mathbf{r}$ parallel zu $\mathbf{m}(\mathbf{r})$.

Für die Gesamtenergie gilt:

$$\begin{aligned}E^{\mathrm{LSDA}}[n,\mathbf{m}] =& \sum^{occ.}\langle\underline{\phi}_i|\hat{T}_s|\underline{\phi}_i\rangle + E_{\mathrm{H}}[n] + E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}[n,m] \\ &+ \int (V_{\mathrm{ext}}n + \mu_{\mathrm{B}}\mathbf{B}_{\mathrm{ext}}\cdot\mathbf{m})\mathrm{d}^3r \end{aligned} \tag{2.31}$$

$$\begin{aligned}=& \sum^{occ.}\varepsilon_i - E_{\mathrm{H}}[n] + E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}[n,m] \\ &- \int (V_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}(n,m)\,n + \mu_{\mathrm{B}}\mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}(n,m)\cdot\mathbf{m})\,\mathrm{d}^3r\,. \end{aligned} \tag{2.32}$$

2.3 SDFT mit Nebenbedingungen

Mit der oben dargelegten Spindichtefunktionaltheorie können nur der magnetische Grundzustand bestimmt und dessen Eigenschaften untersucht werden. In den in dieser Arbeit behandelten 3d-Übergangsmetallen Fe, Co und Ni und auch im Seltenerdmetall Gd ist dies die ferromagnetisch kollineare Konfiguration, in der die Spindichte $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ an allen Orten $\mathbf{r}$ in dieselbe Richtung zeigt. Bei Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung zeigt die Spindichte im Grundzustand entlang der leichten Richtung.

In dieser Arbeit sollen jedoch die Eigenschaften von niederenergetisch angeregten magnetischen Konfigurationen untersucht werden. Dies sind hier sowohl nichtkollineare Konfigurationen als auch kollineare Konfigurationen, die nicht parallel zur jeweiligen durch die Spin-Bahn-Kopplung bestimmten leichten Richtung orientiert sind.

Um diese Konfigurationen im Rahmen der Spindichtefunktionaltheorie zu behandeln, muss das Funktional der Gesamtenergie so erweitert bzw. verändert werden, dass sich die zu untersuchende Konfiguration als Grundzustand des neuen Funktionals ergibt, und das minimierte Energiefunktional den Wert der Gesamtenergie dieser Konfiguration annimmt.

In Anlehnung an [10] werden hier zwei Verfahren vorgestellt, wie das LSDA-Energiefunktional $E^{\mathrm{LSDA}}[n, \mathbf{m}]$ verändert bzw. erweitert werden kann, damit die sich ergebende Spindichte $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ im Grundzustand möglichst gut (SQA) bzw. exakt (Lagrange-Zwangsfelder) bestimmte Nebenbedingungen erfüllt.

2.3.1 SQA-Projektion

Im folgenden Verfahren [15] wird ein Feld $\mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}(\mathbf{r})$ von Einheitsvektoren gewählt, durch das die Richtung der Spinquantisierungsachse (SQA) an allen Orten $\mathbf{r}$ festgelegt ist. Wie der Name bereits sagt, kann dadurch an jedem Ort $\mathbf{r}$ ein lokales Koordinatensystem definiert werden, dessen z-Achse parallel zu $\mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}(\mathbf{r})$ ist. Transformiert man die Spindichte $\mathbf{m}$ in das durch $\mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}(\mathbf{r})$ festgelegte Koordinatensystem, so stellt dies noch keine Änderung des LSDA-Energiefunktionals dar.

Das LSDA-Energiefunktional wird nun verändert, indem im Funktional der Austausch-Korrelationsenergie $E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}[n, m]$ der Betrag m, also die Projektion $\mathbf{m} \cdot \mathbf{e}^{\mathbf{m}}$ von $\mathbf{m}$ auf $\mathbf{e}^{\mathbf{m}}$, durch die Projektion $m' = \mathbf{m} \cdot \mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}$ von $\mathbf{m}$ auf die Richtung $\mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}$ der Spinquantisierungsachse ersetzt wird. Im lokalen, durch die Spinquantisierungsachsen festgelegten Koordinatensystem entspricht dies der Vernachlässigung der Nebendiagonalelemente der Spindichtematrix $\underline{\underline{\rho}}$ bei der Berechnung der Austausch-Korrelationsenergie. Das Funktional der Austausch-Korrelationsenergie hat dann die folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{SQA}}[n, \mathbf{m}; \mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}] &= E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{SQA}}[n, m'] \\ &= \int n(\mathbf{r}) \varepsilon_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}(n(\mathbf{r}), \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}(\mathbf{r}))\, \mathrm{d}^3 r\,. \end{aligned} \tag{2.33}$$

Damit ergibt sich für das Austausch-Korrelationsfeld $\mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{SQA}}(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned}\mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{SQA}}(n(\mathbf{r}), m'(\mathbf{r}); \mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}(\mathbf{r})) &= \frac{\delta E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{SQA}}[n, \mathbf{m}; \mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}]}{\delta \mathbf{m}(\mathbf{r})} \\ &= \frac{\delta E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{SQA}}[n, m']}{\delta m'(\mathbf{r})} \frac{\partial(\mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}(\mathbf{r}))}{\partial \mathbf{m}(\mathbf{r})} \\ &= \frac{\delta E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{SQA}}[n, m']}{\delta m'(\mathbf{r})} \mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}(\mathbf{r}) \,. \end{aligned} \tag{2.34}$$

Es ist also an jedem Ort $\mathbf{r}$ parallel zur Spinquantisierungsachse $\mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}(\mathbf{r})$. In LSDA ist es wie oben gezeigt an jedem Ort parallel zu $\mathbf{e}^{\mathbf{m}}(\mathbf{r})$. Da das Austausch-Korrelationsfeld $\mathbf{B}_{\mathrm{xc}}$ ein sehr großes Feld ist, das für die Austauschaufspaltung und die Erzeugung der Magnetisierung verantwortlich ist, ist zu erwarten, dass sich $\mathbf{e}^{\mathbf{m}}(\mathbf{r})$ im Grundzustand bei Verwendung der SQA-Projektion nahezu parallel zu $\mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}(\mathbf{r})$ einstellt.

Für das Funktional der Gesamtenergie gilt:

$$\begin{aligned} E^{\mathrm{SQA}}[n, \mathbf{m}; \mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}] &= \sum^{occ.} \langle \underline{\phi}_i | \hat{T}_s | \underline{\phi}_i \rangle + E_{\mathrm{H}}[n] + E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{SQA}}[n, m'] \\ &\quad + \int (V_{\mathrm{ext}} n + \mu_{\mathrm{B}} \mathbf{B}_{\mathrm{ext}} \cdot \mathbf{m}) \, \mathrm{d}^3 r \end{aligned} \tag{2.35}$$

$$\begin{aligned} &= \sum^{occ.} \varepsilon_i - E_{\mathrm{H}}[n] + E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{SQA}}[n, m'] \\ &\quad - \int (V_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{SQA}}(n, m') \, n + \mu_{\mathrm{B}} \mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{SQA}}(n, m') \cdot \mathbf{m}) \, \mathrm{d}^3 r \,. \end{aligned} \tag{2.36}$$

Das hier beschriebene Verfahren, in dem durch das Vorgeben eines Feldes $\mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}(\mathbf{r})$ von Spinquantisierungsachsen und durch die Verwendung der SQA-Projektion im Energiefunktional die Konfiguration des sich ergebenden Grundzustandes näherungsweise festgelegt wird, wird in dieser Arbeit nur in den kollinearen Rechnungen (Abschnitt 6.1 und [16]) verwendet, die die sogenannte Torque-Operator-Methode verwenden. Für alle anderen, insbesondere nichtkollinearen Rechnungen, wird das im Folgenden beschriebene Verfahren der Lagrange-Zwangsfelder verwendet, in dem der Grundzustand die gestellten Nebenbedingungen exakt erfüllt. Allerdings wird auch dabei eine SQA-Projektion (mit abschnittsweise konstanten Spinquantisierungsachsen) verwendet, so dass die obigen Betrachtungen zum weiteren Verständnis beitragen.

2.3.2 Lagrange-Zwangsfelder

Die Bestimmung der Elektronendichte $n(\mathbf{r})$ und der Spindichte $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ im Grundzustand geschieht in der Spindichtefunktionaltheorie durch die Minimierung des Funktionals $E[n, \mathbf{m}]$ der Gesamtenergie bezüglich dieser Größen. Da es sich also um ein Extremalproblem handelt, können mit der Methode der Lagrange-Multiplikatoren Nebenbedingungen für n und $\mathbf{m}$ eingeführt werden [17]. Sollen n und $\mathbf{m}$ eine diskrete Anzahl von Nebenbedingungen erfüllen, so werden diese als verschwindende Terme

$$F_i[n(\mathbf{r}), \mathbf{m}(\mathbf{r})] = 0 \tag{2.37}$$

formuliert. Die stationäre Lösung, die diese Zwangsbedingungen erfüllt, erhält man durch Minimierung des Funktionals

$$E[n, \mathbf{m}] + \sum_i \lambda_i F_i[n, \mathbf{m}] \tag{2.38}$$

bezüglich n, $\mathbf{m}$ und der Lagrangemultiplikatoren λ_i.

Formuliert man wie im Folgenden ein kontinuierliches Feld von Nebenbedingungen, so wird dieses an ein Lagrangemultiplikatorfeld gekoppelt und als Skalar zum Energiefunktional $E[n, \mathbf{m}]$ addiert. Es muss dann nach n, $\mathbf{m}$ und dem Lagrangefeld variiert werden.

Möchte man, dass die bei der Minimierung erhaltene Spindichte $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ an jedem Ort $\mathbf{r}$ parallel zu einem gewählten (nichtkollinearen) Einheitsvektorfeld $\mathbf{e}^\lambda(\mathbf{r})$ ist, so lautet die Nebenbedingung:

$$\mathbf{m} - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{e}^\lambda)\mathbf{e}^\lambda = 0\,, \tag{2.39}$$

die Transversalkomponente von $\mathbf{m}$ bezüglich $\mathbf{e}^\lambda$ soll also verschwinden. Diese Nebenbedingung wird an das Lagrangefeld $\mathbf{B}^\lambda(\mathbf{r})$ gekoppelt und in der Form

$$\int \mu_\mathrm{B} \mathbf{B}^\lambda \cdot (\mathbf{m} - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{e}^\lambda)\mathbf{e}^\lambda)\, \mathrm{d}^3 r \tag{2.40}$$

zum LSDA-Energiefunktional (2.31) addiert. Das so erweiterte Funktional

lautet dann:

$$E^{\lambda}[n,\mathbf{m}] = \sum^{occ.} \langle \underline{\phi}_i | \hat{T}_s | \underline{\phi}_i \rangle + E_{\mathrm{H}}[n] + E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}[n,m] + \int (V_{\mathrm{ext}} n + \mu_{\mathrm{B}} \mathbf{B}_{\mathrm{ext}} \cdot \mathbf{m} + \mu_{\mathrm{B}} \mathbf{B}^{\lambda} \cdot (\mathbf{m} - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{e}^{\lambda}) \mathbf{e}^{\lambda})) \mathrm{d}^3 r \tag{2.41}$$

$$= \sum^{occ.} \varepsilon_i - E_{\mathrm{H}}[n] + E_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}[n,m] - \int (V_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}(n,m)\, n + \mu_{\mathrm{B}} \mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}(n,m) \cdot \mathbf{m})\, \mathrm{d}^3 r\,. \tag{2.42}$$

Man erkennt, dass das Lagrangefeld $\mathbf{B}^{\lambda}$ in der Form eines externen Feldes eingeht, wobei nur die Transversalkomponente $\mathbf{B}^{\lambda} - (\mathbf{B}^{\lambda} \cdot \mathbf{e}^{\lambda})\mathbf{e}^{\lambda}$ von $\mathbf{B}^{\lambda}$ bezüglich $\mathbf{e}^{\lambda}$ eine Rolle spielt. Die longitudinale Komponente spielt keine Rolle und kann auf Null gesetzt werden. Das Langrange-Zwangsfeld steht also senkrecht auf $\mathbf{e}^{\lambda}$.

2.3.3 Drehmomente

In [10] werden zusätzlich zu den hier beschriebenen Energiefunktionalen auch die jeweiligen Gleichgewichte der Drehmomentdichten auf die Spindichte $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ untersucht, die bei Verwendung der verschiedenen Funktionale im stationären Punkt, d.h. bei verschwindender Variation bezüglich $n(\mathbf{r})$ und $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ gelten. Die Ergebnisse aus [10] sollen hier der Vollständigkeit halber und zum besseren Verständnis kurz wiedergegeben werden.

Im stationären Punkt verschwindet die Variation des entsprechenden Energiefunktionals bezüglich n und $\mathbf{m}$ und bei der Methode der Lagrangemultiplikatoren auch bezüglich $\mathbf{B}^{\lambda}$. Das im stationären Punkt wirkende Feldergleichgewicht erhält man, indem man die einzelnen Energiebeiträge im jeweiligen Energiefunktional nach $\mathbf{m}$ variiert und die Summe gleich Null setzt. Das Drehmomentengleichgewicht ergibt sich durch Bildung des Vektorprodukts aus Feldergleichgewicht und $\mathbf{m}$.

Die Felder- und Drehmomentengleichgewichte werden im Folgenden für die Funktionale E^{LSDA}, E^{SQA} und E^{λ} angegeben und kurz kommentiert. Die Variation $\delta T_s / \delta \mathbf{m}$ der kinetischen Einelektronenenergie T_s nach $\mathbf{m}$ wird als kinetisches Feld bezeichnet.

LSDA

Bei Verwendung des Energiefunktionals $E^{\mathrm{LSDA}}[n, \mathbf{m}]$ aus (2.31) gilt im stationären Punkt das Feldergleichgewicht

$$0 = \frac{\delta E^{\mathrm{LSDA}}}{\delta \mathbf{m}} = \frac{\delta T_s}{\delta \mathbf{m}} + \mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}(n, m) + \mathbf{B}_{\mathrm{ext}} \,. \tag{2.43}$$

Da $\mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}$ an jedem Ort $\mathbf{r}$ parallel zu $\mathbf{m}$ ist, gilt im Drehmomentengleichgewicht

$$0 = \frac{\delta E^{\mathrm{LSDA}}}{\delta \mathbf{m}} \times \mathbf{m} = \frac{\delta T_s}{\delta \mathbf{m}} \times \mathbf{m} + \mathbf{B}_{\mathrm{ext}} \times \mathbf{m} \,. \tag{2.44}$$

Ohne äußeres Feld ist im stationären Punkt (2.43) das kinetische Feld gleich dem negativen Austausch-Korrelationsfeld. Da dieses an jedem Ort $\mathbf{r}$ parallel zu $\mathbf{m}$ ist, ist es das kinetische Feld auch. Ohne äußeres Feld erzeugt also das kinetische Feld in (2.44) kein Drehmoment.

SQA-Projektion

Bei Verwendung des Energiefunktionals $E^{\mathrm{SQA}}[n, \mathbf{m}; \mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}]$ aus (2.35) gilt im stationären Punkt das Feldergleichgewicht

$$0 = \frac{\delta E^{\mathrm{SQA}}}{\delta \mathbf{m}} = \frac{\delta T_s}{\delta \mathbf{m}} + \mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{SQA}}(n, m') + \mathbf{B}_{\mathrm{ext}} \,. \tag{2.45}$$

Auch hier erhält man, in einer Situation ohne äußeres Feld, das kinetische Feld als das Negative des Austausch-Korrelationsfeldes. Da $\mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{SQA}}$ aber nicht unbedingt an jedem Ort parallel zu $\mathbf{m}$ ist, übt es im Drehmomentengleichgewicht

$$0 = \frac{\delta E^{\mathrm{SQA}}}{\delta \mathbf{m}} \times \mathbf{m} = \frac{\delta T_s}{\delta \mathbf{m}} \times \mathbf{m} + \mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{SQA}} \times \mathbf{m} + \mathbf{B}_{\mathrm{ext}} \times \mathbf{m} \tag{2.46}$$

ein Drehmoment aus, das dem Drehmoment des kinetischen Feldes das Gleichgewicht hält. Das kinetische Feld ist also auch nicht punktweise parallel zu $\mathbf{m}$.

Lagrange-Zwangsfelder

Bei der Verwendung von Lagrange-Zwangsfeldern ergibt sich das Feldergleichgewicht

$$0 = \frac{\delta E^\lambda}{\delta \mathbf{m}} = \frac{\delta T_s}{\delta \mathbf{m}} + \mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{LSDA}}(n,m) + \mathbf{B}_{\mathrm{ext}} + (\mathbf{B}^\lambda - (\mathbf{B}^\lambda \cdot \mathbf{e}^\lambda)\mathbf{e}^\lambda)\,. \quad (2.47)$$

Hier sieht man nochmals deutlich, dass die zu $\mathbf{e}^\lambda$ transversalen Komponenten der Zwangsfelder $\mathbf{B}^\lambda$ wie externe Felder eingehen. Im Drehmomentengleichgewicht verschwindet das Drehmoment des Austausch-Korrelationsfeldes, da dieses parallel zu $\mathbf{m}$ ist. Außerdem wird verwendet, dass $\mathbf{m}$ im stationären Punkt die Nebenbedingungen erfüllt und damit punktweise parallel zu $\mathbf{e}^\lambda$ ist,

$$0 = \frac{\delta E^\lambda}{\delta \mathbf{m}} \times \mathbf{m} = \frac{\delta T_s}{\delta \mathbf{m}} \times \mathbf{m} + \mathbf{B}_{\mathrm{ext}} \times \mathbf{m} + \mathbf{B}^\lambda \times \mathbf{m}\,. \quad (2.48)$$

Führt man also Nebenbedingungen und damit Zwangsfelder $\mathbf{B}^\lambda$ ein, um eine nichtkollineare Konfiguration von $\mathbf{m}$ zu untersuchen, tritt zwangsweise ein Drehmoment des kinetischen Feldes auf.

2.4 Atomare Größen

In dieser Arbeit wird die dissipative Dynamik atomarer magnetischer Momente untersucht. Um diese zu definieren, wird der gesamte Raum in Atomvolumina $\Omega_{\mathbf{R}}$ aufgeteilt, die an den Kernorten $\mathbf{R}$ zentriert sind. Das atomare Spinmoment $\mathbf{M}_{\mathbf{R}}$ erhält man durch Integration der Spindichte $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ über das Atomvolumen $\Omega_{\mathbf{R}}$,

$$\mathbf{M}_{\mathbf{R}} = \int_{\Omega_{\mathbf{R}}} \mathbf{m}(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3 r\,. \quad (2.49)$$

Das atomare magnetische Spinmoment ist dann durch $-\mu_{\mathrm{B}}\mathbf{M}_{\mathbf{R}}$ gegeben. In den folgenden Kapiteln wird für das atomare magnetische Moment ebenfalls das Symbol $\mathbf{M}_{\mathbf{R}}$ verwendet. Dabei wird also das magnetische Bahnmoment vernachlässigt und für das atomare Spinmoment und das atomare magnetische Spinmoment, die sich nur um den Faktor $-\mu_{\mathrm{B}}$ unterscheiden, ein Symbol benutzt. Die Richtung der atomaren Spinmomente ist durch

$$\mathbf{e}_{\mathbf{R}} = \mathbf{M}_{\mathbf{R}}/M_{\mathbf{R}} \quad (2.50)$$

definiert. Die in dieser Arbeit verwendeten Atomvolumina $\Omega_{\mathbf{R}}$ sind die durch die unten behandelte Atomkugelnäherung definierten Atomkugeln.

Adiabatische Näherung

Die sogenannte adiabatische Näherung wird bei der Beschreibung der Energetik statischer Magnetisierungskonfigurationen und bei der atomaren Spindynamik auf einer Zeitskala der inversen Magnonenfrequenz verwendet.

In statischen Situationen wird dabei angenommen, dass die elektronische Gesamtenergie $E(\{\mathbf{e_R}\})$ vollständig durch die Konfiguration $\{\mathbf{e_R}\}$ der Richtungen der atomaren Momente $\mathbf{M_R}$ bestimmt ist. Auch der Betrag $M_{\mathbf{R}}$ der atomaren Momente ist eine Funktion der Konfiguration $\{\mathbf{e_R}\}$.

Bei der atomaren Spindynamik in adiabatischer Näherung wird angenommen, dass die Dynamik auf der Zeitskala der inversen Magnonenfrequenz ebenfalls durch atomare magnetische Momente beschrieben werden kann und sich die schnelleren magnetischen Freiheitsgrade bezüglich einer momentanen Konfiguration $\{\mathbf{e_R}\}$ stets im Grundzustand befinden. Die Dynamik der atomaren Momente $\mathbf{M_R}$ ist dann durch die Energielandschaft $E(\{\mathbf{e_R}\})$ bestimmt.

2.4.1 Atomkugelnäherung

Der Begriff der Atomkugelnäherung (atomic sphere approximation, ASA) beinhaltet zwei Näherungen, die in dieser Arbeit beide verwendet werden.

Potential-ASA

Die Volumina $\Omega_{\mathbf{R}}$ der Atomkugeln, die an den Orten $\mathbf{R}$ der Kerne zentriert sind, werden so groß gewählt, dass ihre Summe dem gesamten Kristallvolumen entspricht. Es findet dabei ein Überlapp der Atomkugeln statt. In den Atomkugeln wird das Potential sphärisch gemittelt. Im Zwischenbereich, der keiner Atomkugel zuzuordnen ist, wird das Potential flach gewählt. Bei der Berechnung von Matrixelementen wird der Zwischenbereich nicht berücksichtigt.

Spin-ASA

Bei der Spin-ASA wird die oben behandelte SQA-Projektion verwendet, d.h. im LSDA-Funktional der Austausch-Korrelationsenergie wird der Be-

trag m der Spindichte $\mathbf{m}$ durch die Projektion $m' = \mathbf{m} \cdot \mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}$ auf die unabhängig gewählten Spinquantisierungsachsen $\mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}(\mathbf{r})$ ersetzt. Das Feld der Spinquantisierungsachsen $\mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}(\mathbf{r})$ wird außerdem abschnittsweise konstant gewählt, indem pro Atomkugel eine konstante Spinquantisierungsachse $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\mathrm{SQA}}$ definiert wird.

Das Austausch-Korrelationsfeld $\mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{SQA}}$ ist dann innerhalb jeder Atomkugel kollinear und parallel zu $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\mathrm{SQA}}$ (aber betragsmäßig nicht überall gleich groß). Aufgrund des starken Feldes $\mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{SQA}}$ wird eine Parallelstellung von $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ und $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\mathrm{SQA}}$ bevorzugt. Bei nichtkollinearen Konfigurationen, oder auch bei einer kollinearen Konfiguration mit Spin-Bahn-Kopplung außerhalb einer Gleichgewichtsrichtung ist $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ innerhalb der Atomkugel nichtkollinear und es entstehen deshalb lokale Drehmomente. Die Richtung $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ des atomaren Spinmoments ist im Allgemeinen auch nicht parallel zu $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\mathrm{SQA}}$, es sei denn durch Zwangsfelder $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}^{\lambda}$ wird eine Parallelstellung von $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ und $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\lambda}$ erzwungen und $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\mathrm{SQA}}$ parallel zu $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\lambda}$ gewählt (so wird in der vorliegenden Arbeit verfahren, siehe Abschnitt 2.4.3).

2.4.2 Zwangsfelder für atomare Momente

In Abschnitt 2.3.2 wurde beschrieben, wie das Energiefunktional mithilfe des Lagrange-Zwangsfeldes $\mathbf{B}^{\lambda}(\mathbf{r})$ erweitert werden muss, damit die Spindichte $\mathbf{m}(\mathbf{r})$, die sich bei der Minimierung ergibt, punktweise parallel zum Feld $\mathbf{e}^{\lambda}(\mathbf{r})$ ist. Es ist auch möglich (und wird in den numerischen Untersuchungen der vorliegenden Arbeit gemacht), Nebenbedingungen für die Richtungen der atomaren Spinmomente $\mathbf{M}_{\mathbf{R}}$ einzuführen. Dabei wird gefordert, dass die atomaren Spinmomente $\mathbf{M}_{\mathbf{R}}$ sich bei der Minimierung jeweils parallel zu einer pro Atomkugel gewählten Sollrichtung $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\lambda}$ ergeben. Die Transversalkomponente der Momente $\mathbf{M}_{\mathbf{R}}$ auf die Richtungen $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\lambda}$ sollen also jeweils verschwinden. Diese Nebenbedingungen lauten dann für jede Atomkugel:

$$\mathbf{M}_{\mathbf{R}} - (\mathbf{M}_{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\lambda})\, \mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\lambda} = \int_{\Omega_{\mathbf{R}}} (\mathbf{m} - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\lambda})\, \mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\lambda})\, \mathrm{d}^3 r = 0\,, \tag{2.51}$$

und werden mit dem Lagrange-Zwangsfeld $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}^{\lambda}$ pro Kugel in Form von

$$\sum_{\mathbf{R}} \mathbf{B}_{\mathbf{R}}^{\lambda} \cdot \int_{\Omega_{\mathbf{R}}} (\mathbf{m} - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\lambda})\, \mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\lambda})\, \mathrm{d}^3 r = 0 \tag{2.52}$$

zum Energiefunktional hinzuaddiert.

2.4.3 Atomare Zwangsfelder + Spin-ASA

Um in den numerischen Untersuchungen der vorliegenden Arbeit bestimmte Richtungen $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\lambda}$ der atomaren Spinmomente $\mathbf{M}_{\mathbf{R}}$ zu erzwingen, wird die Spin-ASA (2.4.1) und die Lagrange-Methode (2.4.2) mit atomaren Zwangsfeldern $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}^{\lambda}$ kombiniert. Man wählt also pro Atomkugel eine Sollrichtung $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\lambda}$ und eine Spinquantisierungsachse $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\mathrm{SQA}}$ (die in dieser Arbeit parallel sind). Die Lagrange-Zwangsfelder $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}^{\lambda} \perp \mathbf{e}_{\mathbf{R}}^{\lambda}$ werden selbstkonsistent bestimmt. Auch hier können aufgrund von nichtkollinearem $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ innerhalb der Atomkugel lokale Drehmomente durch das Austausch-Korrelationsfeld $\mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{SQA}}$ auftreten.

2.5 Magnetic-Force-Theorem

Im folgenden Abschnitt wird ein magnetisches Force-Theorem (magnetic force theorem, MFT) angelehnt an [18] eingeführt. Dieses ermöglicht die Ableitung der elektronischen Gesamtenergie $\partial E / \partial \mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ nach der Richtung $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ des magnetischen Spinmoments $\mathbf{M}_{\mathbf{R}}$ allein durch die Ableitung der Bandenergie darzustellen. Diese Form der Darstellung ist in Abschnitt 3.3.2 notwendig, um im Rahmen des Breathing-Fermi-Surface-Modells auf dem effektiven Feld

$$\mathbf{H}_{\mathrm{eff},\mathbf{R}} = \frac{1}{M_{\mathbf{R}}} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{e}_{\mathbf{R}}} \tag{2.53}$$

und der adiabatischen Bewegungsgleichung aufbauend, eine dissipative Bewegungsgleichung für die Richtungen $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ der atomaren magnetischen Momente abzuleiten.

In diesem Magnetic-Force-Theorem wird das Harris-Foulkes-Funktional E^{HF} [19, 20] verwendet, das es ermöglicht die Grundzustandsenergie durch eine gut geratene nichtselbstkonsistente Dichte abzuschätzen. Der Fehler hängt dann in zweiter Ordnung von der Differenz zwischen geratener und wahrer Grundzustandsdichte ab.

2.5.1 Harris-Foulkes-Funktional

Das sogenannte Harris-Foulkes-Funktional wurde von Harris [19] und Foulkes und Haydock [20] eingeführt. Die Darstellung hier folgt [10] und [20], wobei in [20] eine skalare Elektronendichte verwendet wird.

Um mithilfe des Harris-Foulkes-Funktionals die elektronische Gesamtenergie abzuschätzen, geht man wie folgt vor:

Mit einer geeignet gewählten Anfangsspindichtematrix

$$\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(n^{\mathrm{in}}(\mathbf{r})\underline{\underline{1}} + \mathbf{m}^{\mathrm{in}}(\mathbf{r}) \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}) \tag{2.54}$$

berechnet man die Eingangspotentiale $V_{\mathrm{H}} = V_{\mathrm{H}}[n^{\mathrm{in}}]$ und

$$V_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{in}}(\mathbf{r}) = \left.\frac{\delta E_{\mathrm{xc}}}{\delta n(\mathbf{r})}\right|_{\rho^{\mathrm{in}}(\mathbf{r})}, \tag{2.55}$$

$$\mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{in}}(\mathbf{r}) = \left.\frac{\delta E_{\mathrm{xc}}}{\delta \mathbf{m}(\mathbf{r})}\right|_{\rho^{\mathrm{in}}(\mathbf{r})} \tag{2.56}$$

als Variation an der Stelle der Eingangsdichtematrix. Dann werden die durch diese Potentiale bestimmten Einelektronenwellengleichungen

$$(\hat{T}_s + V_{\mathrm{H}}^{\mathrm{in}} + \underline{\underline{W}}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{in}} + \underline{\underline{W}}_{\mathrm{ext}})\underline{\phi}_i^{\mathrm{out}} = \varepsilon_i^{\mathrm{HF}}\underline{\phi}_i^{\mathrm{out}} \tag{2.57}$$

gelöst, wobei die allgemeine Form der Potentialmatrix durch

$$\underline{\underline{W}}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})\underline{\underline{1}} + \mu_{\mathrm{B}}\mathbf{B}(\mathbf{r}) \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \tag{2.58}$$

gegeben ist. Das Harris-Foulkes-Funktional ist dann wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} E^{\mathrm{HF}}[\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}] = &\sum^{occ.} \varepsilon_i^{\mathrm{HF}} - E_{\mathrm{H}}[n^{\mathrm{in}}] + E_{\mathrm{xc}}[\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}] \\ &- \int (V_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{in}}(\mathbf{r})\, n^{\mathrm{in}}(\mathbf{r}) + \mu_{\mathrm{B}}\mathbf{B}_{\mathrm{xc}}^{\mathrm{in}}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{m}^{\mathrm{in}}(\mathbf{r}))\mathrm{d}^3 r\,. \end{aligned} \tag{2.59}$$

Das Harris-Foulkes-Funktional hängt also nur von Energieeigenwerten $\varepsilon_i^{\mathrm{HF}}$ der Einelektronenwellengleichung und von der gewählten Anfangsspindichtematrix $\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}$ ab. $E^{\mathrm{HF}}[\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}]$ lässt sich also in einer „one-shot“-Rechnung, d.h. einem Iterationsschritt bestimmen, in dem die oben beschriebenen Schritte nacheinander durchgeführt werden. Die gewählte Anfangsdichte ist im Allgemeinen nicht selbstkonsistent, d.h., dass die aus den Wellenfunktionen $\underline{\phi}_i^{\mathrm{out}}$ nach

$$\rho_{\alpha\beta}^{\mathrm{out}}(\mathbf{r}) = \sum_i^{\mathrm{occ.}} \phi_{i,\alpha}^{*\mathrm{out}}(\mathbf{r})\phi_{i,\beta}^{\mathrm{out}}(\mathbf{r}) \tag{2.60}$$

gebildete Dichtematrix $\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{out}} \neq \underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}$ ist. Für das Harris-Foulkes-Energiefunktional ist die Kenntnis von $\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{out}}$ jedoch nicht notwendig, da der Doppelzählungsterm hier nur von $\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}$ abhängt, welche a priori festgelegt ist. Diese Eigenschaft ist bei der Verwendung im Magnetic-Force-Theorem von entscheidender Bedeutung.

Verwendet man die im Kohn-Sham-Formalismus selbstkonsistente Grundzustandsdichte $\underline{\underline{\rho}}^{0}$ als Anfangsdichte, so nimmt das Harris-Foulkes-Energiefunktional den Wert des Hohenberg-Kohn-Sham-Energiefunktionals, also die Grundzustandsenergie an. Die Harris-Foulkes-Einelektronenenergien $\varepsilon_i^{\mathrm{HF}}$ sind dann gleich den Kohn-Sham-Einelektronenenergien. Das Harris-Foulkes-Energiefunktional ist für die Grundzustandsdichte wie das Hohenberg-Kohn-Sham-Energiefunktional stationär, aber nicht unbedingt minimal. Der Fehler des Harris-Foulkes-Energiefunktionals bei der Bestimmung der Grundzustandsenergie verschwindet also in erster Ordnung der Dichte, kann aber beide Vorzeichen annehmen. Die Entwicklung des Harris-Foulkes-Energiefunktionals um die Grundzustandsdichte ist in [20] (dort für skalare Dichte) und in [10] bis zur zweiten Ordnung im Fehler der Dichte wie folgt angegeben:

$$\begin{aligned} E^{\mathrm{HF}}[\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}] &= E^{\mathrm{HKS}}[\underline{\underline{\rho}}^{0}] \\ &\quad + \frac{1}{2}\sum_{ijkl}\int\int \left.\frac{\delta^2 E^{\mathrm{HKS}}}{\delta\rho_{ij}(\mathbf{r})\delta\rho_{kl}(\mathbf{r}')}\right|_{\underline{\underline{\rho}}^{0}} \Delta\rho_{ij}^{\mathrm{out}}(\mathbf{r})\Delta\rho_{kl}^{\mathrm{in}}(\mathbf{r}')\,\mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r' + \dots\,. \end{aligned} \tag{2.61}$$

Dabei gilt für die Dichtefehler $\Delta\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in,out}} = \underline{\underline{\rho}}^{0} - \underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in,out}}$.

Der Ausdruck für den Fehler kann so umgeformt [10, 21] werden, dass auch hier die Dichte $\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{out}}$ nicht bekannt sein muss. Für ein gegebenes $\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}$ kann wie oben beschrieben (Berechnung der Potentiale aus $\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}$, Lösung der Einelektronenwellengleichung, Berechnung von $\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{out}}$ aus $\underline{\phi}_i$) ein $\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{out}}[\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}]$ berechnet werden, wobei für die selbstkonsistente Grundzustandsdichte $\underline{\underline{\rho}}^{0}$, $\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{out}}[\underline{\underline{\rho}}^{0}] = \underline{\underline{\rho}}^{0}$ gilt. Dann kann $\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{out}}[\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}]$ um $\underline{\underline{\rho}}^{0}$ in Potenzen von $\Delta\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}$ entwickelt werden, wobei der Term nullter Ordnung gerade $\underline{\underline{\rho}}^{0}$ ist. Die Entwicklung von $\Delta\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{out}}$ nach Potenzen von $\Delta\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}$,

$$\Delta\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{out}}(\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}^3r'\mathrm{Tr}\underline{\underline{A}}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\Delta\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}(\mathbf{r}') + \dots\,, \tag{2.62}$$

besitzt dann keinen Term nullter Ordnung und der Fehler der Harris-Foulkes-Energie

$$E^{\mathrm{HF}}[\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}] = E^{\mathrm{HKS}}[\underline{\underline{\rho}}^{0}] + \mathcal{O}_2(\Delta\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}) \tag{2.63}$$

ist von zweiter Ordnung im Fehler der gewählten Eingangsdichte.

2.5.2 MFT

In diesem Abschnitt und in [5, 6] wird die Ableitung $\partial E(\{\mathbf{e_R}\})/\partial\mathbf{e_R}$ der elektronischen Gesamtenergie, bei einer gegebenen Konfiguration $\{\mathbf{e_R}\}$, nach der Richtung $\mathbf{e_R}$ des atomaren Moments $\mathbf{M_R}$ berechnet. Dabei wird eine Variante des in [18] vorgestellten Magnetic-Force-Theorems verwendet, die es ermöglicht $\partial E/\partial\mathbf{e_R}$ als Ableitung der Bandenergie nach $\mathbf{e_R}$ darzustellen.

Zuerst wird die Referenzkonfiguration $\{\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}}\}$ definiert, deren Gesamtenergie nach der Richtung $\mathbf{e_R}$ abgeleitet werden soll. Die atomaren Lagrange-Zwangsfelder $\mathbf{B}^{\lambda,0}_{\mathbf{R}}$, die diese Konfiguration erzeugen, werden in einer selbstkonsistenten Dichte-Funktional-Theorie-Rechnung bestimmt. Durch diese Rechnung erhält man außerdem die selbstkonsistente Dichtematrix

$$\begin{aligned}\underline{\underline{\rho}}^{0}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2}(n^0(\mathbf{r})\underline{\underline{1}} + \mathbf{m}^0(\mathbf{r})\cdot\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}) \\ &= \frac{1}{2}(n^0(\mathbf{r})\underline{\underline{1}} + m^0(\mathbf{r})\,\mathbf{e}^{\mathbf{m}}_0(\mathbf{r})\cdot\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}})\end{aligned} \tag{2.64}$$

der Referenzkonfiguration, sowie die effektive Potentialmatrix $\underline{\underline{W}}[\underline{\underline{\rho}}^0;\mathbf{B}^{\lambda,0}_{\mathbf{R}}]$, die Kohn-Sham-Einelektronenenergien $\varepsilon_i[\underline{\underline{W}}[\underline{\underline{\rho}}^0;\mathbf{B}^{\lambda,0}_{\mathbf{R}}]]$, die zugehörigen Besetzungszahlen f^0_i und die Gesamtenergie $E[\underline{\underline{\rho}}^0;\mathbf{B}^{\lambda,0}_{\mathbf{R}}]$.

In einem zweiten Schritt wird eine leicht variierte Konfiguration

$$\{\mathbf{e}^1_{\mathbf{R}}\} = \{\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}} + \delta\mathbf{e_R}\} = \{\mathsf{R}_{\mathbf{R}}\cdot\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}}\} \tag{2.65}$$

mit der lokalen Rotation $\mathsf{R}_{\mathbf{R}} \in \mathrm{SO}(3)$ am Atomort $\mathbf{R}$ betrachtet. Auch hier werden die Lagrange-Felder $\mathbf{B}^{\lambda,1}_{\mathbf{R}}$, die die Konfiguration $\{\mathbf{e}^1_{\mathbf{R}}\}$ erzwingen selbstkonsistent bestimmt. Die dabei durchgeführte selbstkonsistente DFT-Rechnung dient nur der Bestimmung der Zwangsfelder $\mathbf{B}^{\lambda,1}_{\mathbf{R}}$. Die selbstkonsistente Dichtematrix

$$\underline{\underline{\rho}}^{1}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(n^1(\mathbf{r})\underline{\underline{1}} + \mathbf{m}^1(\mathbf{r})\cdot\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}) \tag{2.66}$$

und die selbstkonsistent bestimmte Energie $E[\underline{\underline{\rho}}^1; \mathbf{B}_{\mathbf{R}}^{\lambda,1}]$ wird nicht weiter verwendet. Es könnte an dieser Stelle die Differenz $\delta E = E(\{\mathbf{e}_{\mathbf{R}}^1\}) - E(\{\mathbf{e}_{\mathbf{R}}^0\}) = E[\underline{\underline{\rho}}^1; \mathbf{B}_{\mathbf{R}}^{\lambda,1}] - E[\underline{\underline{\rho}}^0; \mathbf{B}_{\mathbf{R}}^{\lambda,0}]$ der Gesamtenergien der beiden Konfigurationen berechnet werden. Diese setzt sich dann aus der Differenz der Bandenergien und der Differenz der Doppelzählungsterme zusammen und hat damit nicht die geeignete Form, um das Breathing-Fermi-Surface-Modell einzuführen.

Um dies zu ermöglichen, werden die Lagrangefelder $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}^{\lambda,0}$ und $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}^{\lambda,1}$ im Folgenden als externe Felder $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}^0$ und $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}^1$ betrachtet, und die Energie $E(\{\mathbf{e}_{\mathbf{R}}^1\})$ in der Energiedifferenz δE durch das Harris-Foulkes-Energiefunktional berechnet. Dafür wird die Input-Spindichtematrix

$$\begin{aligned}\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2}(n^{\mathrm{in}}(\mathbf{r})\underline{\underline{1}} + \mathbf{m}^{\mathrm{in}}(\mathbf{r}) \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}) \\ &= \frac{1}{2}(n^0(\mathbf{r})\underline{\underline{1}} + [\mathsf{R}_{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{m}^0(\mathbf{r})] \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}) \\ &= \frac{1}{2}(n^0(\mathbf{r})\underline{\underline{1}} + m^0(\mathbf{r})\,[\mathsf{R}_{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{e}_0^{\mathbf{m}}(\mathbf{r})] \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}})\end{aligned} \tag{2.67}$$

konstruiert, indem man die Spindichte der Referenzkonfiguration in der Atomkugel am Ort $\mathbf{R}$ durch die oben definierte Matrix $\mathsf{R}_{\mathbf{R}}$ rotiert. Mit dieser Dichtematrix $\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}$ und $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}^1$ werden die Potentialmatrix $\underline{\underline{W}}[\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}; \mathbf{B}_{\mathbf{R}}^1]$ bestimmt und die Einelektronenwellengleichungen (2.57) gelöst. Dabei erhält man die Einelektronenenergien $\varepsilon_i^{\mathrm{HF}}[\underline{\underline{W}}[\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}; \mathbf{B}_{\mathbf{R}}^1]]$ und die zugehörigen Besetzungszahlen $f_i^{\mathrm{HF}} = f(\varepsilon_i^{\mathrm{HF}})$. Für die Energiedifferenz δE gilt dann:

$$\begin{aligned}\delta E &= E(\{\mathbf{e}_{\mathbf{R}}^1\}) - E(\{\mathbf{e}_{\mathbf{R}}^0\}) \\ &= E^{\mathrm{HKS}}[\underline{\underline{\rho}}^1; \mathbf{B}_{\mathbf{R}}^1] - E^{\mathrm{HKS}}[\underline{\underline{\rho}}^0; \mathbf{B}_{\mathbf{R}}^0] \\ &= E^{\mathrm{HF}}[\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}; \mathbf{B}_{\mathbf{R}}^1] + \mathcal{O}_2(\delta n^{\mathrm{in}}, \delta \mathbf{m}^{\mathrm{in}}) - E^{\mathrm{HKS}}[\underline{\underline{\rho}}^0; \mathbf{B}_{\mathbf{R}}^0] \\ &= \sum_i f_i^{\mathrm{HF}} \varepsilon_i^{\mathrm{HF}}[\underline{\underline{W}}[\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}; \mathbf{B}_{\mathbf{R}}^1]] - \sum_i f_i^0 \varepsilon_i[\underline{\underline{W}}[\underline{\underline{\rho}}^0; \mathbf{B}_{\mathbf{R}}^0]] + \mathcal{O}_2(\delta n^{\mathrm{in}}, \delta \mathbf{m}^{\mathrm{in}})\,,\end{aligned} \tag{2.68}$$

wobei $\delta n^{\mathrm{in}} = n^1 - n^{\mathrm{in}}$ und $\delta \mathbf{m}^{\mathrm{in}} = \mathbf{m}^1 - \mathbf{m}^{\mathrm{in}}$ ist. In der dritten Zeile der Gleichung (2.68) wurde (2.61) eingesetzt und in der letzten Zeile wird verwendet, dass die Doppelzählungsterme des Harris-Foulkes-Energiefunktionals $E^{\mathrm{HF}}[\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}; \mathbf{B}_{\mathbf{R}}^1]$ und des Hohenberg-Kohn-Energiefunktionals

$E^{\mathrm{HKS}}[\underline{\underline{\rho}}^0; \mathbf{B}^0_{\mathbf{R}}]$ identisch sind und in der Differenz verschwinden. Letzteres ist dann der Fall, wenn für das Austausch-Korrelations-Energiefunktional die LSDA-Näherung oder die LSDA-Näherung zusammen mit der Spin-ASA verwendet wird und die Spinquantisierungsachse $\mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}_{\mathbf{R}}$ in der Atomkugel am Ort $\mathbf{R}$ wie die Spindichte mit $\mathsf{R}_{\mathbf{R}}$ rotiert wird. Dann hängt der Doppelzählungsterm des Funktionals $E^{\mathrm{HKS}}[\underline{\underline{\rho}}^0; \mathbf{B}^0_{\mathbf{R}}]$ nur vom Betrag $m^0(\mathbf{r})$ (LSDA) oder der Projektion $m'^0(\mathbf{r}) = \mathbf{m}^0(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}_{\mathbf{R}}$ (LSDA + Spin-ASA) ab. Dieser ist damit gleich dem Doppelzählungsterm des Funktionals $E^{\mathrm{HF}}[\underline{\underline{\rho}}^{\mathrm{in}}; \mathbf{B}^1_{\mathbf{R}}]$, da dieser nur von $|\mathbf{m}^{\mathrm{in}}(\mathbf{r})| = m^0(\mathbf{r})$ (LSDA) oder von $m'^{\mathrm{in}} = \mathbf{m}^{\mathrm{in}}(\mathbf{r}) \cdot [\mathsf{R}_{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}_{\mathbf{R}}] = [\mathsf{R}_{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{m}^0(\mathbf{r})] \cdot [\mathsf{R}_{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}_{\mathbf{R}}] = \mathbf{m}^0(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{e}^{\mathrm{SQA}}_{\mathbf{R}}$ (LSDA + Spin-ASA) abhängt.

Die Größen $f_i^{\mathrm{HF}} = f(\varepsilon_i^{\mathrm{HF}})$ und $\varepsilon_i^{\mathrm{HF}}$ in (2.68) hängen von der Konfiguration $\{\mathbf{e}^1_{\mathbf{R}}\} = \{\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}} + \delta\mathbf{e}_{\mathbf{R}}\}$ ab. Entwickelt man diese Größen um $\{\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}}\}$, vernachlässigt Terme zweiter Ordnung und beachtet, dass $\varepsilon_i^{\mathrm{HF}}(\{\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}}\}) = \varepsilon_i(\{\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}}\})$ gilt, so ergibt sich:

$$\delta E = \sum_i f_i \left.\frac{\partial \varepsilon_i^{\mathrm{HF}}}{\partial \mathbf{e}_{\mathbf{R}}}\right|_{\{\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}}\}} \cdot \delta\mathbf{e}_{\mathbf{R}} + \sum_i \left.\frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{e}_{\mathbf{R}}}\right|_{\{\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}}\}} \varepsilon_i(\{\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}}\}) \cdot \delta\mathbf{e}_{\mathbf{R}} \,. \tag{2.69}$$

Mit $\partial E/\partial \mathbf{e}_{\mathbf{R}} = \partial \delta E/\partial \delta \mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ erhält man dann:

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{e}_{\mathbf{R}}} = \sum_i f_i \left.\frac{\partial \varepsilon_i^{\mathrm{HF}}}{\partial \mathbf{e}_{\mathbf{R}}}\right|_{\{\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}}\}} + \sum_i \left.\frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{e}_{\mathbf{R}}}\right|_{\{\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}}\}} \varepsilon_i(\{\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}}\}) \,. \tag{2.70}$$

Nimmt man an, dass sich die Besetzungszahlen f_i nur bei Zuständen nahe der Fermienergie ε_{F} aufgrund der Richtungsänderung von $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ ändert, verschwindet der zweite Term in (2.69) und (2.70), da die Anzahl der Elektronen erhalten bleiben muss. Die Ableitungen der Einelektronenenergien können numerisch berechnet werden,

$$\left.\frac{\partial \varepsilon_i^{\mathrm{HF}}}{\partial \mathbf{e}_{\mathbf{R}}}\right|_{\{\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}}\}} = \lim_{\delta\mathbf{e}_{\mathbf{R}} \to 0} \frac{\varepsilon_i^{\mathrm{HF}}(\{\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}} + \delta\mathbf{e}_{\mathbf{R}}\}) - \varepsilon_i(\{\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}}\})}{\delta\mathbf{e}_{\mathbf{R}}} \,, \tag{2.71}$$

wobei $\varepsilon_i^{\mathrm{HF}}(\{\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}}\}) = \varepsilon_i(\{\mathbf{e}^0_{\mathbf{R}}\})$ verwendet wurde.

Alle Ableitungen der Einelektronenenergien, die in dieser Arbeit mit dem Magnetic-Force-Theorem berechnet werden, werden durch die hier dargestellten Schritte berechnet. Im Folgenden wird der Superscript „HF“ weggelassen.

2.6 Spin-Bahn-Kopplung

In dieser Arbeit wird die dissipative Magnetisierungsdynamik im Rahmen des Breathing-Fermi-Surface-Modells behandelt. In diesem Modell entsteht die Magnetisierungsdämpfung als Folge einer zeitlich veränderlichen (atmenden) Fermifläche, und es wird eine Bewegungsgleichung abgeleitet (siehe Abschnitt 3.3 und [5, 6]), deren Dämpfungsparameter durch Ableitungen der Einelektronenenergien bestimmt sind. In nichtkollinearen Systemen atmet die Fermifläche aufgrund der Austauschwechselwirkung, und die atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ sind durch die Ableitungen $\partial\varepsilon_i(\{\mathbf{e}_\mathbf{R}\})/\partial\mathbf{e}_\mathbf{R}$ und $\partial\varepsilon_i(\{\mathbf{e}_\mathbf{R}\})/\partial\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}$ bestimmt. In kollinearen Systemen besitzen alle atomaren magnetischen Momente dieselbe Richtung $\mathbf{e}_\mathbf{R} = \mathbf{e}$. Bei einer kollinearen Dynamik atmet die Fermifläche nur bei Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung, und die Dämpfung wird durch eine Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}$ beschrieben, die durch die Ableitungen $\partial\varepsilon_i(\mathbf{e})/\partial\mathbf{e}$ bestimmt ist. Die Ableitungen $\partial\varepsilon_i(\mathbf{e})/\partial\mathbf{e}$ sind nur mit Spin-Bahn-Kopplung von Null verschieden.

In den numerischen Untersuchungen kollinearer Systeme geht in dieser Arbeit der Spin-Bahn-Kopplungs-Term als Einteilchenoperator [22] in die Einelektronenwellengleichung ein. Da auch die kinetische Energie durch einen Einelektronenoperator $\hat{T}_s$ beschrieben wird, bleiben mit der Ersetzung

$$\hat{T}_s \to \hat{T}_s + \hat{H}_{\mathrm{SOC}} = \hat{T}_s + \sum_{\mathbf{R}} \xi_\mathbf{R}(\partial V/\partial r)\,\hat{\mathbf{l}}_\mathbf{R} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \tag{2.72}$$

in der Einelektronenwellengleichung und im Energiefunktional die Form aller bisherigen Gleichungen unverändert. Der Kopplungsparameter ξ hängt vom skalaren Potential und damit von den Dichten ab. $\hat{\mathbf{l}}_\mathbf{R}$ ist der Einteilchen-Drehimpuls-Operator bezüglich des Kernorts $\mathbf{R}$.

3 Dissipative Magnetisierungsdynamik

3.1 Vorbemerkungen

3.1.1 Zeitskalen

Die beobachteten Phänomene in der Magnetisierungsdynamik werden typischerweise in zwei Kategorien eingeteilt, je nachdem auf welcher Zeitskala sie stattfinden.

Der Bereich von mehreren Pikosekunden (ps) bis Nanosekunden (ns) ist nahe des adiabatischen Limits. Im adiabatischen Limit ist die Dynamik der Magnetisierung langsam genug, dass sich das System der Elektronen bezogen auf die momentane Magnetisierungskonfiguration stets im Grundzustand befindet. In Abschnitt 3.3 wird beschrieben, wie durch die Modellierung einer leicht nichtadiabatischen Situation Dämpfungseffekte eingeführt werden. Beispiele für diesen Bereich der Zeitskala sind z.B. die Dynamik von Domänenwänden [23] oder die gyrotrope Präzession eines magnetischen Vortex [24]. In beiden Beispielen kann die Dynamik von äußeren Magnetfeldern oder von spinpolarisierten Transportströmen getrieben sein. Das in dieser Arbeit betrachtete Breathing-Fermi-Surface-Modell (3.3) und die darin abgeleitete Bewegungsgleichung ist in diesem Bereich nahe des adiabatischen Limits gültig und beinhaltet keine Effekte von spinpolarisierten Strömen.

Bei der Untersuchung von Phänomenen im Femtosekundenbereich (fs), wie z.B. der ultraschnellen Demagnetisierung [25] nach der Anregung durch einen fs-Laser, ist die adiabatische Näherung nicht mehr gültig, und es müssen angeregte Zustände der Elektronen betrachtet werden. Dieser Bereich der Magnetisierungsdynamik ist nicht Teil der vorliegenden Arbeit.

3.1.2 Dissipationskanäle

In der dissipativen Magnetisierungsdynamik wird zwischen direkter und indirekter Dämpfung unterschieden. Bei der indirekten Dämpfung fließt Energie und Drehimpuls aus einer betrachteten magnetischen Mode in andere magnetische Freiheitsgrade ab. Dies tritt z.B. bei der Ferromagnetischen Resonanz (FMR) auf, wenn sich aus der homogenen ferromagnetischen Mode heraus durch nichtlineare Effekte andere nichthomogene Moden entwickeln.

Fließt Energie und Drehimpuls aus dem magnetischen System in nichtmagnetische Freiheitsgrade und letzten Endes an das Gitter ab, so nennt man dies direkte Dämpfung. In dieser Arbeit wird weder die Änderung der magnetischen Energie durch Abstrahlung elektromagnetischer Strahlung aufgrund einer zeitabhängigen Magnetisierung behandelt, noch sind Relaxationsprozesse aufgrund von Dipol-Dipol-Wechselwirkung enthalten. Folglich kann eine direkte Dämpfung der Spinmagnetisierung nur in einem System mit Spin-Bahn-Kopplung auftreten. Ohne Spin-Bahn-Kopplung vertauscht der Operator des gesamten Spinmoments mit dem Hamiltonoperator und das magnetische Spinmoment ist eine Erhaltungsgröße.

Innerhalb der Theorien, die die direkte Dämpfung beschreiben, kann noch weiter differenziert werden. Zum einen gibt es Mechanismen, bei denen der Übertrag von Energie und Drehimpuls aus den magnetischen Freiheitsgraden ohne Umweg auf Freiheitsgrade des Gitters stattfindet. Hierbei ist die Spin-Bahn-Kopplung rein phänomenologisch durch die magnetoelastische Wechselwirkung zwischen dem Magnetisierungsfeld und dem Verzerrungsfeld des Gitters enthalten. Eine zeitlich veränderliche Magnetisierung bringt aufgrund der magnetoelastischen Wechselwirkung ein zeitlich veränderliches Verzerrungsfeld mit sich, welches eine Umbesetzung der Gittermoden (Phononen) durch Phononenstreuung mit endlichen Streuzeiten bedingt. Der durch diesen Prozess erzeugte Dämpfungsmechanismus wird als „Phonon Dragging“[26] bezeichnet.

Eine zweite Kategorie von Theorien beschreibt Mechanismen, bei denen in einem Zwischenschritt elektronische Freiheitsgrade angeregt werden, welche anschließend durch Wechselwirkung mit dem Gitter relaxieren. Ein Beispiel dafür ist die Anregung von Wirbelströmen durch ein zeitabhängiges Magnetisierungsfeld. Die Relaxation der Wirbelströme geschieht dann durch Ohm'sche Dämpfung.

Auch das in dieser Arbeit behandelte Breathing-Fermi-Surface-Modell [5,

7] (siehe Kapitel 3.3) beschreibt dissipative Prozesse der Magnetisierungsdynamik in zwei Teilschritten. Es wird dabei eine leicht nichtadiabatische Situation modelliert, in der die Dynamik der Magnetisierung zuerst Elektron-Loch-Paare anregt, welche anschließend durch Elektron-Phonon-Streuung oder durch Streuung an Defekten relaxieren.

Eine Übersicht über verschiedene direkte und indirekte Dämpfungsmechanismen gibt [27].

3.1.3 Übersicht

Im Folgenden werden die Grundlagen ausgewählter physikalischer Ansätze und Bewegungsgleichungen zur Beschreibung der dissipativen Magnetisierungsdynamik dargestellt.

Begonnen wird in 3.2 mit der Vorstellung der weit verbreitet genutzten phänomenologischen Gilbertgleichung. Ideen zur Verallgemeinerung dieser sehr einfachen Gleichung werden genannt, die dann im Rahmen einer viel grundlegenderen Theorie in 3.3 wiedergefunden werden. Im Anschluss werden in Kapitel 3.3 und 3.4 Modelle vorgestellt, in denen die Magnetisierungsdynamik Elektron-Loch-Paare anregt, welche anschließend relaxieren.

Im verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modell [5, 6] (Abschnitt 3.3) wird eine im Allgemeinen nichtlokale Bewegungsgleichung für atomare magnetische Momente abgeleitet. In dieser Theorie ist die Behandlung von kollinear ferromagnetischen Systemen und nichtkollinearen Systemen vereinigt. Das ursprünglich auf Kamberský zurück gehende Breathing-Fermi-Surface-Modell [7] ist auf kollineare ferromagnetische Systeme beschränkt. Ausgehend von einem effektiven Feld wird dabei die Anregung von Intraband-Elektron-Loch-Paaren durch die Dynamik im Rahmen der Ab-initio-Elektronentheorie beschrieben, während ein phänomenologischer Relaxationszeitansatz deren Relaxation behandelt.

In Kapitel 3.4 wird in kollinearen Systemen der allgemeine durch die Spin-Bahn-Kopplung induzierte Bildungsprozess von Elektron-Loch-Paaren und deren Relaxation behandelt. Diese Prozesse führen zu einer Dissipation in der Magnetisierungsdynamik. Neben dem physikalischen Bild (Abschnitt 3.4.3) des Bildungsprozesses von Elektron-Loch-Paaren und deren Relaxation werden Modelle dargestellt, die diese Prozesse beschreiben und in denen Dämpfungsparameter in verschiedenen Bewegungsgleichungen der dissipativen Magnetisierungsdynamik berechnet werden können.

Begonnen wird hierbei mit dem ebenfalls von Kamberský entwickelten sehr formalen Torque-Correlation-Modell [8], welches ausgehend von der transversalen Suszeptibilität den Gilbert-Dämpfungsparameter in kollinear ferromagnetischer Konfiguration berechnet. Das Ergebnis dieses Modells wird in 3.4.1 zusammen mit einigen Anmerkungen kurz dargestellt. Eine Erweiterung des Torque-Correlation-Modells, das die Berechnung einer Dämpfungsmatrix erlaubt, wird in Kapitel 3.4.2 als „Matrix-Torque-Correlation-Modell“ eingeführt.

Ein weiterer Ansatz von Gilmore et al. [28] folgt in Abschnitt 3.4.4. Ebenfalls ausgehend von einem effektiven Feld (wie beim Breathing-Fermi-Surface-Modell) wird hier der Zusammenhang zwischen der Dämpfung durch Spin-Bahn-Kopplung induzierte Elektron-Loch-Paare, dem Breathing-Fermi-Surface-Modell in kollinearen Systemen und dem Ergebnis des Torque-Correlation-Modells hergestellt. Im Gegensatz zum sehr formalen Torque-Correlation-Modell stellt der Ansatz von Gilmore et al. die zugrunde liegende Physik verständlich dar.

3.2 Phänomenologische Bewegungsgleichung – die Gilbertgleichung

Die Gilbertgleichung [2] ist die auf phänomenologischer Ebene meist genutzte Bewegungsgleichung zur Beschreibung der gedämpften Magnetisierungsdynamik. Mikromagnetische Simulationen beruhen auf ihr oder auf Gleichungen, die um den Einfluss von spinpolarisierten Strömen erweitert wurden.

Die zeitliche Ableitung der Magnetisierung $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$ ist dabei gleich dem Drehmoment, das von einem effektiven Feld $\mathbf{H}_{\text{eff}}$ und einem dämpfenden Feld $\mathbf{H}_{\text{diss}} = \frac{\alpha}{-\gamma M}\frac{\mathrm{d}\mathbf{M}}{\mathrm{d}t}$ auf $\mathbf{M}$ ausgeübt wird:

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\mathbf{M}}{\mathrm{d}t} &= -\gamma \mathbf{M} \times (\mathbf{H}_{\text{eff}} + \mathbf{H}_{\text{diss}}) \\ &= -\gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}) + \frac{1}{M}\mathbf{M} \times \alpha \frac{\mathrm{d}\mathbf{M}}{\mathrm{d}t}\,. \end{aligned} \tag{3.1}$$

$\gamma > 0$ ist das gyromagnetische Verhältnis, M der Betrag der Magnetisierung und α eine phänomenologische skalare Dämpfungskonstante. Das

effektive Feld setzt sich im Allgemeinen aus externem Feld, Austauschfeld, Anisotropiefeld und Dipolfeld zusammen.

Die Gilbertgleichung (3.1) ist die einfachste denkbare Bewegungsgleichung, die eine gedämpfte Präzession der Magnetisierung beschreibt. Der Präzessionsterm, bestehend aus dem Drehmoment des effektiven Feldes, bewirkt eine Präzession der Magnetisierung um die Gleichgewichtsrichtung, welche parallel zum Feld gerichtet ist. Im Dämpfungsterm verursacht $\mathbf{H}_{\text{diss}}$, dessen Stärke durch die Konstante α beschrieben wird, die Relaxation der Magnetisierung hin zur Gleichgewichtsrichtung. Während das effektive Feld im Allgemeinen von der Magnetisierungskonfiguration (z.B. über Anisotropie- und Austauschfeld) abhängig ist, ist α in dieser Gleichung ein konstanter Parameter.

In [1, 3] wird gezeigt, wie Gleichung (3.1) durch Variationsprinzipien abgeleitet werden kann. Dabei wird zuerst die ungedämpfte Präzessionsgleichung,

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{M}}{\mathrm{d}t} = -\gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}) \tag{3.2}$$

mithilfe der Lagrange Gleichungen zweiter Art abgeleitet.

Das dissipative Feld wird als verallgemeinerte geschwindigkeitsabhängige Kraft eingeführt und als additiver Term der Form $\delta R[\dot{\mathbf{M}}]/\delta\dot{\mathbf{M}}$ den Lagrange Gleichungen hinzugefügt. [1] Nach diesem Prinzip werden auch in der klassischen Mechanik Bewegungsgleichungen für Systeme aufgestellt, die dissipative geschwindigkeitsabhängige Reibungskräfte enthalten. $R[\dot{\mathbf{M}}]$ wird dabei Rayleigh'sche Dissipationsfunktion genannt. Mit

$$R[\dot{\mathbf{M}}] = \frac{\eta}{2}\int \dot{\mathbf{M}}(\mathbf{r},t)\cdot\dot{\mathbf{M}}(\mathbf{r},t)\mathrm{d}\mathbf{r} \tag{3.3}$$

und $\gamma M\eta = \alpha$ ergibt sich

$$\delta R[\dot{\mathbf{M}}]/\delta\dot{\mathbf{M}} = \eta\dot{\mathbf{M}} = \frac{\alpha}{\gamma M}\dot{\mathbf{M}} = -\mathbf{H}_{\text{diss}} \tag{3.4}$$

und damit die Gilbertgleichung (3.1).

Angesichts der Einfachheit von Gleichung (3.1), in der das dämpfende Feld durch die skalare Konstante α charakerisiert wird, stellt sich nun die

[1] Eine detaillierte Darstellung der Lagrange Gleichungen und die Einführung der Dissipationsfunktion soll an dieser Stelle nicht stattfinden. Die Darstellung ist auf die Punkte beschränkt, die für die hier gemachten Aussagen wesentlich sind.

Frage, ob dies die allgemein gültige Form ist oder ob es möglich ist, eine verallgemeinerte Bewegungsgleichung abzuleiten.

Bereits Gilbert schlägt eine allgemeinere Form [2, 3] der Rayleigh'schen Dissipationsfunktion vor,

$$R[\dot{\mathbf{M}}] = \frac{1}{2}\sum_{i,j}\int\int\left[\frac{\mathrm{d}\mathbf{M}_i(\mathbf{r},t)}{\mathrm{d}t}\eta_{i,j}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\frac{\mathrm{d}\mathbf{M}_j(\mathbf{r}',t)}{\mathrm{d}t}\right]\mathrm{d}\mathbf{r}\mathrm{d}\mathbf{r}'\,. \tag{3.5}$$

Der Dämpfungsparameter $\underline{\underline{\eta}}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ ist nichtlokal und besitzt Matrixform. Die zur Gilbertgleichung (3.1) analoge Bewegungsgleichung, abgeleitet mit der Dissipationsfunktion (3.5) hat folgende Gestalt:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{M}(\mathbf{r})}{\mathrm{d}t} = -\gamma(\mathbf{M}(\mathbf{r})\times\mathbf{H}_{\mathrm{eff}}) + \frac{1}{M}\mathbf{M}(\mathbf{r})\times\int\underline{\underline{\alpha}}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\frac{\mathrm{d}\mathbf{M}(\mathbf{r}')}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}\mathbf{r}'\,. \tag{3.6}$$

Sie enthält zwei wesentliche Erweiterungen gegenüber (3.1). Das dämpfende Feld wird durch eine nichtlokale Dämpfungsmatrix charakterisiert. D.h., das dämpfende Feld am Ort $\mathbf{r}$ hängt von $\mathrm{d}\mathbf{M}(\mathbf{r}')/\mathrm{d}t$ an anderen Orten $\mathbf{r}'$ ab. Der Matrixcharakter verursacht eine Anisotropie des Dämpfungsterms bezüglich $\mathrm{d}\mathbf{M}/\mathrm{d}t$.

Zur einfachen Form der Rayleigh'schen Dissipationsfunktion (3.3) und zur verallgemeinerten Form (3.5) schreibt Gilbert in [3]: *„The parameter η quantifies the average damping throughout the sample. Equation (3.3) implies that the distribution of energy loss due to damping mechanisms is uniform. This is not, in fact, the case because local damping can be caused by a variety of nonuniform mechanisms: rapid spin reorientation in moving domain walls, ...“*
und:

„A dissipation functional of the form (3.5) would take nonuniform damping into account; however, it is of little use because it is not possible to calculate or measure the matrix damping function $\eta_{ij}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ that replaces the single damping parameter η.“

In Abschnitt 3.3 wird im Rahmen eines mikroskopischen verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells eine Bewegungsgleichung für atomare magnetische Momente abgeleitet, welche die Gestalt von Gleichung (3.6) besitzt. Die im allgemeinen nichtlokale Dämpfungsmatrix enthält zwei Faktoren, eine phänomenologische Relaxationszeit und einen elektronischen Anteil, der im Rahmen der Elektronentheorie berechnet werden kann. Eine weitere Erweiterung gegenüber Gilberts Theorie besteht

darin, dass die Dämpfungsmatrix des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells von der Konfiguration der atomaren magnetischen Momente abhängt.

Andere Modelle, die eine Erweiterung des skalaren Dämpfungsparameters auf einen Dämpfungstensor beschreiben, sind in [29, 30, 31, 32, 33] zu finden, können aber im Rahmen dieser Arbeit nicht detailliert diskutiert werden.

3.3 Verallgemeinertes Breathing-Fermi-Surface-Modell

Das 1970 von Kamberský eingeführte Breathing-Fermi-Surface-Modell [7] beschreibt die dissipative Magnetisierungsdynamik nahe des adiabatischen Limits, also auf einer Zeitskala von mehreren Pikosekunden bis Nanosekunden. Im adiabatischen Limit befindet sich das elektronische System im Grundzustand bezüglich der Konfiguration der betrachteten langsamen magnetischen Freiheitsgrade.

Erst einige Jahrzehnte später wurde Kamberskýs Modell in eine Form gebracht, die für kollineare Systeme eine Behandlung im Rahmen der Ab-initio-Elektronentheorie ermöglicht. Das hier vorgestellte verallgemeinerte Breathing-Fermi-Surface-Modell [5, 6] beschreibt gleichermaßen sowohl kollineare Konfigurationen als auch nichtkollineare Systeme.

3.3.1 Idee des Breathing-Fermi-Surface-Modells

Um die Dissipation bei der dissipativen Magnetisierungsdynamik, d.h. den Energie- und Drehimpulsübertrag des elektronischen Spinsystems an das Gitter vollständig quantenmechanisch zu behandeln, müsste man die zeitabhängige Schrödingergleichung für Elektronen und Kerne lösen. Und zwar inklusive Spin-Bahn-Kopplung, da sie die für den Übertrag verantwortliche Wechselwirkung ist. Im Folgenden wird das System durch eine effektive Einteilchentheorie behandelt. Der Energie- und Drehimpulsübertrag findet dann durch Elektronenstreuung statt, die durch einen phänomenologischen Relaxationszeitansatz der Besetzungszahlen von Einelektronenzuständen beschrieben wird.

Da eine Situation nahe am adiabatischen Limit beschrieben werden soll, sind die hier relevanten Variablen die langsamen magnetischen Freiheitsgrade auf einer Zeitskala, größer als das Inverse der typischen Magnonenfrequenz ν. Hier ist es sinnvoll, atomare magnetische Momente $\mathbf{M_R} = M_\mathbf{R}\mathbf{e_R}$ mit dem Betrag $M_\mathbf{R}$ und der Richtung $\mathbf{e_R}$ an den Atomplätzen $\mathbf{R}$ zu definieren. Diese erhält man durch räumliche Integration der elektronischen magnetischen (Spin-)Momentendichte[2] $\mathbf{m}(\mathbf{r}, t)$ über das Volumen von Atomkugeln am Ort $\mathbf{R}$ und zeitliche Mittelung über die Zeit

[2] Wie bereits in Abschnitt 2.4 angemerkt wurde, wird im Folgenden einerseits das Symbol $\mathbf{M_R}$ für das atomare magnetische Moment und das atomare magnetische Spinmoment verwendet, was die Vernachlässigung des im Allgemeinen viel kleineren

$1/\nu$. Die Näherung, dass die Energie des Elektronensystems allein von den Richtungen $\mathbf{e_R}$ abhängt, wird adiabatische Näherung genannt und wurde bereits in Abschnitt 2.4 vorgestellt.

Im streng adiabatischen Limit ist die Dynamik langsam genug, dass sich das Elektronensystem zu jedem Zeitpunkt t im Grundzustand bezüglich der momentanen Konfiguration $\{\mathbf{e_R}(t)\}$ der atomaren magnetischen Momente befindet. Dann ist es möglich, zu jedem Zeitpunkt t adiabatische Einelektronenenergien $\varepsilon_i(\{\mathbf{e_R}(t)\})$ für die momentane Konfiguration $\{\mathbf{e_R}(t)\}$ einzuführen. Dies wird hier durch Lösung der Kohn-Sham-Gleichungen der elektronischen Dichte-Funktional-Theorie mit den Nebenbedingungen der vorgeschriebenen Richtungen $\mathbf{e_R}$ gemacht. Gleichermaßen werden adiabatische Fermi-Dirac-Besetzungszahlen $f_i(\varepsilon_i(\{\mathbf{e_R}(t)\}))$ und eine adiabatische Fermioberfläche $S(\{\mathbf{e_R}(t)\})$ definiert, die besetzte von nicht besetzten Zuständen für die momentane Konfiguration $\{\mathbf{e_R}(t)\}$ trennt.

Mit der zeitlichen Änderung der Konfiguration $\{\mathbf{e_R}(t)\}$ der atomaren magnetischen Momente während der Dynamik nimmt im Allgemeinen die adiabatische Fermifläche $S(\{\mathbf{e_R}(t)\})$ zu jedem Zeitpunkt t eine veränderte Gestalt an, was als Fermiflächenatmung bezeichnet wird (breathing Fermi surface). Ursache der Fermiflächenatmung ist die Abhängigkeit der Einelektronenenergien $\varepsilon_i(\{\mathbf{e_R}(t)\})$ von der Konfiguration, was eine Konfigurationsabhängigkeit der Besetzungszahlen $f_i(\varepsilon_i(\{\mathbf{e_R}(t)\}))$ von Zuständen nahe der Fermifläche zur Folge hat. Um nun zu jedem Zeitpunkt t eine Besetzung der Einelektronenzustände gemäß den adiabatischen Fermi-Dirac-Besetzungszahlen $f_i(\varepsilon_i(\{\mathbf{e_R}(t)\}))$ zu gewährleisten, müssen durch Elektronenstreuprozesse Umbesetzungen der Einelektronenzustände stattfinden, die im Vergleich zur Dynamik der Konfiguration $\{\mathbf{e_R}(t)\}$ unendlich schnell sind.

In kollinearen Systemen, in denen alle atomaren magnetischen Momente parallel zueinander stehen ($\mathbf{e_R}(t) = \mathbf{e}(t)$), hängen die Energien $\varepsilon_i(\mathbf{e}(t))$ der Einelektronenzustände und damit die Fermifläche $S(\mathbf{e}(t))$ aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung von der Richtung $\mathbf{e}(t)$ der Magnetisierung im Kristall ab. In nichtkollinearen Systemen hängen die Einelektronenenergien zusätzlich aufgrund der interatomaren Austauschwechselwirkung von der Konfiguration $\{\mathbf{e_R}(t)\}$ ab. Ursache dieser Wechselwirkung ist in der elektronischen Dichte-Funktional-Theorie die Abhängigkeit der kinetischen

magnetischen Bahnmoments bedeutet und andererseits wird das Symbol $\mathbf{M_R}$ auch für das atomare Spinmoment verwendet, das sich nur um den konstanten Faktor $-\mu_\mathrm{B}$ vom magnetischen Spinmoment unterscheidet.

Energie des Elektronensystems von $\{\mathbf{e_R}(t)\}$. Da diese kinetischen Wechselwirkungen im Allgemeinen sehr viel stärker sind als die Spin-Bahn-Wechselwirkung, sind in Systemen mit zeitabhängiger Nichtkollinearität sehr viel größere Änderungen der Fermifläche zu erwarten als in kollinearen Konfigurationen.

Um eine Situation weg vom adiabatischen Limit zu modellieren, in der das Elektronensystem also nicht zu jedem Zeitpunkt t den Grundzustand bezüglich der momentanen Konfiguration $\{\mathbf{e_R}(t)\}$ der atomaren magnetischen Momente einnimmt, geht das Breathing-Fermi-Surface-Modell den folgenden Weg: Die adiabatischen Einelektronenenergien $\varepsilon_i(\{\mathbf{e_R}(t)\})$ werden beibehalten, während die adiabatischen Fermi-Dirac-Besetzungszahlen durch nichtadiabatische Besetzungszahlen $n_i(t)$ ersetzt werden. Dieses Vorgehen spiegelt die Tatsache wider, dass aufgrund der sich verändernden Fermifläche Umbesetzungen der Einelektronenzustände durch Elektronenstreuprozesse auftreten. Diese sind im adiabatischen Limit unendlich häufig und schnell, benötigen aber in der hier zu behandelnden nichtadiabatischen Situation eine endliche Zeit. Die nichtadiabatischen Besetzungszahlen $n_i(t)$ hinken also den adiabatischen Besetzungszahlen $f_i(\varepsilon_i(\{\mathbf{e_R}(t)\}))$ hinterher. Dieses Nachhinken wird durch den folgenden Relaxationszeitansatz mit den Relaxationszeiten τ_i beschrieben:

$$\frac{\mathrm{d}n_i(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\tau_i}\left[n_i(t) - f_i(\varepsilon_i(\{\mathbf{e_R}(t)\}))\right] . \tag{3.7}$$

Im Folgenden wird die Näherung $\tau_i = \tau$ verwendet, d.h. es wird angenommen, dass die Besetzungszahlen aller Zustände mit derselben Relaxationszeit τ relaxieren. Das Breathing-Fermi-Surface-Modell beschreibt nicht die Physik der Streuprozesse, durch die das Elektronensystem aus einer nichtadiabatischen Nichtgleichgewichtsbesetzung in die adiabatische Gleichgewichtsbesetzung relaxiert. Verschiedene Streumechanismen (Elektron-Phonon Streuung, Streuung an Defekten, ...) werden alle durch die phänomenologische Relaxationszeit τ beschrieben.

In einer nichtadiabatischen Situation nahe des adiabatischen Limits, in der die Dynamik der atomaren magnetischen Momente langsam im Vergleich zu der Relaxationszeit τ ist, kann man die Lösung der Gleichung (3.7) näherungsweise [34, 35] durch

$$n_i(t) = f_i(t) - \tau\frac{\mathrm{d}f_i(t)}{\mathrm{d}t} + \ldots \tag{3.8}$$

beschreiben.

Das formale Vorgehen des Breathing-Fermi-Surface-Modells, adiabatische Fermi-Dirac-Besetzungszahlen von Einelektronenzuständen durch nichtadiabatische nachhinkende Besetzungszahlen zu ersetzen, entspricht dem physikalischen Prozess der Bildung von Elektron-Loch-Paaren. Dieses physikalische Bild soll im folgenden Absatz kurz verdeutlicht werden.

Begonnen wird wieder in der streng adiabatischen Situation mit adiabatischen Fermi-Dirac-Besetzungszahlen $f_i(\varepsilon_i(\{\mathbf{e_R}(t)\}))$. Durchläuft die Konfiguration $\{\mathbf{e_R}(t)\}$ eine Dynamik, bei der die Fermifläche atmet, so werden die Energien einiger Elektronenzustände, deren Energien zum Zeitpunkt $t - \mathrm{d}t$ noch unterhalb der Fermienergie lagen, zum Zeitpunkt t über die Fermienergie geschoben. Und umgekehrt werden Zustände, die zur Zeit $t - \mathrm{d}t$ über der Fermienergie lagen, zum Zeitpunkt t unter die Fermienergie geschoben. Ersetzt man nun die adiabatischen Besetzungszahlen durch nichtadiabatische, die den adiabatischen Fermi-Dirac-Besetzungszahlen aufgrund der endlichen Relaxationszeit τ nachhinken, tritt folgende Situation ein: Ein Zustand der im adiabatischen Limit zum Zeitpunkt $t - \mathrm{d}t$ besetzt war und im adiabatischen Limit zum Zeitpunkt t unbesetzt wäre, kann nun besetzt sein und repräsentiert ein angeregtes Elektron bezüglich der adiabatischen Fermifläche zum Zeitpunkt t. Ein Loch bezüglich der Fermifläche zum Zeitpunkt t wird durch einen Zustand repräsentiert, der zum Zeitpunkt $t - \mathrm{d}t$ unbesetzt war, dies zum Zeitpunkt t immer noch ist, aber im adiabatischen Limit zum Zeitpunkt t besetzt wäre.

3.3.2 Die Bewegungsgleichung des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells

Im vorigen Abschnitt wurde die Grundidee dargestellt, wie das Breathing-Fermi-Surface-Modell den Übergang aus einer adiabatischen Situation in eine nichtadiabatische modelliert. Wie oben beschrieben, werden dabei adiabatische Fermi-Dirac-Besetzungszahlen durch nichtadiabatische nachhinkende Besetzungszahlen ersetzt. Im Folgenden soll nun gezeigt werden, wie mit diesem Vorgehen der Übergang von einer adiabatischen Bewegungsgleichung ohne Dämpfung zu einer nichtadiabatischen Bewegungsgleichung mit Dämpfung möglich ist.

In [35] (und der darin zitierten Literatur) wird auf der Basis quantenmechanischer Argumente die folgende adiabatische Bewegungsgleichung für

die Richtungen $\mathbf{e_R}$ der atomaren magnetischen Momente abgeleitet:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{e_R}}{\mathrm{d}t} = -\frac{2\mu_\mathrm{B}}{\hbar}\frac{1}{M_\mathbf{R}}\frac{\partial E}{\partial \mathbf{e_R}} \times \mathbf{e_R} = -\gamma \mathbf{e_R} \times \mathbf{H}_{\mathrm{eff},\mathbf{R}}\,. \tag{3.9}$$

Dabei ist E die gesamte Energie des Elektronensystems und $\gamma = -2\mu_\mathrm{B}/\hbar$. Gleichung (3.9) besitzt die Form einer Gilbertgleichung ohne Dämpfungsterm und beschreibt eine ungedämpfte Präzession des atomaren magnetischen Moments um das effektive Feld $\mathbf{H}_{\mathrm{eff},\mathbf{R}}$ am Ort $\mathbf{R}$:

$$\mathbf{H}_{\mathrm{eff},\mathbf{R}} = \frac{1}{M_\mathbf{R}}\frac{\partial E}{\partial \mathbf{e_R}}\,. \tag{3.10}$$

Folgende Energiebeiträge hängen im Allgemeinen von den Richtungen $\mathbf{e_R}$ ab: Magnetokristalline Anisotropieenergie, Austauschenergie, Dipolenergie und die Wechselwirkungsenergie mit einem externen Feld. Dipoleffekte werden im Folgenden vernachlässigt. Damit setzt sich $\mathbf{H}_{\mathrm{eff},\mathbf{R}}$ hier im Allgemeinen aus magnetokristallinem Anisotropiefeld, Austauschfeld und externem Feld zusammen.

Damit aus der adiabatischen Bewegungsgleichung (3.9) eine nichtadiabatische Bewegungsgleichung mithilfe des Breathing-Fermi-Surface-Modells abgeleitet werden kann, ist die bereits in Abschnitt 2.5.2 vorgestellte Form der Energieableitung $\partial E/\partial \mathbf{e_R}$ und damit des effektiven Feldes notwendig. In Gleichung (2.70) ist die Ableitung $\partial E/\partial \mathbf{e_R}$ der gesamten Energie nach der Richtung $\mathbf{e_R}$ durch die Ableitung der Bandenergie dargestellt und enthält zwei Terme. Der Vollständigkeit halber sei dies hier wiederholt:

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{e_R}} = \sum_i f_i \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \mathbf{e_R}} + \sum_i \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{e_R}} \varepsilon_i\,. \tag{3.11}$$

Der erste Term enthält den Beitrag, der durch die Abhängigkeit der Einelektronenenergien ε_i von $\mathbf{e_R}$ entsteht. Der zweite Term entsteht durch die Abhängigkeit der Besetzungszahlen von $\mathbf{e_R}$. Wie bereits in Abschnitt 2.5.2 erläutert, verschwindet dieser zweite Term unter folgenden Voraussetzungen: 1. Die Besetzungszahlen f_i ändern sich aufgrund von Richtungsänderungen der $\mathbf{e_R}$ nur bei Zuständen nahe der Fermienergie ε_F und 2. Teilchenzahlerhaltung.

Im Folgenden wird bei der Ableitung des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells dieser zweite Term vernachlässigt. In Abschnitt 3.4.4

und in [28] wird für kollineare Konfigurationen erläutert, dass der hier im Breathing-Fermi-Surface-Modell behandelte erste Term im effektiven Feld auf Intrabandterme des Torque-Correlation-Modells führt und den *breathing Fermi surface* Beitrag bei der Magnetisierungsdämpfung durch Elektron-Loch-Paarbildung beschreibt. Es wird dort außerdem gezeigt, dass durch den im Breathing-Fermi-Surface-Modell nicht behandelten zweiten Term, bei Lebensdauer verbreiterten Einelektronenenergien und einer periodischen Störung (verursacht durch die Dynamik selbst), der *bubbling Fermi surface* Beitrag beschrieben und auf die Interbandterme des Torque-Correlation-Modells abgebildet werden kann.

Verwendet man in Gleichung (3.8) die Kettenregel

$$\frac{\mathrm{d}f_i}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f_i}{\partial \varepsilon_i} \sum_{\mathbf{R}} \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \mathbf{e}_{\mathbf{R}}} \frac{\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}}}{\mathrm{d}t} \,, \tag{3.12}$$

setzt die nichtadiabatischen Besetzungszahlen n_i für die adiabatischen f_i im ersten Term von (3.11) ein und diesen in die Bewegungsgleichung (3.9), so ergibt sich die folgende Bewegungsgleichung:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}}}{\mathrm{d}t} = -\gamma \mathbf{e}_{\mathbf{R}} \times \mathbf{H}_{\mathrm{eff},\mathbf{R}}(\{\mathbf{e}_{\mathbf{R}''}\}) + \mathbf{e}_{\mathbf{R}} \times \sum_{\mathbf{R}'} \mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\{\mathbf{e}_{\mathbf{R}''}\}) \cdot \frac{\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}}{\mathrm{d}t} \tag{3.13}$$

mit dem effektiven Feld

$$\mathbf{H}_{\mathrm{eff},\mathbf{R}} = \frac{1}{M_{\mathbf{R}}} \sum_i f_i \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \mathbf{e}_{\mathbf{R}}} \tag{3.14}$$

und der Dämpfungsmatrix

$$\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} = -\frac{\gamma\tau}{M_{\mathbf{R}}} \sum_i \frac{\partial f_i}{\partial \varepsilon_i} \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \mathbf{e}_{\mathbf{R}}} \otimes \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \mathbf{e}_{\mathbf{R}'}} \,. \tag{3.15}$$

Gleichung (3.13) ist die im Rahmen des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells abgeleitete Bewegungsgleichung für die Richtungen $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ der atomaren magnetischen Momente. Wie die Gilbertgleichung (3.1) besteht sie aus einem Präzessionsterm, der die Präzession um das effektive Feld $\mathbf{H}_{\mathrm{eff},\mathbf{R}}$ beschreibt und einem Term proportional zur Zeitableitung $\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}}/\mathrm{d}t$ der Momentenrichtung, der in der Gilbertgleichung die Dämpfung verursacht.

3.3.3 Verallgemeinerungen gegenüber der Gilbertgleichung

Die skalare Dämpfungskonstante α, die in der Gilbertgleichung (3.1) den lokalen Dämpfungsterm beschreibt, ist in Gleichung (3.13) durch die im Allgemeinen nichtlokale Dämpfungsmatrix $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ ersetzt. Nichtlokal heißt, dass der Dämpfungsterm am Ort $\mathbf{R}$ von der Dynamik $\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}/\mathrm{d}t$ an anderen Orten $\mathbf{R}'$ abhängt.

Diese beiden Unterschiede gegenüber der Gilbertgleichung (3.1), die Matrixform des Dämpfungsparameters und die Nichtlokalität, entsprechen den bereits von Gilbert phänomenologisch angeregten Verallgemeinerungen, die in Abschnitt 3.2 dargestellt wurden. Gleichung (3.13) besitzt die von Gilbert vorgeschlagene Gestalt der verallgemeinerten Bewegungsgleichung (3.6). Eine über Gilberts Vorschläge hinaus gehende Verallgemeinerung ist die Konfigurationsabhängigkeit der Dämpfungsmatrix $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\{\mathbf{e}_{\mathbf{R}}\})$. Während in Gilberts Theorie nur das effektive Feld über Anisotropiefeld und Austauschfeld von der Magnetisierungskonfiguration abhängt, gilt dies aufgrund der Konfigurationsabhängigheit der Einelektronenenergien $\varepsilon_i(\{\mathbf{e}_{\mathbf{R}}\})$ auch für $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$.

Die Bewegungsgleichung (3.13) lässt sich zu jedem Zeitpunkt in eine Gilbertgleichung mit skalarem Dämpfungsparameter umschreiben, wobei dieser dann von der momentanen Konfiguration und der momentanen Dynamik abhängig ist. Um dies einzusehen, sind die folgenden Überlegungen notwendig. Da $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ ein Einheitsvektor ist, besitzt $\partial\varepsilon_i/\partial\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ keine Komponente parallel zu $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ und ebenso gilt $\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}}/\mathrm{d}t \perp \mathbf{e}_{\mathbf{R}}$. Für die Dämpfungsmatrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ gilt:

$$\frac{\partial\varepsilon_i}{\partial\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{R}'} = \mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{R}'} = 0 \tag{3.16}$$

und

$$(\mathbf{e}_{\mathbf{R}})^T \cdot \mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} = 0\,. \tag{3.17}$$

$\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ besitzt also den Eigenwert 0 zum Eigenvektor $\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}$. Die Vektoren $\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}}/\mathrm{d}t$, $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ und $\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}}/\mathrm{d}t \times \mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ bilden ein Dreibein. Wegen (3.17) besitzt der Vektor $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \cdot \mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}/\mathrm{d}t$ der im dämpfenden Feld am Ort $\mathbf{R}$ in (3.13) auftritt keine Komonente parallel zu $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$. Damit kann $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \cdot \mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}/\mathrm{d}t$ in

Komponenten parallel zu $\mathrm{d}\mathbf{e_R}/\mathrm{d}t$ und $\mathrm{d}\mathbf{e_R}/\mathrm{d}t \times \mathbf{e_R}$ zerlegt werden:

$$\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \cdot \frac{\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}}{\mathrm{d}t} = A^{\parallel}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \frac{\mathrm{d}\mathbf{e_R}}{\mathrm{d}t} + A^{\perp}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \left(\frac{\mathrm{d}\mathbf{e_R}}{\mathrm{d}t} \times \mathbf{e_R} \right) , \tag{3.18}$$

wobei $A^{\parallel}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ und $A^{\perp}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ die jeweiligen Projektionen darstellen:

$$A^{\parallel}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} = \left(\frac{\mathrm{d}\mathbf{e_R}}{\mathrm{d}t} \right)^T \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \cdot \frac{\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}}{\mathrm{d}t} , \tag{3.19}$$

$$A^{\perp}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} = \left(\frac{\mathrm{d}\mathbf{e_R}}{\mathrm{d}t} \times \mathbf{e_R} \right)^T \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \cdot \frac{\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}}{\mathrm{d}t} . \tag{3.20}$$

Setzt man (3.18) in die Bewegungsgleichung (3.13) ein und verwendet $\mathbf{e_R} \times (\mathrm{d}\mathbf{e_R}/\mathrm{d}t \times \mathbf{e_R}) = \mathrm{d}\mathbf{e_R}/\mathrm{d}t$, so ergibt sich:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{e_R}}{\mathrm{d}t} = \frac{-\gamma}{1 - \sum_{\mathbf{R}'} A^{\perp}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}} \mathbf{e_R} \times \mathbf{H}_{\mathrm{eff},\mathbf{R}} + \mathbf{e_R} \times \frac{\sum_{\mathbf{R}'} A^{\parallel}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}}{1 - \sum_{\mathbf{R}'} A^{\perp}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}} \frac{\mathrm{d}\mathbf{e_R}}{\mathrm{d}t} . \tag{3.21}$$

Gleichung (3.21) ist eine momentane Gilbertgleichung, in der der Dämpfungsskalar und das momentane gyromagnetische Verhältnis von der momentanen Konfiguration und der momentanen Dynamik abhängt. Die Komponenten $A^{\parallel}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ des dämpfenden Feldes parallel zu $\mathrm{d}\mathbf{e_R}/\mathrm{d}t$ tragen zur momentanen Dämpfung bei. Die Komponenten $A^{\perp}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ parallel zu $\mathrm{d}\mathbf{e_R}/\mathrm{d}t \times \mathbf{e_R}$ führen zu einem renormierten gyromagnetischen Verhältnis und zu einem renormierten Dämpfungsskalar. Da das Vorzeichen der Größen $\sum_{\mathbf{R}'} A^{\perp}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ und $\sum_{\mathbf{R}'} A^{\parallel}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ für eine allgemeine Konfiguration und Dynamik nicht festgelegt ist, kann die Präzessionsfrequenz lokal beschleunigt oder verlangsamt werden. Ebenso kann die Amplitude einer lokalen Präzession vergrößert und verkleinert (was dem allgemeinen Verständnis von gedämpft entspricht) werden. Im Folgenden werden alle Effekte als Dämpfungseffekte bezeichnet, die durch das geschwindigkeitsabhängige Feld in (3.13), das die Matrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ enthält, hervorgerufen werden.

3.3.4 Kollineare und nichtkollineare Systeme

In kollinearen Systemen mit einer kollinearen Dynamik zeigen alle atomaren magnetischen Momente zu jedem Zeitpunkt in dieselbe Richtung,

d.h. $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}(t) = \mathbf{e}(t)$ und $\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}}/\mathrm{d}t = \mathrm{d}\mathbf{e}/\mathrm{d}t$. Haben alle atomaren magnetischen Momente denselben Betrag $M_{\mathbf{R}} = M$, vereinfachen sich die allgemeine Bewegungsgleichung (3.13) und die Dämpfungsmatrix (3.15) zu [16, 34]

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{e}}{\mathrm{d}t} = -\gamma \mathbf{e} \times \mathbf{H}_{\mathrm{eff}}(\mathbf{e}) + \mathbf{e} \times \mathbf{A}(\mathbf{e}) \cdot \frac{\mathrm{d}\mathbf{e}}{\mathrm{d}t} \tag{3.22}$$

und

$$\mathbf{A}(\mathbf{e}) = -\frac{\gamma\tau}{M} \sum_i \frac{\partial f_i}{\partial \varepsilon_i} \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \mathbf{e}} \otimes \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \mathbf{e}} \,. \tag{3.23}$$

Die Bewegungsgleichung (3.22) ist nun lokal. $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ ist eine symmetrische 3×3-Matrix. Da $\mathbf{e}$ ein Einheitsvektor ist, verschwindet die Komponente von $\partial\varepsilon_i/\partial\mathbf{e}$ parallel zu $\mathbf{e}$ und damit auch der Eigenwert der Matrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ der zum Eigenvektor parallel zu $\mathbf{e}$ gehört. Die Matrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ hat also zwei nicht verschwindende Eigenwerte $A_p(\mathbf{e})$ [3] mit $(p = 1, 2)$. Die beiden Eigenwerte beschreiben jeweils die momentane Dämpfung, die auftritt wenn $\mathrm{d}\mathbf{e}/\mathrm{d}t$ parallel zum zugehörigen Eigenvektor ist. Damit sind in der Bewegungsgleichung (3.22) zwei Arten von anisotroper Dämpfung enthalten. Einerseits hängen die Eigenwerte $A_p(\mathbf{e})$ der Dämpfungsmatrix, aufgrund der magnetokristallinen Anisotropie von der Orientierung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall ab. Dies wird in Anlehnung an [36] als *orientational* Anisotropie bezeichnet. Außerdem hängt die momentane Dämpfung aufgrund des Matrixcharakters von $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ von der momentanen Richtung $\mathrm{d}\mathbf{e}/\mathrm{d}t$ der Dynamik ab, was als *rotational* Anisotropie bezeichnet wird. Liegt $\mathbf{e}$ in einer hochsymmetrischen Richtung des Kristalls, sind beide Eigenwerte identisch $(A_1(\mathbf{e}) = A_2(\mathbf{e}) = A(\mathbf{e}))$ [34] und die Bewegungsgleichung (3.22) hat die Gestalt eine Gilbertgleichung mit Dämpfungsskalar $A(\mathbf{e})$. (Weitere Details zu Anisotropien, deren Bedeutung in der Bewegungsgleichung kollinearer Systeme und numerische Ergebnisse folgen in den Abschnitten 4, 5, 6.1 und 7.2.) Auch Gleichung (3.22) kann in eine momentane Gilbertgleichung umgeformt werden, in der der momentane Dämpfungsskalar von $\mathrm{d}\mathbf{e}/\mathrm{d}t$ und $\mathbf{e}$ abhängt. Diese ist in [34] (Gleichung (48)) angegeben und Gleichung (3.21) geht für eine kollineare Konfiguration in diese Gleichung über.

[3] Die Abhängigkeit der Eigenwerte $A_p(\mathbf{e})$ von der Richtung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall wird in Kapitel 6.1 und 7.2 und in [16, 34] numerisch untersucht.

Wie bereits erwähnt, ist die magnetokristalline Anisotropie die Ursache für die Abhängigkeit der Einelektronenenergien ε_i von der Richtung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall, und die Ableitungen $\partial\varepsilon_i/\partial\mathbf{e}$ sind damit von der Spin-Bahn-Kopplung bestimmt.

In nichtkollinearen Systemen hängen die Energien der Einelektronenzustände zusätzlich aufgrund der Austauschwechselwirkung von den Richtungen $\mathbf{e}_\mathbf{R}$ der atomaren magnetischen Momente ab. Da die Austauschwechselwirkung sehr viel stärker ist als die Spin-Bahn-Wechselwirkung, sind die Ableitungen $\partial\varepsilon_i/\partial\mathbf{e}_\mathbf{R}$ in nichtkollinearen Konfigurationen betragsmäßig sehr viel größer als die Ableitungen $\partial\varepsilon_i/\partial\mathbf{e}$ in kollinearen Systemen. Für die Dämpfungsmatrix (3.15) sind damit in allgemeinen nichtkollinearen Systemen sehr viel größere Werte zu erwarten als für die Dämpfungsmatrix (3.23) in kollinearen Konfigurationen[4].

An dieser Stelle muss darauf hingewiesen werden, dass sehr große Werte für die Dämpfungsmatrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ in nichtkollinearen Konfigurationen nicht unbedingt große Effekte in der Bewegungsgleichung (3.13) verursachen. Der Dämpfungsterm am Ort $\mathbf{R}$ ergibt sich aus einer Summe über alle Orte $\mathbf{R}'$ und hängt damit nicht nur von allen Matrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ ab, sondern auch von der Dynamik $\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}/\mathrm{d}t$ an den Orten $\mathbf{R}'$. Dabei können sich verschiedene Beiträge teilweise und in hochsymmetrischen Konfigurationen mit hochsymmetrischer Dynamik sogar vollständig auslöschen. Solche hochsymmetrischen Systeme werden in Kapitel 6.2.1 nochmals genauer auch mit numerischen Rechnungen betrachtet.

Periodische Systeme

Um kristalline Volumenmaterialien, die gemessen an atomaren Längenskalen nahezu unendlich groß sind, mit erträglichem numerischem Aufwand zu untersuchen, werden in der Festkörpertheorie statt sehr großer endlicher Systeme periodische „unendliche“ Systeme untersucht. Zahlreiche Eigenschaften der elektronischen Struktur von kristallinen Volumenmaterialien werden durch dieses Vorgehen hervorragend beschrieben. [5]

Das periodische Kristallgitter entsteht aus einer Einheitszelle durch Ver-

[4] Unter der Annahme, dass τ für kollineare und nichtkollineare Systeme dieselbe Größenordung besitzt, werden dies numerische Ergebnisse in Kapitel 6.2 bestätigen.

[5] Alle numerischen Ergebnisse, sowohl für kollineare als auch für nichtkollineare Systeme in Kapitel 5, 6 und 7.2 wurden durch Rechnungen erzielt, die periodische Systeme beschreiben.

schiebung um die Vektoren $\mathbf{T} \in \{\sum_{i=1}^{3} a_i \mathbf{T}_i | a_i \in \mathbb{Z}\}$, wobei die $\mathbf{T}_i$ Translationsvektoren genannt werden. Die Wahl der Einheitszelle und der zugehörigen Translationsvektoren um ein bestimmtes Gitter zu erzeugen ist nicht eindeutig. Die kleinste Einheitszelle, mit der ein bestimmtes Gitter erzeugt werden kann, wird primitive Einheitszelle genannt. Um nichtkollineare magnetische Konfigurationen zu untersuchen, werden in der vorliegenden Arbeit Superzellen als Einheitszellen verwendet.

Befinden sich in der Einheitszelle an den Orten $\mathbf{R}$ atomare magnetische Momente, so entsteht durch das periodische Fortsetzen der Einheitszelle ein Gitter mit atomaren magnetischen Momenten an den Orten $\mathbf{R} + \mathbf{T}$. Außerdem gilt $\mathbf{e}_{\mathbf{R}} = \mathbf{e}_{\mathbf{R}+\mathbf{T}}$, $M_{\mathbf{R}} = M_{\mathbf{R}+\mathbf{T}}$ und damit die Periodizität während der Dynamik erhalten bleibt $\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}}/\mathrm{d}t = \mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}+\mathbf{T}}/\mathrm{d}t$. Möchte man eine beliebige magnetische Konfiguration mit einer beliebigen Dynamik untersuchen, so muss sich diese innerhalb der Einheitszelle befinden. Sie findet dann innerhalb der periodisch angeordneten Superzellen in periodischen Abständen im gesamten Kristall statt. Die Annahme, dass die Eigenschaften einer realen nichtperiodischen Konfiguration und Dynamik dadurch gut beschrieben werden, indem man sie in eine Superzelle einbettet, die dann periodisch fortgesetzt wird, ist sicher nicht für alle Konfigurationen gleich gut. Unter erhöhtem numerischem Aufwand können periodische Rechnungen realistischer werden, indem man sehr große Superzellen verwendet, damit der räumliche Abstand zwischen den zu untersuchenden periodisch angeordneten Konfigurationen vergrößert wird.

In periodischen Systemen läuft die Summe in der Kettenregel (3.12) und damit in der Bewegungsgleichung (3.13) über alle Atomorte $\mathbf{R}$ innerhalb der verwendeten Einheitszelle, da die Richtungen $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ nur innerhalb der Einheitszelle unabhängig variiert werden können.

Magnetisch kollineare Systeme, in denen die atomaren magnetischen Momente auf einem regelmäßigen Kristallgitter angeordnet sind, eignen sich besonders für die Beschreibung durch ein periodisches Gitter, das durch das periodische Fortsetzen einer Einheitszelle entsteht. Die kollineare Konfiguration und Dynamik kann im Allgemeinen durch eine Superzelle mit N atomaren magnetischen Momenten an den Orten $\mathbf{R}$ beschrieben werden. Die Richtungen aller atomaren Momente in der Superzelle stimmen zu jedem Zeitpunkt überein, d.h. $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}(t) = \mathbf{e}(t)$ und $\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}}/\mathrm{d}t = \mathrm{d}\mathbf{e}/\mathrm{d}t$. Es kann dann ein magnetisches Moment $\mathbf{M}_{\Omega}$ der Superzelle als Summe

über alle atomaren magnetischen Momente definiert werden,

$$\mathbf{M}_\Omega = \sum_{\mathbf{R}} M_{\mathbf{R}} \mathbf{e}_{\mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{R}} M_{\mathbf{R}} \mathbf{e} = M_\Omega \mathbf{e}\,, \tag{3.24}$$

mit der Richtung $\mathbf{e}$ und dem Betrag $M_\Omega = \sum_{\mathbf{R}} M_{\mathbf{R}}$.

Die gesamte Dynamik kann dann einerseits durch die Dynamik dieses magnetischen Moments der gesamten Superzelle beschrieben werden. Gleichung (3.22) ist dann die Bewegungsgleichung für die Richtung $\mathbf{e}$ des Zellenmomentes und M in Gleichung (3.23) ist der Betrag M_Ω des gesamten Moments der Superzelle.

Alternativ kann die Dynamik auch durch die Bewegungsgleichung (3.13) für die einzelnen atomaren magnetischen Momente in der Superzelle beschrieben werden unter der Nebenbedingung $\mathbf{e}_{\mathbf{R}'} = \mathbf{e}_{\mathbf{R}} \,\forall\, \mathbf{R}'$ und $\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}/\mathrm{d}t = \mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}}/\mathrm{d}t \,\forall\, \mathbf{R}'$.

Durch Vergleich der beiden Bewegungsgleichungen, die die gleiche kollineare Dynamik durch eine Superzelle mit N atomaren Momenten beschreiben, erhält man die Beziehung

$$\mathsf{A}(\mathbf{e}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\mathbf{e})\,, \tag{3.25}$$

zwischen den atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\mathbf{e})$ und der Dämpfungsmatrix $\mathsf{A}(\mathbf{e})$ für das magnetische Moment der Superzelle. Die Doppelsumme über $\mathbf{R}$ und $\mathbf{R}'$ läuft dabei über alle Atomorte innerhalb der Superzelle. In [16] und Kapitel 6.1 werden die atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ erstmals numerisch in verschiedenen kollinearen Systemen berechnet und deren lokale ($\mathbf{R}' = \mathbf{R}$) und nichtlokale ($\mathbf{R}' \neq \mathbf{R}$) Beiträge zur Dämpfungsmatrix $\mathsf{A}(\mathbf{e})$ des Zellmomentes untersucht.

Kann man das Kristallgitter durch eine einatomige primitive Einheitszelle aufbauen, so kann die kollineare Konfiguration und kollineare Dynamik durch diese primitive Einheitszelle beschrieben werden. In diesem Fall ist das atomare magnetische Moment identisch mit dem Zellmoment und die Bewegungsgleichungen für atomares Moment und Zellmoment stimmen ebenfalls überein.

3.3.5 Bemerkungen zur Relaxationszeit τ – Anregung von Elektron-Loch-Paaren als treibende Kraft

Die Dämpfungsmatrix (3.15) setzt sich aus zwei Faktoren zusammen, der Relaxationszeit τ und dem elektronischen Anteil $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}/\tau$, der Energieableitungen der Besetzungszahlen und Richtungsableitungen der Einelektronenenergien enthält. Während der elektronische Anteil im Rahmen der Ab-initio-Elektronentheorie für verschiedene Materialien, Systeme und Konfigurationen berechnet[6] werden kann, ist die Relaxationszeit τ eine phänomenologisch eingeführte Größe. Um experimentelle Ergebnisse für Dämpfungsparameter mit Ergebnissen des Breathing-Fermi-Surface-Modells quantitativ vergleichen zu können, müssen für τ konkrete Werte eingesetzt werden. In [37] wurden Ergebnisse des Breathing-Fermi-Surface-Modells quantitativ mit experimentellen Ergebnissen verglichen und Übereinstimmung innerhalb einer Größenordnung gefunden. Für τ wurden dabei typische Elektronenrelaxationszeiten aus Leitfähigkeitsmessungen verwendet.

Es liegt nahe, die Größe τ aus Leitfähigkeitsmessungen zu gewinnen, da die Theorie der Drude-Leitfähigkeit und das Breathing-Fermi-Surface-Modell einige theoretische konzeptionelle Gemeinsamkeiten besitzen. In beiden Theorien entstehen Elektron-Loch-Paare[7] durch eine Veränderung der Fermifläche. Bei der Drude-Leitfähigkeit wird die Fermikugel aufgrund eines angelegten elektrischen Feldes verschoben, im Breathing-Fermi-Surface-Modell deformiert sich die Fermifläche aufgrund der Dynamik der magnetischen Momente. Die Relaxation der Elektron-Loch-Paare, die durch die veränderte Fermifläche entstanden sind, wird in beiden Theorien durch einen Relaxationszeitansatz für die Besetzungszahlen von Einelektronenzuständen beschrieben. Die Relaxationszeiten in der Drude-Theorie und im Breathing-Fermi-Surface-Modell stimmen also in dem Sinne überein, dass beide die Relaxation von Elektron-Loch-Paaren, entstanden durch eine veränderte Fermifläche, charakterisieren. Trotzdem sind beide Relaxationszeiten nicht notwendigerweise identisch, da die Veränderung der Fermifläche und dadurch die Entstehung der Elektron-Loch-Paare durch unterschiedliche physikalische Wechselwirkungen verursacht ist. Dies zeigt auch der folgende Gedankengang:

[6] Siehe Kapitel 6 und 7.2.

[7] Das physikalische Bild der Elektron-Loch-Paarbildung im Breathing-Fermi-Surface-Modell wird in Kapitel 3.4.3 für kollineare Konfigurationen nochmals detailliert beschrieben.

In einem nichtkollinearen System ohne Spin-Bahn-Kopplung ist der elektronische Anteil $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}/\tau$ der Dämpfungsmatrix im Allgemeinen von null verschieden, ebenso wie die Drude-Relaxationszeit. Allerdings muss in einem System ohne Spin-Bahn-Kopplung der Gesamtdrehimpuls des Spinsystems erhalten bleiben. Verwendet man also in diesem hypothetischen System ohne Spin-Bahn-Kopplung die Drude-Relaxationszeit, entstehen dadurch Widersprüche.

Auch in nichtkollinearen Konfigurationen, in denen der elektronische Anteil $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}/\tau$ der Dämpfungsmatrix von der Austauschwechselwirkung dominiert wird, ist die Spin-Bahn-Kopplung notwendig, um bei der Relaxation der Elektron-Loch-Paare durch Streuprozesse Drehimpuls an das Gitter abzuführen. Mit diesen Einsichten gelangt man zu folgendem Bild:

Aufgrund der Dynamik verändert sich die Fermifläche, und Elektron-Loch-Paare werden generiert. Die Dynamik wirkt also wie eine treibende Kraft, die Elektron-Loch-Paare anregt und in einem zweiten Schritt eine Relaxation dieser Elektron-Loch-Paare zur Folge hat. In Konfigurationen mit zeitabhängiger Nichtkollinearität ist die treibende Kraft, also die Veränderung der Fermifläche, durch die Austauschwechselwirkung dominiert. In kollinearen Systemen atmet die Fermifläche bei zeitabhängiger Richtung der Magnetisierung aufgrund der Spin-Bahn-Wechselwirkung. Hier ist also die treibende Kraft durch die Spin-Bahn-Kopplung bestimmt. In beiden Fällen muss jedoch bei der Relaxation durch Elektronenstreuung Drehimpuls abgeführt werden, und die Spin-Bahn-Kopplung ist daher in diesem zweiten Schritt unverzichtbar.

Die treibende Kraft, die Elektron-Loch-Paare generiert, wird im vorliegenden Modell durch den elektronischen Anteil $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}/\tau$ der Dämpfungsmatrix beschrieben, der im Rahmen der Elektronentheorie in Kapitel 6 und 7.2 für verschiedene Systeme berechnet wird.

Ein Vergleich des elektronischen Anteils zwischen kollinearen und nichtkollinearen Systemen wird zeigen, dass dieser in nichtkollinearen Konfigurationen im Allgemeinen sehr viel größer ist als in kollinearen Systemen, was auf die im Vergleich zur Spin-Bahn-Kopplung sehr viel stärkere Austauschwechselwirkung zurückzuführen ist. Wenn die Relaxationszeit τ in beiden Fällen von ähnlicher Größenordnung ist, gilt dieser Größenunterschied dann auch für die Dämpfungsmatrix selbst.

An dieser Stelle sei noch einmal deutlich gesagt, dass sich das Breathing-Fermi-Surface-Modell nicht mit der Beschreibung der Relaxationsprozesse beschäftigt, durch die der Drehimpulsübertrag vom Elektronensystem an

das Gitter stattfindet. All diese Relaxationsprozesse werden durch den phänomenologischen Parameter τ beschrieben, der in diesem Rahmen nicht berechnet wird. Im Gegensatz dazu untersuchen andere Theorien [38] explizit die Streuprozesse, durch die der Drehimpulsübertag bei der Relaxation von Elektron-Loch-Paaren stattfindet. Es kann dabei eine Spinflipwahrscheinlichkeit a_{el} berechnet werden, die angibt mit welcher Wahrscheinlichkeit bei einem Elektronenstreuprozess ein Spinflip stattfindet.

3.3.6 Reichweite der Nichtlokalität

Die Nichtlokalität entsteht in der hier behandelten Theorie dadurch, dass die Energien $\varepsilon_i(\{\mathbf{e_R}\})$ der Einelektronenzustände von den Richtungen $\{\mathbf{e_R}\}$ aller magnetischen Momente abhängen. Wie in [39] beschrieben, ist es nur sinnvoll, diese Eigenschaft auf einer Längenskala zu verwenden, auf der kohärente Einelektronenzustände existieren. Daher sind nur nichtlokale Dämpfungsmatrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ von Bedeutung, für die der Abstand der atomaren Momente $|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|$ kleiner als die mittlere freie Weglänge der Elektronen ist. Eine explizite Abstandsabhängigkeit der Nichtlokalität, die diese Tatsache berücksichtigt, ist in der bisherigen Theorie nicht enthalten. Eine Möglichkeit, die Theorie entsprechend zu modifizieren, ist die phänomenologische Einführung einer Abfallfunktion, die die Reichweite der Nichtlokalität auf die Länge der mittleren freien Weglänge begrenzt. Es können hier nur sehr pauschale Aussagen zur Form einer solchen phänomenologisch einzuführenden Abfallfunktion g getroffen werden. Die Funktion $g(x)$ mit $x = |\mathbf{R}-\mathbf{R}'|/L$ muss eine monoton fallende Funktion ihres Arguments x sein, wobei L die Kohärenzlänge der Einelektronenzustände beschreibt. L ist material- und temperaturabhängig. Die Dämpfungsmatrizen $\mathsf{A}^g_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ einer nichtlokalen Bewegungsgleichung, in der die Reichweite der Nichtlokalität durch die Funktion g beschränkt ist, haben dann die Form

$$\mathsf{A}^g_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} = g(x)\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}\,, \text{mit} \quad x = |\mathbf{R}-\mathbf{R}'|/L\,. \tag{3.26}$$

Im Folgenden können nur Untersuchungen zu den Dämpfungsmatrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ durchgeführt werden, da die genaue Form der Funktion $g(x)$ unbekannt ist.

In periodischen Systemen kann die Nichtlokalität per Definition nur innerhalb der Einheitszelle untersucht werden. Die in periodischen Systemen

verwendeten Einelektronenblochzustände sind über die gesamte Einheitszelle ausgebreitet, und deren Einelektronenenergien hängen von allen Richtungen $\mathbf{e_R}$ der atomaren magnetischen Momente in der Einheitszelle ab. Bei der Verwendung beliebig großer Superzellen wird die beliebige Reichweite der Nichtlokalität, vermittelt durch $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$, besonders deutlich.

Eine implizite, über die Konfiguration vermittelte Abstandsabhängigkeit der Nichtlokalität ist bereits in den Matrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ enthalten. Befindet sich z.B. am Ort $\mathbf{R}$ ein verkipptes magnetisches Moment in einer sonst ferromagnetischen Umgebung, so nehmen im Allgemeinen die Werte der Matrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ mit wachsendem Abstand $|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|$ ab. Dies liegt daran, dass die Ableitungen $\partial\varepsilon_i/\partial\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}$ für Momente $\mathbf{R}'$ in ferromagnetischer Umgebung im Allgemeinen kleiner sind als für Momente $\mathbf{R}'$ in einer nichtkollinearen Umgebung. Dies wird in Kapitel 6.2.2 an einer Beispielrechnung numerisch untersucht.

3.4 Dissipation durch Bildung von Elektron-Loch-Paaren

In Abschnitt 3.3.1 wurde dargestellt, dass im Breathing-Fermi-Surface-Modell der für die Magnetisierungsdämpfung verantwortliche physikalische Mechanismus die Anregung von Elektron-Loch-Paaren und deren anschließende Relaxation ist.

Der vorliegende Abschnitt beginnt mit der Vorstellung von zwei weiteren Modellen, die es erlauben, in kollinearen Konfigurationen Dämpfungsparameter zu berechnen. Auch sie beschreiben die Dämpfung als Folge der Anregung von Elektron-Loch-Paaren. In ihrer sehr formalen Ableitung ist dies jedoch nur sehr schwer zu verstehen.

Das Torque-Correlation-Modell berechnet den Gilbert-Dämpfungsskalar bei zirkularer Kleinwinkelpräzession. Seine Ableitung und das Ergebnis ist in 3.4.1 zusammen mit einer Betrachtung der Abhängigkeit von der Elektronenstreurate kurz skizziert. Der im Torque-Correlation-Modell berechnete Dämpfungsskalar beinhaltet sowohl einen Anteil, der sich bezüglich der Streurate *conductivity like* als auch einen Anteil, der sich *resistivity like*[8] verhält.

In 3.4.2 wird ein weiterer formaler Zugang vorgestellt, der es allerdings erlaubt, nicht nur einen skalaren Dämpfungsparameter zu berechnen, sondern eine Dämpfungsmatrix. Auch diese Dämpfungsmatrix enthält einen *conductivity like* und *resistivity like* Anteil, im Gegensatz zur Dämpfungsmatrix des Breathing-Fermi-Surface-Modells, die nur einen *conductivity like* Anteil besitzt.

Das physikalische Bild der Dissipation durch Spin-Bahn-Kopplung induzierte Bildung von Elektron-Loch-Paaren und anschließender Relaxation wird in 3.4.3 und in [36, 39] genau beschrieben. In Abschnitt 3.4.4 wird ein Ansatz von Gilmore et al. vorgestellt, der den physikalischen Prozess der Dämpfung durch Spin-Bahn-Kopplung induzierte Elektron-Loch-Paare in kollinearen Konfigurationen auf das formale Ergebnis des Torque-Correlation-Modells abbildet.

[8] Die Begriffe *conductivity like* und *resistivity like* werden in 3.4.1 definiert.

3.4.1 Torque-Correlation-Modell

Das Torque-Correlation-Modell wurde 1976 von Kamberský eingeführt [8]. Es ist möglich, mit diesem Modell die intrinsische Gilbert-Dämpfungskonstante α in Systemen mit kollinearer Magnetisierung zu berechnen.

Dabei wird zuerst folgender Zusammenhang zwischen α und der transversalen zirkularen Suszeptibilität $\chi^+(\omega)$ hergestellt:

$$\alpha = \lim_{\omega \to 0} \frac{\partial}{\partial \omega} \mathrm{Im}[\chi^+(\omega)]^{-1} \,. \tag{3.27}$$

Diesen Zusammenhang erhält man durch die hier geschilderte Vorgehensweise: Ausgangspunkt ist die herkömmliche Gilbertgleichung mit dem Dämpfungsskalar α. Mit dieser Bewegungsgleichung wird eine zirkulare Kleinwinkelpräzession um eine Gleichgewichtsrichtung oder um ein starkes konstantes externes Feld betrachtet, getrieben durch ein dazu senkrechtes zirkulares Feld der Frequenz ω. Löst man diese Bewegungsgleichung und stellt den Zusammenhang zwischen transversaler[9] Komponente der Magnetisierung und dem treibenden Feld her, so erhält man die transversale zirkulare Suszeptibilität $\chi^+(\omega)$. Extrahiert man aus dieser den Dämpfungsskalar α, ergibt sich (3.27).

Die transversale zirkulare Suszeptibilität $\chi^+(\omega)$ wird in [8] in RPA (random phase approximation) berechnet. Dabei werden mehrere Näherungen verwendet. In [8] wird angenommen, dass die Magnetisierung parallel zu einer hochsymmetrischen Richtung im Kristall liegt, die Dipolwechselwirkung wird vernachlässigt. Nur der Spin-Bahn-Kopplungs-Anteil des Hamiltonoperators vertauscht nicht mit dem Operator des gesamten Spinmoments.

Die endliche Lebensdauer von Einelektronenzuständen und damit von angeregten Elektron-Loch-Paaren wird durch eine Verbreiterung der scharfen Einelektronenenergien $\varepsilon_{j\mathbf{k}}$ in die Theorie eingebracht. Dabei ist j der Bandindex und $\mathbf{k}$ der Wellenvektor der Blochzustände $\psi_{j\mathbf{k}}$. Die Lebensdauerverbreiterung wird durch Einelektronenspektralfunktionen $A_{j\mathbf{k}}(\varepsilon)$ realisiert. Diese sind um die Bandenergien $\varepsilon_{j\mathbf{k}}$ zentrierte Lorentzfunktionen mit der Breite $\hbar/\tau$. τ ist dabei die phänomenologisch eingeführte Lebensdauer bzw. Streuzeit, durch die Elektronenstreuprozesse phänomenologisch beschrieben werden.

[9] senkrecht zum konstanten Feld bzw. zur Gleichgewichtsrichtung

Mit diesem Vorgehen und den genannten Näherungen ergibt sich für die Dämpfungskonstante:

$$\gamma M \alpha = \frac{g^2 \mu_{\mathrm{B}}^2}{\hbar} \sum_{nm} \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} |\Gamma_{nm}^{-}(\mathbf{k})|^2 W_{nm}(\mathbf{k}) \,, \tag{3.28}$$

mit dem spektralen Überlapp

$$W_{nm}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\pi} \int \mathrm{d}\omega_1 A_{n\mathbf{k}}(\omega_1) A_{m\mathbf{k}}(\omega_1) \eta(\omega_1) \,, \tag{3.29}$$

und der Energieableitung der Fermifunktion $\eta = -\mathrm{d}f/\mathrm{d}\varepsilon$. η ist eine positive Verteilungsfunktion zentriert um die Fermienergie. Sie begrenzt Streuprozesse auf den Bereich nahe der Fermifläche.

Das Matrixelement $\Gamma_{nm}^{-}(\mathbf{k})$ hat folgende Form:

$$\Gamma_{nm}^{-}(\mathbf{k}) = \left\langle \psi_{n\mathbf{k}} \middle| \left[\hat{\sigma}^{-}, \hat{H}_{\mathrm{SOC}} \right] \middle| \psi_{m\mathbf{k}} \right\rangle \,. \tag{3.30}$$

$\hat{\sigma}^{-}$ ist der Spin-Absteigeoperator $\hat{\sigma}^{-} = \hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y$ mit den Pauli-Matrizen $\hat{\sigma}_x$ und $\hat{\sigma}_y$, und $\hat{H}_{\mathrm{SOC}}$ ist der Spin-Bahn-Kopplungsoperator [22]

$$\hat{H}_{\mathrm{SOC}} = \sum_{\mathbf{R}} \xi_{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{l}}_{\mathbf{R}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \,, \tag{3.31}$$

mit dem Einteilchendrehimpulsoperator $\hat{\mathbf{l}}_{\mathbf{R}}$ bezüglich des Atomorts $\mathbf{R}$ und dem Kopplungsparameter ξ.

Kamberský leitet in [40] Gleichung (3.28), die im folgenden als „Torque-Correlation-Formel“ bezeichnet wird, nochmals auf eine alternative Weise ab. Dabei wird die Wechselwirkung zwischen der ferromagnetischen Mode und den Elektronen durch einen phänomenologischen effektiven Hamiltonoperator beschrieben. Er ist durch Magnonenerzeuger und Vernichter und Elektronenerzeuger und Vernichter dargestellt. Dabei wird wieder die Dipolwechselwirkung vernachlässigt, so dass auch hier die Spin-Bahn-Kopplung die einzige Wechselwirkung ist, die das gesamte Spinmoment nicht erhält. Im Wechselwirkungsoperator sind Wechselwirkungsmatrixelemente enthalten, die das Erzeugen (Vernichten) eines Magnons durch einen Elektronenübergang beschreiben. Diese werden auf den Kommutator von $\hat{\sigma}^{-}$ und $\hat{H}_{\mathrm{SOC}}$ zurückgeführt. Mit dem so erhaltenen Wechselwirkungsoperator und Fermis Goldener Regel wird dann eine Erzeugungs- und Vernichtungsrate und anschließend eine Vernichtungsfrequenz für die ferromagnetische Mode berechnet. Diese Vernichtungsfrequenz wird mit derjenigen

gleichgesetzt, die sich aus der herkömmlichen Gilbertgleichung für eine zirkulare Präzession ergibt. Durch diesen Vergleich ergibt sich ein Ausdruck für den Dämpfungsparameter α, der nach Einführung der oben beschriebenen Lebensdauerverbreiterung zur Torque-Correlation-Formel wird. Bei dieser Ableitung der Torque-Correlation-Formel geht die Näherung, dass die Magnetisierung parallel zu einer hochsymmetrischen Richtung liegt, nicht ein.

Streuzeit- und Temperaturabhängigkeit

Die Bandsumme des Ausdrucks (3.28) kann in zwei Beiträge zerlegt werden. Einen Intrabandanteil, der die Summanden $n = m$ enthält, und einen Interbandanteil, für dessen Summanden $n \neq m$ gilt. Wie weiter unten (3.4.4) und in [28] deutlich wird, beschreibt der Intrabandanteil die Anregung und anschließende Relaxation eines Elektron-Loch-Paares im selben Band, während beim vom Interbandanteil beschriebenen Prozess Elektron und Loch unterschiedliche Bänder besetzen. In [40] wird gezeigt, dass Intraband- und Interbandanteil unterschiedliche Abhängigkeiten von der Streuzeit τ zeigen. Das Überlappintegral der Spektralfunktionen in (3.28) ist für den Intrabandterm näherungsweise proportional zu τ und für den Interbandanteil näherungsweise invers zu τ. Aufgrund dieses Verhaltens werden, aus Analogie zu Leitfähigkeit und Widerstand, Intraband- und Interbandanteil als *conductivity like* und *resistivity like* bezeichnet.

Der Dämpfungsparameter wird in [4] nach der Torque-Correlation-Formel in Abhängigkeit der Streurate τ^{-1} für Fe, Co und Ni berechnet. Neben dem gesamten Dämpfungsskalar sind auch der Intraband- und Interbandanteil einzeln über τ^{-1} aufgetragen. Für kleine Streuraten dominiert der *conductivity like* Intrabandanteil, während für großes τ^{-1} der *resistivity like* Interbandanteil dominiert. Für die Summe aus beiden Anteilen, also den gesamten Dämpfungsparameter, ergibt sich dann bei einer bestimmten Streurate ein Minimum (bei Fe und Co) oder ab einer bestimmten Streurate ein Plateau (Ni).

Dieses *conductivity like* und *resistivity like* Verhalten wird bei Ni auch im Experiment beobachtet, wenn der Gilbert-Dämpfungsparameter temperaturabhängig durch die FMR-Linienbreite bestimmt wird [41]. Da tiefe Temperaturen kleinen Streuraten und große Temperaturen großen Streuraten entsprechen, erhält man bei Auftragung über der Temperatur denselben Verlauf wie bei der Auftragung in [4] über der Streurate.

Im Torque-Correlation-Modell ist die Streuzeit eine phänomenologische Konstante wie die Relaxationszeit im Breathing-Fermi-Surface-Modell. Für einen quantitativen Vergleich mit dem Experiment müsste man diese eigentlich kennen. Vergleicht man das Minimum der temperaturabhängigen Messung aus dem Experiment mit dem Minimum der Auftragung aus [4] über der Streurate, so ist ein quantitativer Vergleich auch ohne Kenntnis der Streuzeit möglich. Die in [4] dargestellten Vergleiche mit dem Experiment zeigen, dass der Dämpfungsmechanismus der Elektron-Loch-Paarerzeugung, der vom Torque-Correlation-Modell beschrieben wird, der dominierende Mechanismus in den betrachteten 3d-Übergangsmetallen ist.

3.4.2 „Matrix-Torque-Correlation-Modell“

Im oben dargestellten Torque-Correlation-Modell kann nur ein effektiver Dämpfungsskalar für eine zirkulare Kleinwinkelpräzession berechnet werden. Der Grund dafür ist, dass der Theorie von Anfang an eine Gilbertgleichung mit skalarem Dämpfungsparameter zugrunde liegt. Mit dieser Bewegungsgleichung wird eine transversale zirkulare Suszeptibilität bestimmt und darin der Dämpfungsskalar identifiziert.

Hier soll nun gezeigt werden, wie dieses Vorgehen verallgemeinert werden kann, um mit einer abgewandelten Torque-Correlation-Formel eine allgemeine Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{e})$ in der Bewegungsgleichung

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{e}}{\mathrm{d}t} = -\gamma \mathbf{e} \times \mathbf{H}_{\mathrm{eff}}(\mathbf{e}) + \mathbf{e} \times \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{e}) \cdot \frac{\mathrm{d}\mathbf{e}}{\mathrm{d}t} \tag{3.32}$$

zu bestimmen. Diese allgemeine Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ enthält dann wie der Dämpfungsskalar im konventionellen Torque-Correlation-Modell einen *conductivity like* und einen *resistivity like* Anteil. Die im Breathing-Fermi-Surface-Modell bestimmte Dämpfungsmatrix $\mathsf{A}(\mathbf{e})$ besitzt nur einen Anteil, dessen Abhängigkeit von der Streurate *conductivity like* ist.

Die hier geschilderte Vorgehensweise ist in Zusammenarbeit mit K. Gilmore und M.D. Stiles [36] entstanden und stellt eine Verallgemeinerung des Ansatzes von Garate und MacDonald [42] dar, in dem der skalare Dämpfungsparameter α der Gilbertgleichung untersucht wird.

Um das Vorgehen von [42] zur Berechnung einer Dämpfungsmatrix zu erweitern, sind die folgenden Schritte notwendig. Begonnen wird mit einer

zu (3.32) äquivalenten[10] Bewegungsgleichung

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{e}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{e} \times \mathbf{H}_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{G}}(\mathbf{e}) - \mathbf{e} \times \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{e}) \cdot \frac{\mathrm{d}\mathbf{e}}{\mathrm{d}t}\,, \tag{3.33}$$

in der der Dämpfungsskalar der Gleichung (1) aus [42] durch die Matrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{e})$ ersetzt wurde. Betrachtet man nur kleine Abweichungen von einer Gleichgewichtsrichtung[11], die hier parallel zur z-Achse zeigen soll, so kann (3.33) analog zu Gleichung (2) in [42] linearisiert werden:

$$\begin{aligned} H_{\mathrm{eff},x}^{\mathrm{G}} &= \frac{\mathrm{d}e_y}{\mathrm{d}t} + \mathcal{A}_{xx}\frac{\mathrm{d}e_x}{\mathrm{d}t} + \mathcal{A}_{xy}\frac{\mathrm{d}e_y}{\mathrm{d}t} \\ H_{\mathrm{eff},y}^{\mathrm{G}} &= -\frac{\mathrm{d}e_x}{\mathrm{d}t} + \mathcal{A}_{yx}\frac{\mathrm{d}e_x}{\mathrm{d}t} + \mathcal{A}_{yy}\frac{\mathrm{d}e_y}{\mathrm{d}t}\,. \end{aligned} \tag{3.34}$$

Für kleine Abweichungen der Richtung $\mathbf{e}$ von der z-Achse wird die Dämpfungsmatrix als unabhängig von $\mathbf{e}$ betrachtet, $\boldsymbol{\mathcal{A}} = \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{e}_z)$. Die Abhängigkeit von $\mathbf{e}$ kann dann durch die Wahl der z-Achse parallel zu unterschiedlichen Richtungen im Kristall untersucht werden. Die x- und y-Achse stehen dabei senkrecht zueinander und senkrecht zur z-Achse, sind aber sonst (zumindest vorerst) beliebig orientiert. In [42] werden in linearer Antworttheorie aus einem allgemeinen Ausdruck für die dynamische transversale Spin-Spin Korrelationsfunktion $\chi_{ij}(\omega)$ mit $i, j \in \{x, y\}$ (Gleichung (4) in [42]) die Komponenten $\mathcal{L}_{ij}$ der Matrix $\boldsymbol{\mathcal{L}}$ abgeleitet, für die dann gilt (Gleichung (8) in [42]):

$$H_{\mathrm{eff},i}^{\mathrm{G}} = \sum_j \mathcal{L}_{ij}\frac{\mathrm{d}e_j}{\mathrm{d}t}\,, \tag{3.35}$$

wobei $\mathcal{L}_{ij}$ von $\chi_{ij}(\omega)$ wie in Gleichung (9) von [42] angegeben abhängt. Durch den Vergleich von (3.34) und (3.35) findet man folgende Zusammenhänge:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{xx} &= \mathcal{L}_{xx} \\ \mathcal{A}_{yy} &= \mathcal{L}_{yy} \\ \mathcal{A}_{xy} &= \mathcal{L}_{xy} - 1 \\ \mathcal{A}_{yx} &= \mathcal{L}_{yx} + 1\,. \end{aligned} \tag{3.36}$$

[10] In [42] wird der Faktor $-\gamma$ in $\mathbf{H}_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{G}}$ hineingezogen und dafür ein „negativer“ Dämpfungsterm verwendet.

[11] Diese kann durch eine leichte Richtung im Kristall oder durch ein externes Feld gegeben sein.

χ_{ij} und damit $\mathcal{L}_{ij}$ wird in [42] in einem Einelektronenbild im Rahmen der SDFT berechnet und wie im konventionellen Torque-Correlation-Modell eine Lebensdauerverbreiterung der Einelektronenenergien eingeführt. Es ergibt sich dann für $\gamma M \mathcal{A}_{xx} = \gamma M \mathcal{L}_{xx}$ [$\gamma M \mathcal{A}_{yy} = \gamma M \mathcal{L}_{yy}$] ein Ausdruck, der in die Torque-Correlation-Formel umgeformt [43] werden kann, wobei $\hat{\sigma}^-$ in (3.30) durch $\sqrt{2}\hat{\sigma}_y$ [$\sqrt{2}\hat{\sigma}_x$] zu ersetzen ist. Der Ausdruck der Torque-Correlation-Formel, in dem $\hat{\sigma}^-$ durch $\sqrt{2}\hat{\sigma}_y$ [$\sqrt{2}\hat{\sigma}_x$] ersetzt ist soll im Folgenden als TC^y [TC^x] bezeichnet werden. Die konventionelle Torque-Correlation-Formel, deren Matrixelemente $\hat{\sigma}^-$ enthalten, wird mit TC^- bezeichnet.

Die Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ kann auf Hauptachsenform transformiert werden, indem die x- und y-Achse parallel zu den Eigenvektoren der Matrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ gewählt werden. Dies kann man erreichen, indem man x- und y-Achse starr um die feste z-Achse rotiert; der dabei erhaltene Maximal- bzw. Minimalwert für $\mathcal{A}_{xx} = \mathrm{TC}^y/(\gamma M)$ und $\mathcal{A}_{yy} = \mathrm{TC}^x/(\gamma M)$ entspricht dann dem Eigenwert $\mathcal{A}_1$ bzw. $\mathcal{A}_2$ der Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}$.

Die Abhängigkeit der Matrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{e})$ und der Eigenwerte $\mathcal{A}_1(\mathbf{e})$ und $\mathcal{A}_2(\mathbf{e})$ von der Richtung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall (*orientational* Anisotropie) kann durch die Variation der Richtung der z-Achse untersucht werden.

Da die Eigenwerte der hier abgeleiteten Dämpfungsmatrix durch TC^y und TC^x gegeben sind, enthalten sie sowohl einen Intrabandanteil, der sich *conductivity like* bezüglich der Streurate verhält als auch einen Interbandanteil, der sich *resistivity like* verhält.

In Kapitel 5 und in [36] wird die *orientational* Anisotropie (Abhängigkeit von Richtung $\mathbf{e}$ im Kristall) des mit der konventionellen Torque-Correlation-Formel TC^- berechneten Dämpfungsskalars in Abhängigkeit von der Streurate untersucht. Dieser Skalar entspricht einem effektiven Dämpfungsskalar für eine zirkulare Kleinwinkelpräzession um die Richtung $\mathbf{e}$. Außerdem werden in Kapitel 5 und in [36] die Eigenwerte der Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ und effektive Dämpfungsparameter für eine elliptische Kleinwinkelpräzession mit der oben beschriebenen abgewandelten Torque-Correlation-Formel in Abhängigkeit von der Streurate berechnet.

3.4.3 Physik der Dämpfung durch Elektron-Loch-Paarbildung

Mit dem Breathing-Fermi-Surface-Modell wurde bereits ein Modell vorgestellt, das die Dissipation in der Magnetisierungsdynamik durch die Anre-

gung und anschließende Relaxation von Elektron-Loch-Paaren beschreibt. In dessen Ableitung wird dieser physikalische Prozess verständlich abgebildet.

Zum besseren Verständnis soll in diesem Abschnitt der allgemeine durch die Spin-Bahn-Kopplung induzierte Anregungsprozess der Elektron-Loch-Paare nochmals in anderen Worten und aus einem weiteren Blickwinkel erklärt werden. Dabei soll an dieser Stelle eine Beschränkung auf magnetisch kollineare Systeme stattfinden, bei denen $\mathbf{e}(t)$ die Richtung der Magnetisierung ist. In 3.4.4 wird deutlich, dass auch das Torque-Correlation-Modell die durch die hier behandelten Prozesse verursachte Dämpfung beschreibt.

Wie bereits weiter oben erwähnt, müsste man für eine vollständig quantenmechanische Beschreibung der Dissipation in der Magnetisierungsdynamik, d.h. des Energie- und Drehimpulsübertrags vom Spinsystem an das Gitter, die zeitabhängige Vielteilchenschrödingergleichung für Elektronen und Kerne lösen. Und dies unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung, da diese die für den Drehimpulsübertrag verantwortliche Wechselwirkung ist.

Stattdessen wird hier eine effektive Einelektronentheorie beschrieben, die nur Elektronen und Löcher enthält. Der Energie- und Drehimpulsübertrag geschieht durch Elektron- oder Lochstreuung am Gitter, und wird durch eine phänomenologische Lebensdauer oder Relaxationszeit τ der Elektron-Loch-Paare in die Theorie eingebracht.

Man kann das Problem nun für die beiden Grenzfälle $\tau \to 0$ und $\tau \to \infty$ betrachten. Für $\tau \to 0$ finden so viele Streuprozesse statt, dass sich das Elektronensystem zu jedem Zeitpunkt im Grundzustand bezüglich der momentanen Magnetisierungskonfiguration, also der momentanen Richtung $\mathbf{e}(t)$ befindet, welche man als externen Parameter betrachtet. Dann kann man (wie bereits oben beschrieben, z.B. durch Lösung der Kohn-Sham-Gleichungen der Elektronentheorie für vorgeschriebenes $\mathbf{e}(t)$) adiabatische Einelektronenenergien $\varepsilon_{j\mathbf{k}}(\mathbf{e}(t))$, die zugehörigen Einelektronenwellenfunktionen $\psi_{j\mathbf{k}}(\mathbf{e}(t))$, adiabatische Fermi-Dirac-Besetzungszahlen $f_{j\mathbf{k}}(\mathbf{e}(t))$ und die adiabatische Fermifläche $S(\mathbf{e}(t))$ definieren. Dabei bezeichnet j den Bandindex und $\mathbf{k}$ den Wellenvektor von Blochzuständen. Aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung verändern sich diese Größen bei zeitabhängigem $\mathbf{e}(t)$ mit der Zeit. Durch quantenmechanische Argumentation [35] kann gezeigt werden, dass in dieser adiabatischen Situation keine Dämpfung auftritt.

Im zweiten Grenzfall, $\tau \to \infty$, finden keine Streuprozesse statt und damit auch keine Dämpfung. Die Vielelektronenwellenfunktion $\Psi(t)$ ent-

wickelt sich dann kohärent nach der zeitabhängigen Schrödingergleichung. Als Anfangsbedingung für $\Psi(t=0)$ kann man z.B. die adiabatische Vielelektronenwellenfunktion für eine Anfangsorientierung $\mathbf{e}(t=0)$ wählen, die nicht parallel zu einer Gleichgewichtsrichtung liegt. Aus der Vielelektronenwellenfunktion zur Zeit t kann dann die mikroskopische Spinmagnetisierung $\mathbf{m}(\mathbf{r},t)$ zum Zeitpunkt t bestimmt werden und daraus die momentane Magnetisierungsrichtung $\mathbf{e}(t)$. Aus der Lösung der Kohn-Sham-Gleichungen für vorgeschriebenes $\mathbf{e}(t)$ erhält man die adiabatischen Größen $\varepsilon_{j\mathbf{k}}(\mathbf{e}(t))$, $\psi_{j\mathbf{k}}(\mathbf{e}(t))$, $f_{j\mathbf{k}}(\mathbf{e}(t))$ und $S(\mathbf{e}(t))$ für die momentane Orientierung $\mathbf{e}(t)$. Außerdem kann man die Vielelektronenwellenfunktion $\Psi(t)$ durch die adiabatischen Wellenfunktionen $\psi_{j\mathbf{k}}(\mathbf{e}(t))$ darstellen. Die Besetzungszahlen $n_{j\mathbf{k}}(t) = \langle\Psi(t)|\,\hat{a}^\dagger_{j\mathbf{k}}\hat{a}_{j\mathbf{k}}\,|\Psi(t)\rangle$, die sich dabei mit dem Besetzungszahloperator $\hat{a}^\dagger_{j\mathbf{k}}\hat{a}_{j\mathbf{k}}$ ergeben, unterscheiden sich im Allgemeinen von den adiabatischen Besetzungszahlen $f_{j\mathbf{k}}(\mathbf{e}(t))$, da sich das Elektronensystem ohne Streuprozesse von der adiabatischen Situation weg entwickelt. Betrachtet man die adiabatische Situation für die momentane Magnetisierungsrichtung $\mathbf{e}(t)$ als Referenzsituation, werden also Elektron-Loch-Paare angeregt.

In der Realität finden Streuprozesse statt, die eine endliche Zeit τ benötigen. Bei der Relaxation der Elektron-Loch-Paare relaxieren die Besetzungszahlen $n_{j\mathbf{k}}(t)$ hin zu den adiabatischen Besetzungszahlen $f_{j\mathbf{k}}(t)$.

Im effektiven Elektronenbild kann man dabei zwei Arten von Elektron-Loch-Paaren unterscheiden. Elektron und Loch können sich im selben adiabatischen Band befinden. Diese Intrabandpaare entstehen dadurch, dass die Einelektronenenergien $\varepsilon_{j\mathbf{k}}(\mathbf{e}(t))$ und damit die Fermifläche $S(\mathbf{e}(t))$ aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung von der Richtung $\mathbf{e}(t)$ abhängen. Bei der Dynamik atmet die Fermifläche und es entstehen bei endlichem τ Elektron-Loch-Paare, die wie im letzten Abschnitt des Kapitels 3.3.1 beschrieben, vom Breathing-Fermi-Surface-Modell erfasst werden. Dieser Beitrag zur Dämpfung (*breathing Fermi surface* Anteil) ist proportional zur Relaxationszeit und verhält sich damit *conductivity like*.

Beim zweiten Typ von Elektron-Loch-Paaren besetzen Elektron und Loch unterschiedliche Bänder j und j'. Sie entstehen dadurch, dass die adiabatischen Wellenfunktionen eine zeitabhängige Störung aufgrund des zeitabhängigen Beitrags der Spin-Bahn-Kopplung zum Hamiltonoperator spüren und dadurch Übergänge zwischen den Zuständen $\psi_{j\mathbf{k}}$ und $\psi_{j'\mathbf{k}}$ angeregt werden. Die Anzahl der möglichen Interbandübergänge nimmt mit

der Lebensdauerverbreiterung der Zustände zu. Dieser Beitrag zur Dämpfung (*bubbling Fermi surface* Anteil) nimmt deshalb mit $1/\tau$ zu und verhält sich *resistivity like*.

3.4.4 Anregung von Elektron-Loch-Paaren – Torque-Correlation-Formel

In der formalen Torque-Correlation-Formel und auch bei ihrer Herleitung in [8] sind die zugrunde liegenden physikalischen Prozesse nur schwer zu erkennen. Sowohl das Torque-Correlation-Modell als auch die im vorigen Abschnitt dargestellten Prozesse der Anregung von Elektron-Loch-Paaren beschreiben die Dämpfung der Magnetisierungsdynamik in kollinearen Systemen. Die Torque-Correlation-Formel enthält einen *conductivity like* und einen *resistivity like* Anteil. Analog dazu gibt es bei der Bildung von Elektron-Loch-Paaren Anregungsprozesse, die sich *conductivity like* oder *resistivity like* verhalten. Es liegt also nahe, die physikalischen Prozesse der Elektron-Loch-Paarbildung durch eine Theorie zu beschreiben, deren Ergebnis auf die Torque-Correlation-Formel abgebildet werden kann. Genau dies ist Gilmore et al. in [28] gelungen.

Die Theorie beginnt mit einem effektiven adiabatischen Feld, das auf die Richtung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung wirkt und der Ableitung der Energie nach $\mathbf{e}$ entspricht. Für die Energieableitung wird die Form (3.11) (mit $\mathbf{e_R} = \mathbf{e}$) verwendet, die aus zwei Termen besteht.

Aus dem ersten Term, der die Ableitungen der Einteilchenenergien nach der Richtung $\mathbf{e}$ enthält, wird im Rahmen des Breathing-Fermi-Surface-Modells ein dissipatives Feld abgeleitet. Dieses beschreibt die Dämpfung durch Anregung von Intraband-Elektron-Loch-Paaren. Der Dämpfungsterm wird durch eine Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ mit den nichtverschwindenden Eigenwerten $A_1(\mathbf{e})$ und $A_2(\mathbf{e})$ beschrieben, für die in hochsymmetrischen Richtungen $\mathbf{e}$ der Magnetisierung $A_1(\mathbf{e}) = A_2(\mathbf{e}) = A(\mathbf{e})$ gilt. In [28] wird für hochsymmetrische Richtungen $\mathbf{e}$ gezeigt, dass der im Breathing-Fermi-Surface-Modell abgeleitete Dämpfungsskalar $A(\mathbf{e})$ durch den Intrabandanteil ($n = m$) der Torque-Correlation-Formel gegeben ist. Für eine zirkulare Kleinwinkelpräzession um eine nicht hochsymmetrische Richtung kann gezeigt werden ([44] und Kapitel 4), dass die Dynamik über die Eigenwerte $A_1(\mathbf{e})$ und $A_2(\mathbf{e})$ der Dämpfungsmatrix mittelt und die Dämpfung durch einen effektiven Dämpfungsskalar $A_{\text{eff}}^{\text{zirk}}(\mathbf{e})$ beschrieben werden kann, der bei zirkularer Trajektorie dem Mittelwert der Eigenwerte entspricht.

Berechnet man den Intrabandanteil der Torque-Correlation-Formel für eine nicht hochsymmetrische Richtung, so entspricht das Ergebnis diesem effektiven Dämpfungsskalar, gebildet aus den im Breathing-Fermi-Surface-Modell berechneten Eigenwerten $A_1(\mathbf{e})$ und $A_2(\mathbf{e})$.

Aus dem zweiten Term des adiabatischen effektiven Feldes, der die Ableitungen $\partial f_{j\mathbf{k}}/\partial \mathbf{e}$ der Besetzungszahlen nach der Richtung $\mathbf{e}$ enthält, wird in [28] ebenfalls ein dissipatives Feld abgeleitet. Es wird dabei eine zirkulare Kleinwinkelpräzession um eine Richtung $\mathbf{e}$ betrachtet, wie sie z.B. um ein starkes externes Feld, das parallel zu $\mathbf{e}$ liegt stattfindet. Während der Präzession spüren die adiabatischen Zustände $\psi_{j\mathbf{k}}$ den zeitabhängigen Beitrag der Spin-Bahn-Kopplung als zeitabhängige Störung. Diese verursacht Interbandübergänge zwischen den Zuständen $\psi_{j\mathbf{k}}$ und $\psi_{j'\mathbf{k}}$. Die zeitliche Änderung der Besetzungszahlen $\partial f_{j\mathbf{k}}/\partial t$ wird in [28] mit Fermis Goldener Regel und einer Mastergleichung bestimmt. Anschließend wird die Ableitung $\partial f_{j\mathbf{k}}/\partial \mathbf{e}$ im zweiten Term des adiabatischen Feldes durch $\partial f_{j\mathbf{k}}/\partial t$ und $\partial \mathbf{e}/\partial t$ ausgedrückt. Nun kann ein Dämpfungsskalar identifiziert werden, den man auf die Form des Interbandanteils der Torque-Correlation-Formel umformen kann. Der durch den Interbandanteil der Torque-Correlation-Formel berechnete Dämpfungsskalar beschreibt also den *bubbling Fermi surface* Prozess. Er entspricht dem effektiven Dämpfungsskalar, den man bei einer zirkularen Präzession aus den Eigenwerten des Interbandanteils der Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ erhält.

Damit sind *breathing Fermi Surface* Beitrag und *bubbling Fermi surface* Beitrag zur Dämpfung durch Anregung von Elektron-Loch-Paaren bei einer zirkularen Kleinwinkelpräzession auf Intraband- und Interbandanteil der Torque-Correlation-Formel abgebildet. Wie in [4] gezeigt, dominiert der Intrabandanteil (*breathing Fermi surface* Beitrag) bei kleinen Streuraten τ^{-1} bzw. tiefen Temperaturen und verhält sich *conductivity like*. Bei großen Streuraten bzw. hohen Temperaturen dominiert der Interbandanteil (*bubbling Fermi surface* Beitrag) und verhält sich *resistivity like*. Welcher Beitrag bei welcher Temperatur der dominierende ist, hängt vom betrachteten Material ab.

4 FMR-Linienbreite und effektive Dämpfung

Nimmt man an, dass die dissipative Magnetisierungsdynamik durch die herkömmliche Gilbertgleichung (3.1) mit dem skalaren konstanten Dämpfungsparameter α beschrieben wird, so kann α experimentell durch die Linienbreite der dissipierten Leistung in einem FMR-Experiment (Ferromagnetic Resonance) bestimmt werden.

In einem FMR-Experiment wird ein starkes konstantes externes Magnetfeld $\mathbf{H}_{\mathrm{dc}}$ mit $|\mathbf{H}_{\mathrm{dc}}| = H$ angelegt. Ist dieses sehr groß im Vergleich zum magnetokristallinen Anisotropiefeld und Demagnetisierungsfeld, ist die Orientierung der kollinearen Magnetisierung im Gleichgewicht nahezu parallel zu diesem externen konstanten Feld $\mathbf{H}_{\mathrm{dc}}$. Senkrecht zum konstanten externen Feld wird ein zirkulares (oder lineares) oszillierendes Feld $\mathbf{H}_{\mathrm{ac}}(t)$ mit der Frequenz ω angelegt, dessen Feldstärke $h = |\mathbf{H}_{\mathrm{ac}}|$ im Vergleich zum konstanten Feld klein ist ($h \ll H$). Dieses oszillierende Feld $\mathbf{H}_{\mathrm{ac}}(t)$ regt eine Kleinwinkelpräzession der Magnetisierung um die Gleichgewichtsrichtung an, die durch die Richtung des äußeren konstanten Feldes $\mathbf{H}_{\mathrm{dc}}$ gegeben ist. Misst man bei fester Frequenz ω des anregenden Feldes die absorbierte Leistung in Abhängigkeit der Feldstärke H des konstanten Feldes, so ergibt sich eine Resonanzkurve mit Linienbreite ΔH (half width at half maximum, HWHM).

Um einen Zusammenhang zwischen der gemessenen Linienbreite ΔH und dem skalaren Dämpfungsparameter α der Gilbertgleichung herzustellen, geht man wie folgt vor: Man setzt in die Gilbertgleichung die oben beschriebene Feldkonfiguration als effektives Feld $\mathbf{H}_{\mathrm{eff}} = \mathbf{H}_{\mathrm{dc}} + \mathbf{H}_{\mathrm{ac}}(t)$ ein, löst die Bewegungsgleichung und berechnet die dissipierte Leistung. Setzt man die Linienbreite bezüglich H dieser berechneten dissipierten Leistung gleich der gemessenen Linienbreite, so erhält man:

$$\Delta H = \alpha \frac{\omega}{\gamma} \,. \tag{4.1}$$

Bereits in Abschnitt 3.3.4 und 3.4.2 wurden die Bewegungsgleichungen (3.22) und (3.32) für die dissipative Magnetisierungsdynamik in einer kollinearen Konfiguration vorgestellt, die anstatt eines skalaren Dämpfungsparameters eine Dämpfungsmatrix $\mathsf{A}(\mathbf{e})$ (Breathing-Fermi-Surface-Modell) und $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{e})$ („Matrix-Torque-Correlation-Modell“) enthalten, deren Eigenwerte von der Richtung der Magnetisierung im Kristall abhängig sind.

Es stellt sich nun die Frage, ob aus der im FMR-Experiment gemessenen Linienbreite auch Informationen über die Eigenwerte einer solchen Dämpfungsmatrix und deren Abhängigkeit von der Richtung der Magnetisierung im Kristall gewonnen werden können.

Um diese Frage zu beantworten, muss zuerst der Zusammenhang zwischen der Linienbreite im FMR-Experiment und den Eigenwerten der Dämpfungsmatrix hergestellt werden. Dieser Zusammenhang wird im Folgenden abgeleitet, indem die Bewegungsgleichung mit Dämpfungsmatrix für die Feldkonfiguration eines FMR-Experiments gelöst und die dissipierte Leistung und deren Linienbreite in Abhängigkeit der Eigenwerte der Dämpfungsmatrix berechnet wird. Die Abhängigkeit der Linienbreite von der Richtung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall erhält man, indem man Eigenwerte der Dämpfungsmatrix für verschiedene Richtungen $\mathbf{e}$ einsetzt.

4.1 Bewegungsgleichung mit anisotroper Dämpfungsmatrix

Bevor die spezielle Situation eines FMR-Experiments untersucht wird, sollen an dieser Stelle einige Eigenschaften der Bewegungsgleichung (3.22) nochmals genannt und die Bewegungsgleichung (3.22) selbst zur besseren Übersicht nochmals dargestellt werden:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{e}}{\mathrm{d}t} = -\gamma \mathbf{e} \times \mathbf{H}_{\mathrm{eff}}(\mathbf{e}) + \mathbf{e} \times \mathsf{A}(\mathbf{e}) \cdot \frac{\mathrm{d}\mathbf{e}}{\mathrm{d}t}\,. \tag{4.2}$$

Die folgenden Untersuchungen sind zum größten Teil unabhängig davon, ob die Bewegungsgleichung (3.22) mit der Dämpfungsmatrix A des Breathing-Fermi-Surface-Modells oder die Bewegungsgleichung (3.32) mit der Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ des „Matrix-Torque-Correlation-Modells“ betrachtet wird. Daher wird im Folgenden das Symbol A gleichbedeutend für A und $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ für die Dämpfungsmatrix verwendet, sofern nichts anderes explizit angegeben ist.

Gleichung (4.2) ist die Bewegungsgleichung für die Richtung $\mathbf{e}(t)$ der kollinearen Magnetisierung $\mathbf{M}(t) = M\mathbf{e}(t)$. Sie enthält eine Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$, die zwei nicht verschwindende Eigenwerte $A_p(\mathbf{e})\,, p = 1, 2$ besitzt (siehe Abschnitt 3.3.4 und [16, 34, 36, 44]). Die Eigenwerte $A_p(\mathbf{e})$ hängen aufgrund der magnetokristallinen Anisotropie von der Richtung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall ab und sind im Allgemeinen unterschiedlich.

Die Bewegungsgleichung (4.2) enthält damit eine Anisotropie bezüglich der Orientierung $\mathbf{e}$, da die Eigenwerte $A_p(\mathbf{e})$ von $\mathbf{e}$ abhängen, was in Anlehnung an [36] als *orientational* Anisotropie bezeichnet wird. Außerdem ist eine Anisotropie bezüglich $\mathrm{d}\mathbf{e}/\mathrm{d}t$ enthalten, da die Eigenwerte $A_p(\mathbf{e})$ im Allgemeinen unterschiedlich sind, was als *rotational* Anisotropie bezeichnet werden soll. Die Eigenwerte der Dämpfungsmatrix beschreiben die momentane Dämpfung, die auftritt, wenn die momentane Dynamik $\mathrm{d}\mathbf{e}/\mathrm{d}t$ parallel zum jeweiligen Eigenvektor ist.

Sind beide Eigenwerte gleich[1] , $A_1(\mathbf{e}) = A_2(\mathbf{e}) = A(\mathbf{e})$, so entspricht Gleichung (4.2) einer Gilbertgleichung mit Gilbertskalar $A(\mathbf{e})$, der jedoch im Allgemeinen von der Orientierung abhängig ist.

Multipliziert man Gleichung (4.2) mit dem Betrag M der Magnetisierung $\mathbf{M}(t) = M\mathbf{e}(t)$ erhält man:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{M}}{\mathrm{d}t} = -\gamma\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\mathrm{eff}}(\mathbf{e}) + \frac{1}{M}\mathbf{M} \times \mathbf{A}(\mathbf{e}) \cdot \frac{\mathrm{d}\mathbf{M}}{\mathrm{d}t}\,. \tag{4.3}$$

4.2 FMR-Linienbreite für Bewegungsgleichung mit anisotroper Dämpfungsmatrix

Ziel des folgenden Abschnitts ist es, ein FMR-Experiment basierend auf der Bewegungsgleichung (4.3) zu behandeln. Es wird dabei verwendet, dass die Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ zwei nicht verschwindende im Allgemeinen unterschiedliche Eigenwerte $A_1(\mathbf{e})$ und $A_2(\mathbf{e})$ besitzt, die von der Richtung

[1] Dies ist der Fall, wenn $\mathbf{e}$ parallel zu einer hochsymmetrischen Richtung im Kristall orientiert ist. Die Ergebnisse aus Kapitel 5 und [36] zeigen, dass bei hohen Streuraten, wo der *resistivity like* Interbandanteil der Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ dominiert, beide Eigenwerte für beliebige Richtungen $\mathbf{e}$ gleich sind und diese dann auch von $\mathbf{e}$ unabhängig sind.

$\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall abhängen,

$$\mathbf{A}(\mathbf{e}) = \begin{pmatrix} A_1(\mathbf{e}) & 0 & 0 \\ 0 & A_2(\mathbf{e}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} . \tag{4.4}$$

Die zentrale Frage ist, in welcher Form die Eigenwerte $A_1(\mathbf{e})$ und $A_2(\mathbf{e})$ der Dämpfungsmatrix in die Linienbreite der dissipierten Leistung eingehen, wenn diese für ein FMR-Experiment durch die Bewegungsgleichung (4.3) berechnet wird.

Es wird angenommen, dass das konstante externe Feld $\mathbf{H}_{\mathrm{dc}}$ sehr viel größer ist als das Anisotropiefeld und das Demagnetisierungsfeld, welche somit im effektiven Feld $\mathbf{H}_{\mathrm{eff}}$ in Gleichung (4.3) vernachlässigt werden. Die Richtung des konstanten Feldes $\mathbf{H}_{\mathrm{dc}}$ wird ohne Beschränkung der Allgemeinheit parallel zur z-Achse gewählt:

$$\mathbf{H}_{\mathrm{dc}} = H\mathbf{e}_z \, . \tag{4.5}$$

Senkrecht zu $\mathbf{H}_{\mathrm{dc}}$ steht das oszillierende Feld $\mathbf{H}_{\mathrm{ac}}(t)$:

$$\mathbf{H}_{\mathrm{ac}}(t) = h_x \cos(\omega t)\mathbf{e}_x + h_y \sin(\omega t)\mathbf{e}_y \, , \tag{4.6}$$

mit $|\mathbf{H}_{\mathrm{dc}}| \gg |\mathbf{H}_{\mathrm{ac}}|$, d.h. $H \gg h_x, h_y$. Das effektive Feld in der Bewegungsgleichung hat damit die Form

$$\mathbf{H}_{\mathrm{eff}} = \mathbf{H}_{\mathrm{dc}} + \mathbf{H}_{\mathrm{ac}}(t) \tag{4.7}$$

und verursacht eine Kleinwinkelpräzession der Magnetisierung $\mathbf{M}$ um die Richtung des Feldes $\mathbf{H}_{\mathrm{dc}}$, die hier durch die z-Achse gegeben ist. Da eine Kleinwinkelpräzession der Magnetisierung um eine vorgegebene Richtung stattfindet (hier die Richtung $\mathbf{e}_z$), werden die Eigenwerte der Dämpfungsmatrix während der Präzession als konstant angenommen, $A_1(\mathbf{e}) = A_1(\mathbf{e}_z) = A_1$ und $A_2(\mathbf{e}) = A_2(\mathbf{e}_z) = A_2$. Im Anschluss kann die Abhängigkeit des Ergebnisses von der Richtung $\mathbf{e}$ im Kristall untersucht werden, indem man Eigenwerte für verschiedene Richtungen $\mathbf{e}$ im Kristall einsetzt. Dies ist aufgrund der gemachten Näherungen äquivalent zu der Einstellung der Richtung des konstanten Feldes $\mathbf{H}_{\mathrm{dc}}$ entlang verschiedener Richtungen im Kristall.

Im nächsten Schritt wird die Bewegungsgleichung (4.3) für das obige effektive Feld gelöst. Dabei wird für die Magnetisierung $\mathbf{M}$ der Ansatz

$$\mathbf{M}(t) = M_s\mathbf{e}_z + m_x(t)\mathbf{e}_x + m_y(t)\mathbf{e}_y \tag{4.8}$$

verwendet. Da eine Kleinwinkelpräzession um die z-Achse betrachtet wird, kann die z-Komponente der Magnetisierung als konstant genähert werden. Außerdem gilt $M \approx M_s \gg |m_x|, |m_y|$. Setzt man das effektive Feld (4.7) in (4.3) ein, verwendet die Felder (4.5) und (4.6) und den Ansatz (4.8), erhält man nach Linearisierung bezüglich der zeitabhängigen Größen das folgende gekoppelte lineare Differentialgleichungssystem erster Ordnung für $m_x(t)$ und $m_y(t)$:

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}m_x}{\mathrm{d}t} &= -\gamma H m_y(t) + \gamma M h_y \sin(\omega t) - A_2 \frac{\mathrm{d}m_y}{\mathrm{d}t} \\ \frac{\mathrm{d}m_y}{\mathrm{d}t} &= \gamma H m_x(t) - \gamma M h_x \cos(\omega t) + A_1 \frac{\mathrm{d}m_x}{\mathrm{d}t} \quad . \end{aligned} \tag{4.9}$$

Setzt man die Lösung [2] $m_x(t)$ und $m_y(t)$ des Differenzialgleichungssystems (4.9) in (4.8) ein, kann die im zeitlichen Mittel dissipierte Leistung[3] P berechnet werden, indem man

$$\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t} = -\mathbf{H}_{\mathrm{ac}} \cdot \frac{\mathrm{d}\mathbf{M}}{\mathrm{d}t} \tag{4.10}$$

über die Periodendauer $2\pi/\omega$ mittelt.

Bei der Anregung durch ein zirkulares Feld $\mathbf{H}_{\mathrm{ac}}$ ($h_x = h_y = h$) ergibt sich mit $\bar{A} = (A_1 + A_2)/2$ und $\Delta A = A_1 - A_2$:

$$P_{\mathrm{circ}} = -\frac{\gamma M h^2 \bar{A}}{(1-x)^2 + (\bar{A})^2 - \frac{(\Delta A)^2}{4} + \frac{(\Delta A)^2 x^2}{(1+x)^2 + (\bar{A})^2 - \frac{(\Delta A)^2}{4}}} \, , \tag{4.11}$$

wobei

$$x = \frac{\gamma H}{\omega} \tag{4.12}$$

[2] Die allgemeine Lösung setzt sich zusammen aus einem „Einschwingvorgang“, der für große Zeiten weggedämpft wird und einer mit der Frequenz ω oszillierenden Lösung. Da im FMR-Experiment eine eingeschwungene Dynamik über viele Periodendauern $2\pi/\omega$ beobachtet wird, wird im Folgenden für $m_x(t)$ und $m_y(t)$ nur die für große Zeiten bestehende Lösung verwendet.

[3] Setzt man für $\mathbf{M}$ das gesamte magnetische Moment ein, erhält man die gesamte dissipierte Leistung, ist $\mathbf{M}$ die Magnetisierung ergibt sich die pro Volumen dissipierte Leistung.

gilt.

Für den Fall, dass beide Eigenwerte A_1 und A_2 gleich sind ($\Delta A = 0$), vereinfacht sich (4.11) zu

$$P_{\text{circ}} = -\frac{\gamma M h^2 \omega^2 \bar{A}}{(\omega - \gamma H)^2 + (\bar{A}\omega)^2}\,. \tag{4.13}$$

Dieser Ausdruck entspricht dem, der sich für die Gilbergleichung mit skalarem Dämpfungsskalar α ergibt, wobei α hier durch $\bar{A}$ ersetzt ist. Es ergibt sich die Linienbreite HWHM (half-width at half maximum):

$$\Delta H = \bar{A}\frac{\omega}{\gamma}\,. \tag{4.14}$$

Während α in der Gilbertgleichung als konstant angenommen wird, hängt $\bar{A}(\mathbf{e}) = (A_1(\mathbf{e}) + A_2(\mathbf{e}))/2$ ($= A(\mathbf{e})$, wenn $A_1 = A_2$ gilt) und damit die Linienbreite der FMR im Allgemeinen von der Richtung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall ab. Der Fall, dass $A_1(\mathbf{e}) = A_2(\mathbf{e}) = A(\mathbf{e}) = \bar{A}(\mathbf{e})$ gilt, $\bar{A}(\mathbf{e})$ aber für unterschiedliche Richtungen $\mathbf{e}$ verschieden ist, tritt z.B. in Ni auf wenn man die beiden hochsymmetrischen aber kristallographisch nicht äquivalenten Richtungen [111] und [001] miteinander vergleicht (siehe Abbildung 1 in [44], dort nur Breathing-Fermi-Surface-Anteil; oder Abbildung 5.1 in Abschnitt 5.1, bei kleinen Streuraten).

Für den allgemeinen Fall, dass A_1 und A_2 verschieden sind, ist (4.11) in guter Näherung ebenfalls durch (4.13) gegeben, wenn man beachtet, dass $\bar{A}, \Delta A \approx 0.01$ und $x \approx 1$ in der Nähe der Resonanz ($\omega = \gamma H$) gilt.

D.h. die Linienbreite der FMR ist durch den Mittelwert $\bar{A}(\mathbf{e})$ der beiden Eigenwerte $A_1(\mathbf{e})$ und $A_2(\mathbf{e})$ bestimmt. Ist dieser Mittelwert anisotrop bezüglich der Richtung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall, so lässt sich diese *orientational* Anisotropie in der FMR-Linienbreite durch Variation der Richtung des Feldes $\mathbf{H}_{\text{dc}}$ beobachten (in Ni: [45, 46]). Sind die Eigenwerte $A_1(\mathbf{e})$ und $A_2(\mathbf{e})$ anisotrop bezüglich $\mathbf{e}$, ihr Mittelwert jedoch isotrop, ist die Anisotropie in der FMR-Linienbreite nicht beobachtbar. Solch ein Verhalten tritt z.B. in Ni zwischen den Richtungen [111] und [110] auf (siehe Abbildung 1 in [44], dort nur Breathing-Fermi-Surface-Anteil).

Die Tatsache, dass die Dämpfung der Magnetisierungsdynamik durch eine Dämpfungsmatrix beschrieben wird, ist in der FMR-Linienbreite nicht beobachtbar, da die zirkulare Trajektorie den Unterschied der Eigenwerte der Dämpfungsmatrix und damit die *rotational* Anisotropie ausmittelt.

Für ein lineares Anregungsfeld $\mathbf{H}_{\mathrm{ac}}$ ($h_x = h, h_y = 0$) kann man die dissipierte Leistung analog berechnen und erhält den zu (4.11) analogen Ausdruck:

$$P_{\mathrm{lin}} = -\frac{\gamma M h^2}{2} \frac{A_2 + A_1 A_2^2 + A_1 x^2}{(1 + A_1 A_2)^2 + (-2 + A_1^2 + A_2^2)x^2 + x^4} \,. \tag{4.15}$$

Der Ausdruck (4.15) konnte nicht durch einfache analytische Umformungen und den oben gemachten Näherungen in (4.13) umgeformt werden. Numerisch kann man für $A_1, A_2 \approx 0.01$ zeigen, dass auch die Linienbreite ΔH von (4.15) durch den Mittelwert $\bar{A} = (A_1 + A_2)/2$ bestimmt ist. Dies ist physikalisch sinnvoll, da auch bei linearem Anregungsfeld die Trajektorie der Magnetisierung nahezu zirkular ist.

4.3 Betrachtung der dissipierten Leistung mit der Dissipationsfunktion

Das in Kapitel 3.2 vorgestellte Rayleigh'sche Dissipationsfunktional (3.5) bietet eine weitere Möglichkeit, die dissipierte Leistung bei bekannter Magnetisierungstrajektorie zu berechnen. Allgemein gilt für die pro Volumen im zeitlichen Mittel dissipierte Leistung P:

$$P = -\frac{1}{V_{\mathrm{Probe}}} \overline{2R\left[\dot{\mathbf{M}}\right]} \,, \tag{4.16}$$

wobei V_{Probe} für das Probenvolumen und der Querstrich für die zeitliche Mittelung steht.

Das von Gilbert vorgeschlagene Dissipationsfunktional (3.5) beschreibt den allgemeinen Fall mit nichtlokaler Dämpfungsmatrix $\eta_{i,j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ und allgemeiner Magnetisierungskonfiguration $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$ und Dynamik $\dot{\mathbf{M}}(\mathbf{r}, t)$. Um die in diesem Kapitel vorliegende Situation eines FMR-Experiments mit lokaler Dämpfungsmatrix zu beschreiben wird $\eta_{i,j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ durch $\eta_{i,j}\delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ersetzt. Die Magnetisierung und ihre Zeitableitung ist homogen und kollinear, d.h. $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{M}(t)$ und $\dot{\mathbf{M}}(\mathbf{r}, t) = \dot{\mathbf{M}}(t)$.

Führt man die genannten Ersetzungen in (3.5) durch und integriert über $\mathrm{d}\mathbf{r}$ und $\mathrm{d}\mathbf{r}'$ ergibt sich für die zeitlich gemittelte pro Volumen dissipierte Leistung

$$P = -\overline{\sum_{i,j} \dot{\mathbf{M}}_i(t) \eta_{i,j} \dot{\mathbf{M}}_j(t)} \,. \tag{4.17}$$

Für den Skalar η des Dissipationfunktionals, das auf die Gilbertgleichung mit skalarem α führt, gilt $\eta = \alpha/M\gamma$[4]. Analog gilt hier $\eta_{i,j} = A_{i,j}/M\gamma$. Dabei ist $\mathbf{A}$ die Dämpfungsmatrix der Bewegungsgleichung (4.3). Während die von Gilbert eingeführte Matrix $\eta_{i,j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ unabhängig von der Magnetisierungskonfiguration ist, hängt $\mathbf{A}$ von der Richtung der Magnetisierung im Kristall ab. Dies ändert nichts an der Gültigkeit der obigen Betrachtungen, da bei der Ableitung der Bewegungsgleichung durch das Dissipationsfunktional dieses nur nach $\dot{\mathbf{M}}$ und nicht nach $\mathbf{M}$ variiert wird. Für die pro Volumen im zeitlichen Mittel dissipierte Leistung gilt somit

$$P = -\frac{1}{\gamma M}\overline{\sum_{i,j} \dot{\mathbf{M}}_i(t)(\mathbf{A})_{i,j}\dot{\mathbf{M}}_j(t)}\,. \tag{4.18}$$

Setzt man in diesen Ausdruck (4.18) die Lösung des Differenzialgleichungssystems (4.9) für zirkulares Feld $\mathbf{H}_{ac}$ ($h_x = h_y = h$) ein, erhält man den Ausdruck (4.11) und für lineares Feld $\mathbf{H}_{ac}$ ($h_x = h, h_y = 0$) den Ausdruck (4.15).

Gleichung (4.18) bietet die Möglichkeit bei vorgegebener Trajektorie $\mathbf{M}(t)$ und Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}$ die dissipierte Leistung zu berechnen, ohne die für die gewählte Trajektorie notwendige Feldkonfiguration zu kennen. Die Trajektorie $\mathbf{M}(t)$ einer elliptischen Kleinwinkelpräzession um die z-Achse hat die Gestalt

$$\mathbf{M}(t) = \begin{pmatrix} m\,a\sin(\omega t) \\ -m\,b\cos(\omega t) \\ \sqrt{M^2 - m^2} \end{pmatrix}, \tag{4.19}$$

mit $m \ll M$ und $a^2 + b^2 = 2$. Verwendet man diese Trajektorie und eine Dämpfungsmatrix der Form (4.4) ergibt sich mit (4.18)

$$P = -\frac{1}{\gamma M}m^2\omega^2\frac{a^2A_1 + b^2A_2}{2}\,. \tag{4.20}$$

In den obigen Betrachtungen wurde die Feldkonfiguration $\mathbf{H}_{\mathrm{dc}} + \mathbf{H}_{\mathrm{ac}}(t)$ fest vorgegeben und die daraus resultierende Trajektorie durch Lösung von (4.9) berechnet. Die damit berechneten dissipierten Leistungen in (4.11)

[4] Dieser Zusammenhang ergibt sich, wenn man die Bewegungsgleichung durch das Dissipationsfunktional ableitet und mit der durch α beschriebenen Gilbertgleichung vergleicht, siehe [3].

und (4.15) enthalten somit die Größen H, h und ω, die die Eigenschaften der unabhängigen Felder $\mathbf{H}_{\mathrm{dc}}$ und $\mathbf{H}_{\mathrm{ac}}(t)$ beschreiben. Es kann dann ein Zusammenhang zwischen der Linienbreite ΔH (bei festem h und ω) und den Eigenwerten der Dämpfungsmatrix hergestellt werden.

Gibt man eine bestimmte Trajektorie vor, so enthält die dissipierte Leistung wie in (4.20) diejenigen unabhängig vorgegebenen Größen, die die Trajektorie beschreiben (hier a, b und ω). Die Definition einer Linienbreite ist dann nicht mehr sinnvoll. Die dissipierte Leistung in (4.20) ist von der Linearkombination $(a^2A_1 + b^2A_2)/2$ der Eigenwerte A_1 und A_2 bestimmt, die von der Elliptizität der Trajektorie abhängt.

Beschreibt man die Dämpfung nicht durch eine Dämpfungsmatrix, sondern durch einen effektiven Gilbert-Dämpfungsskalar A_{eff}^{ab}, erhält man bei elliptischer Trajektorie für die dissipierte Leistung pro Volumen:

$$P = -\frac{1}{\gamma M} m^2\omega^2 \frac{A_{\mathrm{eff}}^{ab}(a^2+b^2)}{2} = -\frac{1}{\gamma M} m^2\omega^2 A_{\mathrm{eff}}^{ab}\,. \tag{4.21}$$

Aus dem Vergleich von (4.20) und (4.21) findet man für den effektiven Dämpfungsskalar

$$A_{\mathrm{eff}}^{ab} = \frac{a^2A_1 + b^2A_2}{2}\,. \tag{4.22}$$

Für eine zirkulare Trajektorie ($a^2 = b^2 = 1$) ist der effektive Dämpfungsskalar gleich dem Mittelwert $A_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{zirk}} = \bar{A}$. Die dissipierte Leistung ist damit exakt durch $\bar{A}$ bestimmt. Dies ist konsistent mit den obigen Untersuchungen. Dort hängt die dissipierte Leistung und ihre Linienbreite nur näherungsweise von $\bar{A}$ ab, da für $A_1 \neq A_2$ die Trajektorie bei der vorgegebenen Feldkonfiguration nur näherungsweise zirkular ist. Der Ausdruck (4.11) kann im Resonanzfall ($\gamma H = \omega$) bei $A_1 = A_2 = A = \bar{A}$ in (4.20) für $m\,a = m\,b = \gamma M h/(A\omega)$ umgeformt werden, da in diesem Fall die Trajektorie bei zirkularem $\mathbf{H}_{\mathrm{ac}}(t)$ exakt zirkular ist.

5 Ergebnisse des „Matrix-Torque-Correlation-Modells“

In Kapitel 3.4.2 wurde eine Erweiterung des konventionellen von Kamberský eingeführten Torque-Correlation-Modells behandelt. In diesem verallgemeinerten „Matrix-Torque-Correlation-Modell“ kann eine Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{e})$ berechnet werden, die zwei nichtverschwindende, im Allgemeinen unterschiedliche von der Richtung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall abhängige Eigenwerte $\mathcal{A}_1(\mathbf{e})$ und $\mathcal{A}_2(\mathbf{e})$ besitzt. Die Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ enthält also sowohl die *orientational* als auch die *rotational* Anisotropie.

In [34] wird im Breathing-Fermi-Surface-Modell die Abhängigkeit der Eigenwerte der Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ bezüglich $\mathbf{e}$ und damit sowohl die *orientational* als auch die *rotational* Anisotropie untersucht. Die im Breathing-Fermi-Surface-Modell behandelte Dämpfung verhält sich bezüglich der Streurate *conductivity like* und dominiert bei niedrigen Streuraten [4], was im Experiment tiefen Temperaturen entspricht.

Die Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ enthält neben dem *breathing Fermi surface* Anteil (Intrabandanteil) auch den *bubbling Fermi surface* Anteil (Interbandanteil), der sich *resistivity like* bezüglich der Streurate verhält und bei hohen Streuraten (hohen Temperaturen) dominiert.

Ziel ist es nun, die Anisotropien der gesamten Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}$, deren Intrabandanteil und deren Interbandanteil in Abhängigkeit der Streurate numerisch zu untersuchen. Die numerischen Untersuchungen wurden in Zusammenarbeit mit K. Gilmore und M.D. Stiles [36] durchgeführt. Die Matrixelemente der Torque-Correlation-Formel TC^- (3.28) (oder TC^x, TC^y) werden mit der LAPW (linear augmented plane wave) Methode in LSDA berechnet. Details zur Rechenmethode sind in [4] zu finden. In Rechnungen, in denen die Magnetisierung nicht parallel zu einer Gleichgewichtsrichtung orientiert ist, wird diese durch Festhalten der Spinquantisierungsachse aufgrund des starken Austausch-Korrelationsfeldes in guter Näherung parallel zu dieser eingestellt.

5.1 Orientational Anisotropie

Um die *orientational* Anisotropie der Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{e})$ zu untersuchen wird mit der konventionellen Torque-Correlation-Formel TC^- für verschiedene Richtungen $\mathbf{e}$ der Magnetisierung ein effektiver Dämpfungsskalar berechnet, der die effektive Dämpfung bei einer zirkularen Kleinwinkelpräzession um die Richtung $\mathbf{e}$ beschreibt. Es gilt dabei:

$$\frac{1}{\gamma M}\mathrm{TC}^- = \frac{1}{\gamma M}(\frac{1}{2}\mathrm{TC}^y + \frac{1}{2}\mathrm{TC}^x) = \frac{1}{2}(\mathcal{A}_{xx} + \mathcal{A}_{yy}) = \frac{1}{2}(\mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2) = \mathcal{A}_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{zirk}}\,. \tag{5.1}$$

Dabei wird beim ersten Gleichheitszeichen verwendet, dass sich die Torque-Correlation-Formel TC^-, die $\hat{\sigma}^-$ enthält, als Summe zweier Torque-Correlation-Formeln schreiben lässt, die $\hat{\sigma}_x$ und $\hat{\sigma}_y$ enthalten[1]. Beim zweiten Gleichheitszeichen wurde das Ergebnis des „Matrix-Torque-Correlation-Modells“ aus Kapitel 3.4.2 eingesetzt. Danach wurde angenommen, dass das x-y-Koordinatensystem dem Hauptachsensystem der Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ entspricht (dies ist bei den numerischen Resultaten durch die in 3.4.2 beschriebene Hauptachsentransformation der Fall). Das letzte Gleichheitszeichen zeigt, dass der durch TC^- berechnete Dämpfungsskalar dem in 4.3 definierten effektiven Dämpfungsskalar $\mathcal{A}_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{zirk}}$ entspricht.

In Abbildung 5.1 ist $\mathcal{A}_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{zirk}}(\mathbf{e})$ in den 3d-Übergangsmetallen fcc-Ni, hcp-Co und bcc-Fe für jeweils drei verschiedene Richtungen $\mathbf{e}$ im Kristall, um die jeweils die Kleinwinkelpräzession stattfindet, über der Streurate τ^{-1} aufgetragen. Es ist sowohl der Intrabandanteil und Interbandanteil einzeln, als auch der gesamte effektive Dämpfungsparameter $\mathcal{A}_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{zirk}}$ gezeigt.

In allen drei betrachteten Materialien findet man folgendes Verhalten: Der *conductivity like* Intrabandanteil zeigt bei allen Streuraten eine *orientational* Anisotropie. Beim *resistivity like* Interbandanteil ist bei niedrigen Streuraten (tiefen Temperaturen) die *orientational* Anisotropie zu finden. Mit zunehmender Streurate (höhere Temperaturen) verschwindet diese Anisotropie.

Dies lässt sich wie folgt erklären. Die *orientational* Anisotropie des Interbandanteils entsteht dadurch, dass für verschiedene Richtungen der

[1] Der Faktor 1/2 entsteht, da TC^x und TC^y in Kapitel 3.4.2 mit $\sqrt{2}\hat{\sigma}_x$ und $\sqrt{2}\hat{\sigma}_y$ definiert wurden.

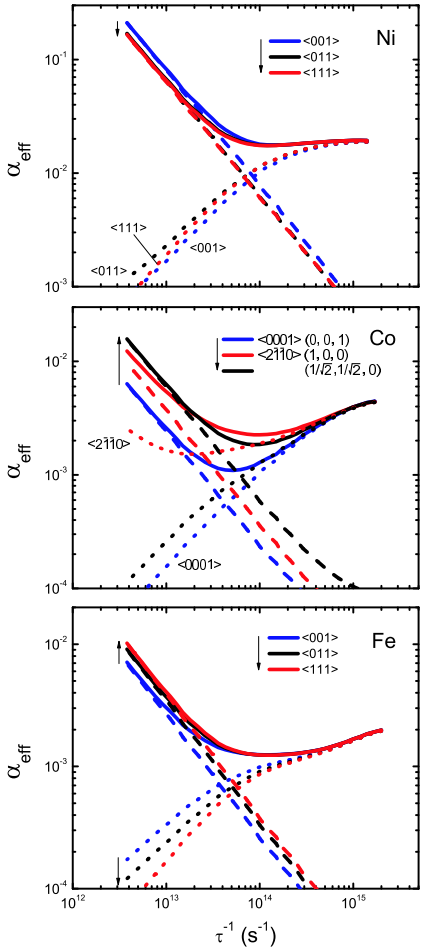

Abbildung 5.1: Effektiver Dämpfungsparameter $\mathcal{A}_{\text{eff}}^{\text{zirk}}$ bei zirkularer Präzession um verschiedene Richtungen im Kristall in Ni, Co und Fe, aufgetragen über der Streurate τ^{-1}. *Conductivity like* Intrabandanteil: gestrichelte Linien, *resistivity like* Interbandanteil: gepunktete Linien und gesamter Dämpfungsparameter: durchgezogene Linien. [36] Copyright (2010) by the American Physical Society.

Magnetisierung, die elektronische Bandstruktur aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung verschieden ist und dadurch für verschiedene Richtungen unterschiedliche Interbandübergänge möglich sind. Wird für höhere Streuraten τ^{-1} die Lebensdauerverbreiterung $\hbar\tau^{-1}$ der Einelektronenenergien vergleichbar oder größer als der Unterschied der Einelektronenenergien für verschiedene Richtungen, verschwindet diese Anisotropie.

Da der Interbandanteil bei großen Streuraten dominiert, wird $\mathcal{A}_{\text{eff}}^{\text{zirk}}$ in allen Materialien bei genügend hohen Streuraten (Temperaturen) isotrop. Bei welcher Temperatur dies im Experiment geschieht, hängt vom betrachteten Material ab.

Wie in Kapitel 4 und in [44] gezeigt wird, ist die Linienbreite ΔH der dissipierten Leistung bei der Ferromagnetischen Resonanz durch $\mathcal{A}_{\text{eff}}^{\text{zirk}}$ bestimmt. In [41] wird ΔH in Ni temperaturabhängig bestimmt. Es wird dort sowohl der *conductivity like* Anteil als auch der *resistivity like* Anteil beobachtet, wobei ersterer bis über die Raumtemperatur hinaus dominiert. In [45, 46] wird in Ni eine *orientational* Anisotropie in der Linienbreite ΔH gemessen. Dabei wächst in [45] bei T=4K die Linienbreite gemäß $(\Delta H)_{\langle 001\rangle} < (\Delta H)_{\langle 111\rangle} < (\Delta H)_{\langle 011\rangle}$ an und bei T=77K gemäß $(\Delta H)_{\langle 111\rangle} < (\Delta H)_{\langle 001\rangle} < (\Delta H)_{\langle 011\rangle}$. In den obigen Untersuchungen findet man für den Intrabandanteil von $\mathcal{A}_{\text{eff}}^{\text{zirk}}$ in Ni $\mathcal{A}_{\text{eff},\langle 111\rangle}^{\text{zirk}} < \mathcal{A}_{\text{eff},\langle 011\rangle}^{\text{zirk}} < \mathcal{A}_{\text{eff},\langle 001\rangle}^{\text{zirk}}$. Eine mögliche Ursache für den Unterschied zwischen den Ergebnissen in [45] und den hier durchgeführten Untersuchungen ist die Tatsache, dass in LSDA die Austauschaufspaltung und die leichte Richtung der magnetokristallinen Anisotropieenergie in Ni nicht richtig berechnet wird [47].

5.2 Rotational Anisotropie

Um die Abhängigkeit der *rotational* Anisotropie von der Streurate zu untersuchen, werden hier (und in [36]) die Eigenwerte $\mathcal{A}_1 = 1/(\gamma M)\text{TC}^y$ und $\mathcal{A}_2 = 1/(\gamma M)\text{TC}^x$ in Ni, Co und Fe für jeweils eine nichthochsymmetrische Richtung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall berechnet.

Außerdem wird der effektive Dämpfungsparameter $\mathcal{A}_{\text{eff}}^{ab}$ für eine elliptische Kleinwinkelpräzession (4.19) um $\mathbf{e}$ berechnet. Die FMR-Linienbreite ist von $\mathcal{A}_{\text{eff}}^{ab}$ bestimmt, wenn die Präzession nicht zirkular, sondern elliptisch ist. $\mathcal{A}_{\text{eff}}^{ab}$ lässt sich sowohl aus den Eigenwerten $\mathcal{A}_1$ und $\mathcal{A}_2$ gemäß Gleichung (4.22) oder aus einer abgewandelten Torque-Correlation-Formel

wie folgt berechnen:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\gamma M}\mathrm{TC}^{ba} &= \frac{1}{\gamma M}\left(\frac{a^2}{2}\mathrm{TC}^{y} + \frac{b^2}{2}\mathrm{TC}^{x}\right) = \frac{1}{2}(a^2\mathcal{A}_{xx} + b^2\mathcal{A}_{yy}) \\ &= \frac{1}{2}(a^2\mathcal{A}_1 + b^2\mathcal{A}_2) = \mathcal{A}^{ab}_{\mathrm{eff}}\,. \end{aligned} \tag{5.2}$$

Dabei entspricht TC^{ba} der konventionellen Torque-Correlation-Formel (3.28) in der $\hat{\sigma}^-$ durch $b\,\hat{\sigma}_x - a\,i\hat{\sigma}_y$ ersetzt ist. $\mathcal{A}^{ab}_{\mathrm{eff}}$ wird für folgende Elliptizitäten berechnet:

$$\begin{aligned}(a,b) &= (\sqrt{2},0) && \rightarrow \mathcal{A}_1 \\ (a,b) &= (\sqrt{3/2},\sqrt{1/2}) \\ (a,b) &= (1,1) && \rightarrow \mathcal{A}^{\mathrm{zirk}}_{\mathrm{eff}} \\ (a,b) &= (\sqrt{1/2},\sqrt{3/2}) \\ (a,b) &= (0,\sqrt{2}) && \rightarrow \mathcal{A}_2\,. \end{aligned} \tag{5.3}$$

In fcc-Ni und bcc-Fe wird $\mathbf{e}$ parallel zur Richtung $\langle 011\rangle$ gewählt. Bei den Untersuchungen in hcp-Co ist $\mathbf{e}$ durch die Richtung $(1,0,1)/\sqrt{2}$ gegeben, wobei ein Koordinatensystem verwendet wird, in dem $(0,0,1)$ parallel zur c-Achse ist und $(1,0,0)$ zum nächsten Nachbaratom zeigt. Wählt man diese Richtungen $\mathbf{e}$ jeweils als z-Achse, so sind in Ni und Fe die x- und y-Achse parallel zu $[0\bar{1}1]$ und $[100]$ gewählt. In Co sind die x- und y-Achse parallel zu $(-1,0,1)/\sqrt{2}$ und $(0,1,0)$ gewählt.

In Abbildung (5.2) sind die effektiven Dämpfungsparameter $\mathcal{A}^{ab}_{\mathrm{eff}}$ für die in (5.3) angegebenen Elliptizitäten in den drei Materialien über der Streurate aufgetragen. Auch hier ist jeweils der Intrabandanteil und Interbandanteil einzeln und der gesamte Dämpfungsparameter $\mathcal{A}^{ab}_{\mathrm{eff}}$ gezeigt. Man findet ein ähnliches Verhalten wie bei der Untersuchung der *orientational* Anisotropie. Der *conductivity like* Intrabandanteil zeigt in allen drei Systemen bei allen Streuraten eine *rotational* Anisotropie. Im *resistivity like* Interbandanteil ist diese nur bei niedrigen Streuraten vorhanden. Bei genügend hohen Streuraten, bei denen der Interbandanteil dominiert, findet man also sowohl im Interbandanteil als auch im gesamten Dämpfungsparameter keine *rotational* Anisotropie.

Damit wurde gezeigt, dass beide in der Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{e})$ enthaltenen Anisotropien bei niedrigen Streuraten (tiefen Temperaturen), bei

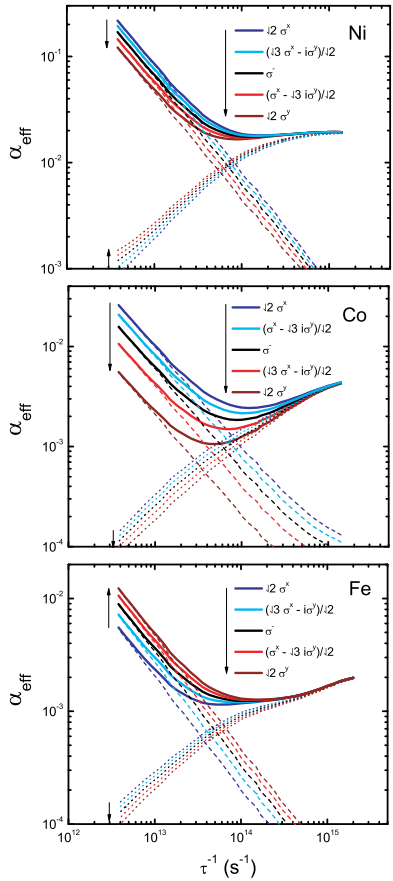

Abbildung 5.2: Eigenwerte $\mathcal{A}_1$ und $\mathcal{A}_2$ der Dämpfungsmatix $\boldsymbol{\mathcal{A}}$, sowie der effektive Dämpfungsparameter $\mathcal{A}_{\text{eff}}^{ab}$ bei elliptischer Präzession in Ni, Co und Fe, aufgetragen über der Streurate τ^{-1}. Die Richtungen im Kristall für die die Eigenwerte berechnet wurden, bzw. um die die Präzession stattfindet sind im Text gegeben. *Conductivity like* Intrabandanteil: gestrichelte Linien, *resistivity like* Interbandanteil: gepunktete Linien und gesamter Dämpfungsparameter: durchgezogene Linien. [36] Copyright (2010) by the American Physical Society.

denen der Intrabandanteil dominiert eine Rolle spielen, während diese bei genügend hohen Streuraten (hohen Temperaturen), bei denen der Interbandanteil dominiert verschwinden. Bei welchen Streuraten (Temperaturen) dieser Übergang stattfindet, ist vom betrachteten System abhängig.

6 Ergebnisse des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells in 3d-Übergangsmetallen

In diesem Kapitel werden die Eigenschaften der Dämpfungsmatrizen im verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modell in den 3d-Übergangsmetallen Fe, Ni und Co numerisch untersucht. Um die Eigenschaften der Dämpfungsmatrizen darzustellen, werden stets deren Eigenwerte bis auf den phänomenologischen Faktor der Relaxationszeit τ berechnet. Wie bereits oben erklärt, kann im Breathing-Fermi-Surface-Modell nur der elektronische Anteil untersucht werden, der die treibende Kraft beschreibt, welche für die Anregung von Intraband-Elektron-Loch-Paaren verantwortlich ist. Wenn im Folgenden über numerische Ergebnisse für die Dämpfungsmatrix gesprochen wird, sind damit die Eigenwerte des elektronischen Anteils gemeint.

Die numerischen Untersuchungen finden alle an periodischen Systemen statt. Eine kollineare Konfiguration und Dynamik in Volumenmaterialien kann dadurch recht realitätsnah beschrieben werden, bis auf die Tatsache, dass der Kristall nicht endlich ist. Möchte man eine nichtkollineare Konfiguration und Dynamik untersuchen, so muss diese wie bereits in Abschnitt 3.3.4 erklärt in eine Einheitszelle eingebettet werden. Um eine realitätsnahe nichtkollineare Konfiguration und Dynamik zu untersuchen, wie sie auch im Experiment beobachtet werden könnte, müsste man diese in eine extrem große Superzelle einbetten, wodurch der numerische Aufwand nicht mehr beherrschbar wäre. Durch die hier durchgeführten Rechnungen an nichtkollinearen Systemen sollen vielmehr grundsätzliche Eigenschaften der Theorie des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells beleuchtet werden.

In den betrachteten periodischen Systemen sind die Einelektronenzustände Blochzustände mit Bandindex j und Wellenvektor $\mathbf{k}$. Die Einelektronenenergien $\varepsilon_{j\mathbf{k}}(\{\mathbf{e}_\mathbf{R}\})$ hängen dann von den Richtungen $\{\mathbf{e}_\mathbf{R}\}$ aller atomaren magnetischen Momente in der verwendeten Einheitszelle ab. Die Summe über $\mathbf{R}'$ in der Bewegungsgleichung (3.13) läuft über alle Atomorte in der Einheitszelle. Die Summe über alle Einelektronenzustände i im Ausdruck (3.15) und (3.23) für die Dämpfungsmatrix wird zu einer Summe über alle Bandindizes j und einem Integral über die Wellenvektoren $\mathbf{k}$ in der ersten Brillouinzone:

$$\sum_i \ldots \quad \rightarrow \quad \sum_j \int\limits_{1.\mathrm{BZ}} \frac{\mathrm{d}^3 k}{V_{\mathrm{BZ}}} \ldots \quad \text{mit} \quad V_{\mathrm{BZ}} = \frac{(2\pi)^3}{V_\Omega}\,. \tag{6.1}$$

Die atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ hängen von den Ableitungen $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\mathbf{e}_\mathbf{R}$ und $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}$ der Einelektronenenergien nach den Richtungen der Momente ab. In kollinearen Systemen, in denen die Dynamik durch das Moment der Einheitszelle mit der Richtung $\mathbf{e}$ beschrieben werden kann, hängt die Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}$ von den Ableitungen $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\mathbf{e}$ der Einelektronenenergien nach der Richtung des Zellmoments ab. Die Ableitungen $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\mathbf{e}_\mathbf{R}$ und $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\mathbf{e}$ werden im Folgenden durch das in [5, 6] und Kapitel 2.5.2 vorgestellte Magnetic-Force-Theorem numerisch berechnet.

In allen Rechnungen wird das Austauschkorrelationsfunktional nach [48] in LSDA (Local Spin Density Approximation) verwendet. Die zur Lösung der Kohn-Sham-Gleichungen angewandte Bandstrukturmethode ist die sogenannte LMTO-Methode (Linear Muffin Tin Orbital method) [49]. Dabei wird die ASA (Atomic Sphere Approximation) sowohl für das skalare Potential als auch die Spin-ASA für die Spinquantisierungsachse verwendet (siehe Kapitel 2.4.1). In kollinearen Systemen wird die nach [50] implementierte Behandlung der Spin-Bahn-Kopplung benutzt. Nichtgrundzustandskonfigurationen, also kollineare Konfigurationen nicht parallel zur leichten Achse oder nichtkollineare Konfigurationen werden durch Lagrange-Zwangsfelder [17] erzwungen.

Die berechneten Ableitungen $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\mathbf{e}_\mathbf{R}$ und $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\mathbf{e}$ beinhalten nur Effekte von intrinsischen Wechselwirkungen, also der Austauschwechselwirkung und der Spin-Bahn-Kopplung. Wechselwirkungen mit einem externen Magnetfeld sind nicht enthalten. Die betrachteten Dämpfungseffekte entstehen also durch das Atmen der Fermifläche aufgrund interner Wechselwirkungen. Da die Dämpfungsmatrizen Materialparameter darstellen,

die hier zwar auch von der Konfiguration des Materials abhängen, ist es sicher sinnvoll, dass diese nicht von externen Wechselwirkungen abhängig bestimmt werden. Es wird angenommen, dass die so berechneten Dämpfungsmatrizen auch für eine beliebige Dynamik, von externen Feldern getrieben, die Dissipation aufgrund intrinsischer Wechselwirkungen beschreiben. Lagrange-Zwangsfelder gehen zwar formal wie externe Felder in das Energiefunktional ein [10, 11], kompensieren aber die intrinsischen Felder so, damit die gewünschte Konfiguration Grundzustand des Funktionals ist. Es ist nicht möglich, ein beliebiges externes Magnetfeld anzulegen und gleichzeitig eine beliebige Konfiguration der Richtungen $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ festzulegen.

Das verallgemeinerte Breathing-Fermi-Surface-Modell [5, 6] behandelt kollineare und nichtkollineare Konfigurationen gleichermaßen. Bevor nichtkollineare Systeme untersucht werden, ist es sinnvoll im verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modell kollineare Systeme zu betrachten und die Ergebnisse mit denen des herkömmlichen Breathing-Fermi-Surface-Modells [10, 34, 37] für kollineare Konfigurationen, wo die Ableitungen der Einelektronenenergien mit einer Torque-Operator-Methode berechnet werden, zu vergleichen. Dieser Vergleich wird im folgenden Abschnitt 6.1 und in [16] für kollineare Konfigurationen in bcc-Fe, fcc-Ni, hcp-Co und einer monoatomaren hcp-Co-Schicht erfolgreich durchgeführt. In Abschnitt 6.1 und in [16] wird auch die Berechnung der atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ in den behandelten kollinearen Systemen erfolgreich getestet.

Im Abschnitt 6.2 werden grundsätzliche Eigenschaften der atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ in einfachsten nichtkollinearen Systemen untersucht. In einem System mit zwei verkippten atomaren Momenten wird gezeigt, dass der elektronische Anteil der Dämpfungsmatrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ betragsmäßig bereits bei sehr kleinen Zwischenwinkeln sehr viel größer ist als in kollinearen Konfigurationen. An einem System, das aus zwei verkippten atomaren Momenten eingebettet in einer ferromagnetischen Superzelle besteht, wird die Nichtlokalität der Dämpfungsmatrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ untersucht.

6.1 Kollineare Konfigurationen in Fe, Ni und Co

In kollinearen Konfigurationen zeigen alle atomaren magnetischen Momente in dieselbe Richtung, d.h. $\mathbf{e}_{\mathbf{R}} = \mathbf{e}$. Beschreibt man diese durch periodische Systeme mit Superzellen die N atomare magnetische Momente an den Orten $\mathbf{R}$ beinhalten, kann man ein magnetisches Moment $\mathbf{M}_{\Omega} =$

$\sum_{\mathbf{R}} M_{\mathbf{R}}\mathbf{e}_{\mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{R}} M_{\mathbf{R}}\mathbf{e} = M_{\Omega}\mathbf{e}$ der Superzelle einführen.

Eine kollineare Dynamik in kollinearen Konfigurationen kann durch die Dynamik der Richtung $\mathbf{e}$ des Zellmoments oder durch die Dynamik der Richtungen $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ der atomaren magnetischen Momente in der Superzelle beschrieben werden. Für die Richtung des Zellmoments gilt die Bewegungsgleichung (3.22) mit der Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$, wobei M im Ausdruck (3.23) durch den Betrag des Zellmoments M_{Ω} zu ersetzen ist. Für die Richtungen $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ der atomaren magnetischen Momente gilt die Bewegungsgleichung (3.13) mit den Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\mathbf{e})$ (3.15) und der Nebenbedingung $\mathbf{e}_{\mathbf{R}'} = \mathbf{e}_{\mathbf{R}}\,\forall\,\mathbf{R}'$ und $\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}/\mathrm{d}t = \mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}}/\mathrm{d}t\,\forall\,\mathbf{R}'$. Aus dem Vergleich der beiden Bewegungsgleichungen [16] erhält man die Beziehung (3.25) zwischen der Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ des Zellmoments und den atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\mathbf{e})$.

Die Matrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ besitzt zwei nichtverschwindende Eigenwerte $A_p(\mathbf{e})$ mit $p = 1, 2$, die aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung von der Richtung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall abhängen. Diese Abhängigkeit wird in [34] und [16] in den Volumenmaterialien bcc-Fe, fcc-Ni, hcp-Co und einer monoatomaren hcp-Co Schicht und in [34] auch in weiteren monoatomaren Schichten und Drähten untersucht. In [34] werden die Ableitungen $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\mathbf{e}$ der Einelektronenenergien nach der Richtung $\mathbf{e}$ des Zellmoments ausschließlich mit der darin beschriebenen Torque-Operator-Methode als Erwartungswert eines Torque-Operators im Rahmen des herkömmlichen Breathing-Fermi-Surface-Modell für ausschließlich kollineare Konfigurationen berechnet.

In [16] und im Folgenden werden die Ableitungen $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\mathbf{e}$ mit dem in [5] dargestellten Magnetic-Force-Theorem numerisch berechnet, die Eigenwerte $A_p(\mathbf{e})$ in Abhängigkeit von $\mathbf{e}$ ermittelt und mit Ergebnissen der Torque-Operator-Methode verglichen. Details zur Torque-Operator-Methode sind in [10, 34, 52] nachzulesen.

Das verwendete Energiefunktional und die benutzte Bandstrukturmethode wurde bereits oben genannt. In [34] wird zusätzlich zur Spin-Bahn-Kopplung der sogenannte Orbital-Polarization-Term [51] verwendet. Da mit diesem Term die Berechnung der atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\mathbf{e})$ nicht möglich ist, wird dieser hier und in [16] nicht verwendet. Dies erklärt den quantitativen Unterschied zwischen den Ergebnissen in [34] einerseits und den Ergebnissen hier und in [16] andererseits für sonst identische Systeme und Methoden zur Berechnung der Ableitungen $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\mathbf{e}$.

6.1.1 Numerische Ergebnisse in fcc-Ni

Die numerischen Ergebnisse für fcc-Ni sind mit der einatomigen primitiven Einheitszelle erzielt. Bei der numerischen Integration im reziproken Raum wird die erste Brillouinzone so in ein Stützstellennetz eingeteilt, dass entlang der reziproken Gittervektoren 40 Stützstellen vorhanden sind. Die Integration ist also durch eine Summation über 40^3 k-Punkte ersetzt. Die Fermifunktion der Besetzungszahlen wird mit der Gauß'schen Verschmierungsmethode zur Verbesserung der Konvergenz verschmiert. Der Verschmierungsparameter beträgt wie in allen anderen numerischen Unteruchungen dieses Kapitels 5 mRy. Die berechneten Eigenwerte $A_p(\mathbf{e})$ sind damit bezüglich der verwendeten Parameter bei der k-Raumintegration, aufgrund des numerischen Aufwandes quantitativ nicht vollständig auskonvergiert [34, 52]. Die gemachten Aussagen über die Anisotropie bezüglich $\mathbf{e}$ und der Vergleich zwischen Torque-Operator-Methode und Magnetic-Force-Theorem bleiben davon aber unbeeinflusst. Dies gilt für alle Ergebnisse dieses Abschnitts.

Abbildung 6.1 zeigt die Eigenwerte $A_p(\mathbf{e})$ der Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ für das Zellmoment in fcc-Ni in Abhängigkeit von der Richtung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall. Sie sind in Einheiten von $M_\Omega/\gamma\tau \cdot \mu_\mathrm{B}^2/V_\Omega\hbar^2$ aufgetragen, da τ ein phänomenologischer Parameter im Breathing-Fermi-Surface-Modell ist, der nicht ab-initio berechnet wird. V_Ω ist das Volumen der verwendeten Einheitszelle. Die Eigenwerte $A_p(\mathbf{e})$ sind sowohl mit der Torque-Operator-Methode als auch mit dem Magnetic-Force-Theorem berechnet.

6.1.2 Numerische Ergebnisse in bcc-Fe

Die Eigenwerte der Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ werden hier und in [16] sowohl mit der Torque-Operator-Methode als auch mit dem Magnetic-Force-Theorem für die einatomige primitive Einheitszelle berechnet. Dabei wird bei der k-Raumintegration ein Stützstellennetz von 40^3 k-Punkten verwendet. Die Eigenwerte $A_p(\mathbf{e})$ sind in Abbildung 6.2 über der Richtung $\mathbf{e}$ in Einheiten von $M_\Omega/\gamma\tau \cdot \mu_B^2/V_\Omega\hbar^2$ aufgetragen.

In einer zweiatomigen Einheitszelle werden im Rahmen des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells mit dem Magnetic-Force-Theorem die Eigenwerte der atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\mathbf{e})$ berechnet. Diese sind in Abbildung 6.3 über der Richtung $\mathbf{e}$ aufgetragen (untere Kurven).

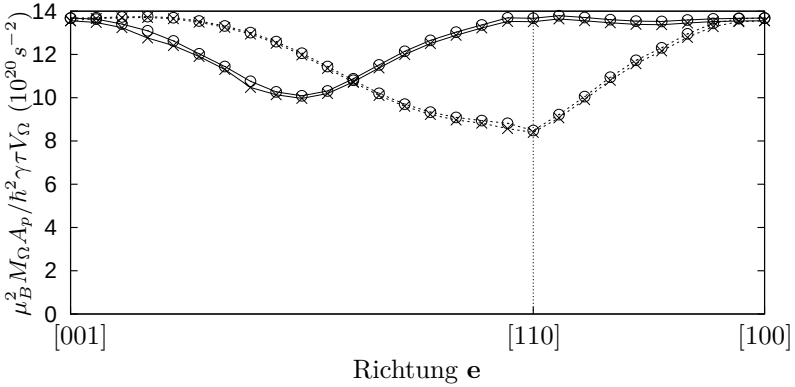

Abbildung 6.1: fcc-Ni: Eigenwerte A_p der Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ für das Zellmoment, berechnet mit dem Magnetic-Force-Theorem (Symbol $\times$) und mit der Torque-Operator-Methode (Symbol $\circ$). Die beiden Eigenwerte sind jeweils durch die gestrichelte und durchgezogene Linie gegeben.

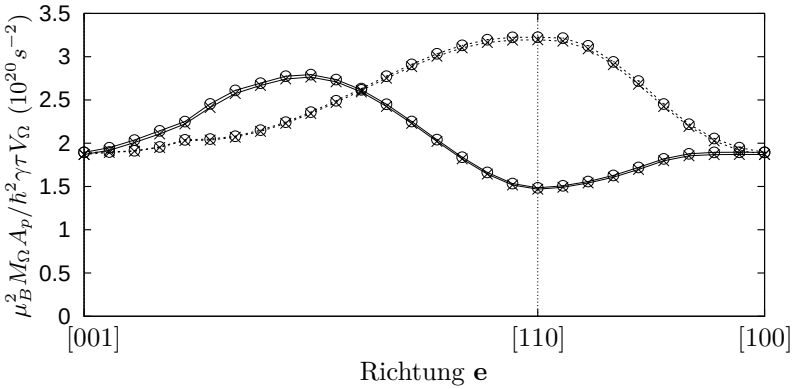

Abbildung 6.2: bcc-Fe: Eigenwerte A_p der Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ für das Zellmoment, berechnet mit dem Magnetic-Force-Theorem (Symbol $\times$) und mit der Torque-Operator-Methode (Symbol $\circ$). Die beiden Eigenwerte sind jeweils durch die gestrichelte und durchgezogene Linie gegeben. [16] Copyright (2009) by the American Physical Society.

Um die berechneten Werte für $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\mathbf{e})$ zu überprüfen, werden auch die Eigenwerte der Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ des Zellmoments berechnet. Diese sind in Abbildung 6.3 zusammen mit der rechten Seite der Beziehung (3.25) über $\mathbf{e}$ aufgetragen (obere Kurven).

Die Eigenwerte sind in Abbildung 6.3 in Einheiten von $M_{\Omega/\mathbf{R}}/\gamma\tau \cdot \mu_B^2/V_{\Omega/\mathbf{R}}\hbar^2$ aufgetragen, wobei $M_{\Omega/\mathbf{R}}$ bzw. $V_{\Omega/\mathbf{R}}$ in der Auftragung der atomaren Matrizen und der Auftragung der rechten Seite von (3.25) der Betrag $M_{\mathbf{R}}$ der atomaren Momente bzw. das Volumen $V_{\mathbf{R}}$ der Atomkugel ist und in der Auftragung der Zellmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ der Betrag M_Ω des Zellmoments bzw. das Zellvolumen V_Ω ist.

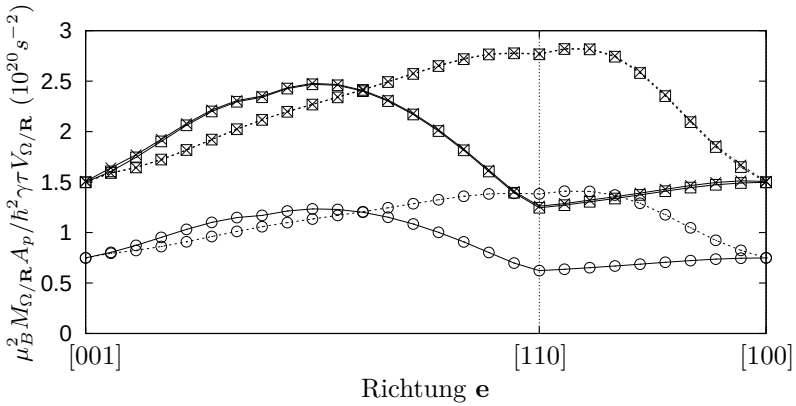

Abbildung 6.3: bcc-Fe: Eigenwerte A_p der Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ für das Zellmoment der zweiatomigen Einheitszelle (Symbol $\times$). Eigenwerte A_p der atomaren Dämpfungsmatrizen: $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} = \mathbf{A}_{\mathbf{R}',\mathbf{R}} = \mathbf{A}_{\mathbf{R}',\mathbf{R}'} = \mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}}$ (Symbol $\circ$). Rechte Seite der Beziehung (3.25) (Symbol $\square$). Die beiden Eigenwerte sind jeweils durch die gestrichelte und durchgezogene Linie gegeben. [16] Copyright (2009) by the American Physical Society.

Die Rechnungen in der zweiatomigen Einheitszelle sind mit $40^2 \cdot 20$ k-Punkten bei der Integration im reziproken Raum durchgeführt. Die Dichte der k-Punkte stimmt also in den Rechnungen für die einatomige und zweiatomige Einheitszelle überein, die verwendeten k-Punkte sind aber nicht äquivalent gewählt. Da beide Rechnungen bezüglich der Anzahl der k-

Punkte nicht auskonvergiert sind, unterscheiden sich die Kurven (×) in Abbildung 6.2 leicht von den Kurven (×) in Abbildung 6.3, obwohl beide die gleichen physikalischen Größen zeigen.

6.1.3 Numerische Ergebnisse in hcp-Co

Bei der Untersuchung des Volumenmaterials hcp-Co wird mit der zweiatomigen primitiven Einheitszelle gerechnet. Entlang der c-Achse werden bei der k-Raumintegration 15 Stützstellen verwendet, senkrecht dazu 24 k-Punkte.

In [16] und hier werden sowohl die Eigenwerte der Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ für das Zellmoment als auch die Eigenwerte der atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\mathbf{e})$ numerisch mit dem Magnetic-Force-Theorem berechnet. Die Eigenwerte der Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ werden auch mit der Torque-Operator-Methode bestimmt.

Die Eigenwerte $A_p(\mathbf{e})$ der Zellmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$, berechnet mit beiden Methoden, sind in Abbildung 6.4 in Einheiten von $M_\Omega/\gamma\tau \cdot \mu_\mathrm{B}^2/V_\Omega\hbar^2$ über $\mathbf{e}$ aufgetragen. Außerdem zeigt Abbildung 6.4 die rechte Seite der Gleichung (3.25) in Einheiten von $M_\mathbf{R}/\gamma\tau \cdot \mu_\mathrm{B}^2/V_\mathbf{R}\hbar^2$, die durch eine Summation der atomaren Matrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\mathbf{e})$ entsteht. Die Eigenwerte der atomaren Matrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\mathbf{e})$ sind in Abbildung 6.5 in Einheiten von $M_\mathbf{R}/\gamma\tau \cdot \mu_\mathrm{B}^2/V_\mathbf{R}\hbar^2$ über der Richtung $\mathbf{e}$ aufgetragen.

Konvergenzbetrachtungen

In Abschnitt 6.2.1 wird der elektronische Anteil der atomaren Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ für eine nichtkollineare Konfiguration in hcp-Co berechnet. Dieser soll mit dem elektronischen Anteil der Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ der hier behandelten kollinearen Konfiguration in hcp-Co quantitativ verglichen werden. Im Hinblick auf diesen Größenvergleich wird an dieser Stelle das Konvergenzverhalten bezüglich der Integrationsparameter bei der numerischen Integration im k-Raum untersucht. Die Richtung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung ist dabei parallel zur c-Achse orientiert. Abbildung 6.6 zeigt den Eigenwert A der Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}$ aufgetragen über die Anzahl k_z der k-Punkte in Richtung parallel zur c-Achse. Für die Anzahl der k-Punkte in der Ebene senkrecht dazu gilt jeweils $k_x = k_y = 8/5 \cdot k_z$. Das Produkt aus k_z und Gauß-Verschmierung σ ist festgehalten, $k_z\sigma = 0.05\,\mathrm{Ry}$.

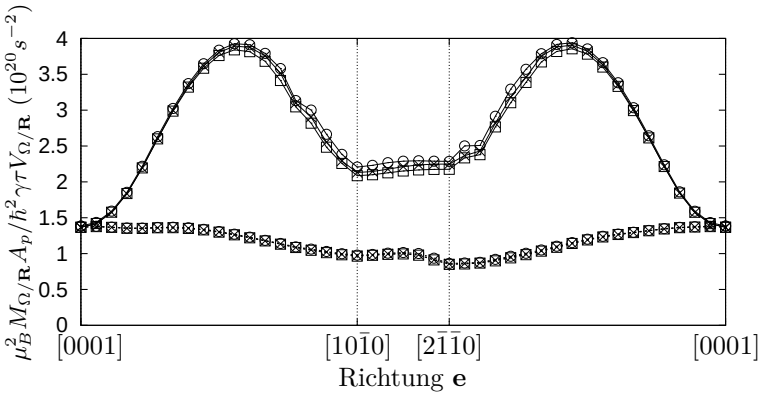

Abbildung 6.4: hcp-Co: Eigenwerte A_p der Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ für das Zellmoment, berechnet mit dem Magnetic-Force-Theorem (Symbol $\times$) und mit der Torque-Operator-Methode (Symbol $\circ$). Rechte Seite der Gleichung (3.25) (Symbol $\square$). Die beiden Eigenwerte sind jeweils durch die gestrichelte und durchgezogene Linie gegeben. [16] Copyright (2009) by the American Physical Society.

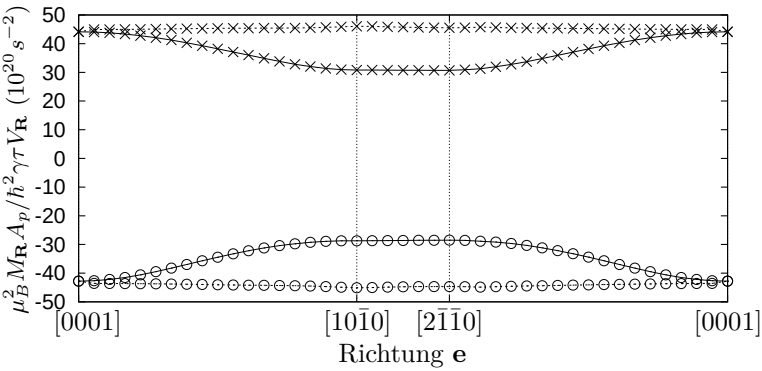

Abbildung 6.5: hcp-Co: Eigenwerte A_p der atomaren Dämpfungsmatrizen: $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} = \mathbf{A}_{\mathbf{R}',\mathbf{R}}$ (Symbol $\circ$), $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}} = \mathbf{A}_{\mathbf{R}',\mathbf{R}'}$ (Symbol $\times$). Die beiden Eigenwerte sind jeweils durch die gestrichelte und durchgezogene Linie gegeben. [16] Copyright (2009) by the American Physical Society.

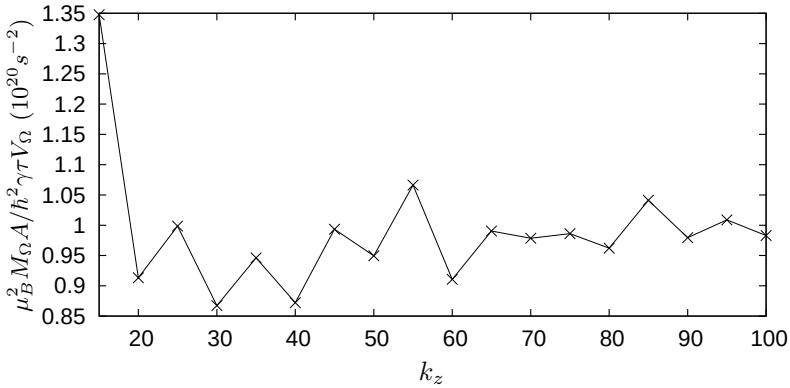

Abbildung 6.6: hcp-Co: Eigenwert der Dämpfungsmatrix **A** für das Zellmoment bei Orientierung der Magnetisierung parallel zur c-Achse, aufgetragen über die Anzahl k_z der k-Punkte parallel zur c-Achse, wobei $k_z\sigma = 0.05\,\mathrm{Ry}$ und $k_x = k_y = 8/5 \cdot k_z$ gilt.

6.1.4 Numerische Ergebnisse in monoatomarer hcp-Co Schicht

Die monoatomare Co-Schicht wird in den Rechnungen durch eine Superzelle realisiert, die ein Co-Atom und fünf darüber gestapelte Vakuumkugeln enthält, so dass durch periodische Fortsetzung eine hcp-Stapelung entsteht. Die daraus entstehende periodische Struktur besteht dann aus monoatomaren Co-Schichten, die durch Vakuum voneinander getrennt sind.

Sowohl mit der Torque-Operator-Methode als auch mit dem Magnetic-Force-Theorem werden die Eigenwerte der Dämpfungsmatrix für das magnetische Moment der gesamten Superzelle berechnet und in Abbildung 6.7 über der Richtung **e** aufgetragen. Außerdem werden die Eigenwerte der atomaren Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}_{\mathrm{Co,Co}}(\mathbf{e})$ mit dem Magnetic-Force-Theorem berechnet und ebenfalls in Abbildung 6.7 über **e** aufgetragen.

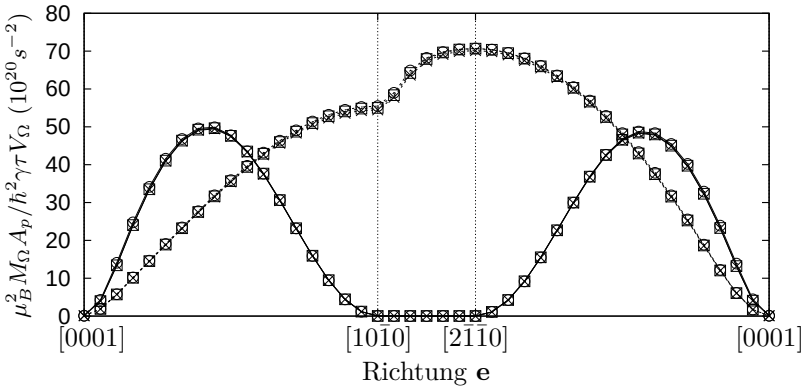

Abbildung 6.7: Co-Schicht: Eigenwerte A_p der Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ für das Zellmoment berechnet mit dem Magnetic-Force-Theorem (Symbol $\times$) und mit der Torque-Operator-Methode (Symbol $\circ$). Eigenwerte A_p der atomaren Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}_{\mathrm{Co,Co}}$ (Symbol $\square$). Die beiden Eigenwerte sind jeweils durch die gestrichelte und durchgezogene Linie gegeben. [16] Copyright (2009) by the American Physical Society.

6.1.5 Diskussion der Ergebnisse in kollinearen Konfigurationen

In allen betrachteten Systemen wurden die Eigenwerte der Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ für das magnetische Moment der Einheitszelle sowohl mit der Torque-Operator-Methode als auch im Rahmen des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells mit dem Magnetic-Force-Theorem berechnet. In allen Systemen stimmen die Ergebnisse der beiden Methoden sehr gut überein. Im Hinblick auf die Anwendung des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells auf nichtkollineare Systeme ist diese Übereinstimmung in kollinearen Systemen sehr wichtig, da nur hier ein Vergleich mit der bereits etablierten Torque-Operator-Methode möglich ist.

Ein erster Schritt hin zur Betrachtung von nichtkollinearen Systemen ist die Berechnung der lokalen ($\mathbf{R} = \mathbf{R}'$) und nichtlokalen ($\mathbf{R} \neq \mathbf{R}'$) atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\mathbf{e})$ in den kollinearen Systemen hcp-Co und bcc-Fe mit zweiatomiger Einheitszelle. Die numerischen Ergebnisse

erfüllen die theoretisch hergeleitete Beziehung (3.25) zwischen der Zellmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ einerseits und den atomaren Matrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\mathbf{e})$ andererseits (hcp-Co: Abbildung 6.4, bcc-Fe: Abbildung 6.3 (obere Kurven)). Dieser Vergleich zeigt, dass die Berechnung der atomaren Matrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\mathbf{e})$ mit dem im verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modell verwendeten Magnetic-Force-Theorem funktioniert.

Ein interessantes Ergebnis ist, dass in hcp-Co lokale atomare Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}}$ und nichtlokale atomare Matrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'\neq\mathbf{R}}$ unterschiedliches Vorzeichen besitzen (siehe Abbildung 6.5), während sie in bcc-Fe identisch sind (Abbildung 6.3 untere Kurven). Dieser Unterschied hat seine Ursache in der unterschiedlichen Gittersymmetrie der beiden Materialien. In bcc-Fe gilt für die Ableitungen der Energien der Blochzustände $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\mathbf{e}_{\mathbf{R}} = \partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\mathbf{e}_{\mathbf{R}'\neq\mathbf{R}}$. In hcp-Co gilt dies nicht. Da $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}}$ und $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'\neq\mathbf{R}}$ in hcp-Co unterschiedlich sind, liefern $\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}}/\mathrm{d}t$ und $\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}/\mathrm{d}t$ auch in einer kollinearen Konfiguration und Dynamik unterschiedliche Beiträge zum gesamten Dämpfungsterm am Ort $\mathbf{R}$. Dies führt jedoch nicht zu einer unterschiedlichen Dämpfung für die beiden Richtungen $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ und $\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}$ der magnetischen Momente in der hcp-Co Einheitszelle, da die gesamte Dämpfungsmatrix am Ort $\mathbf{R}$ und $\mathbf{R}'$ gleich ist ($\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}}+\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} = \mathbf{A}_{\mathbf{R}',\mathbf{R}}+\mathbf{A}_{\mathbf{R}',\mathbf{R}'}$). Dies ist nicht mehr der Fall, wenn man eine nichtkollineare Dynamik in einer momentan kollinearen Konfiguration betrachtet, wie sie z.B. bei der Anregung einer Spinwelle auftreten muss. Dann verursachen verschiedene Zeitableitungen $\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}}/\mathrm{d}t \neq \mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}/\mathrm{d}t$ unterschiedliche Dämpfungsterme an den Orten $\mathbf{R}$ und $\mathbf{R}'$.

Die verwendete Einheitszelle zur Beschreibung der monoatomaren Co-Schicht enthält ein Co-Atom aus dem durch periodisches Fortsetzen die Co-Schicht entsteht und fünf Leerkugeln, die das Vakuum zwischen den Schichten bilden. Abbildung 6.7 zeigt, dass die atomare Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}_{\mathrm{Co},\mathrm{Co}}$ nahezu vollständig mit der Dämpfungsmatrix für das Moment der Einheitszelle übereinstimmt. Die Wechselwirkung des Co-Atoms mit den Leerkugeln liefert also keinen Beitrag zur Dämpfung. Prinzipiell entstehen durch die Leerkugeln auf der rechten Seite der Gleichung (3.25) weitere Terme, da das Co-Atom ein verschwindend kleines magnetisches Moment in den Leerkugeln induziert.

6.2 Nichtkollineare Konfigurationen in Fe und Co

Im vorigen Abschnitt wurden Ergebnisse der Torque-Operator-Methode und des im verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modell verwendeten Magnetic-Force-Theorem in kollinearen Systemen verglichen. Der Vergleich zeigt, dass Rechnungen im Rahmen des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modell die Ergebnisse der Torque-Operator-Methode zuverlässig reproduzieren. Außerdem werden lokale und nichtlokale atomare Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ berechnet, die die theoretische Relation (3.25) erfüllen. Damit ist gezeigt, dass auch die Berechnung dieser Größen zuverlässig funktioniert.

In diesem vorliegenden Abschnitt werden lokale und nichtlokale atomare Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ in nichtkollinearen Konfigurationen numerisch berechnet. Es sollen damit die grundlegenden Eigenschaften des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells, d.h. der darin abgeleiteten Bewegungsgleichung und der darin enthaltenen Dämpfungsparameter in nichtkollinearen Konfigurationen untersucht werden.

Die Bewegungsgleichung des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells ist gegenüber der Gilbertgleichung mit konstantem skalaren Dämpfungsparameter in drei Punkten erweitert bzw. verallgemeinert. Die Dämpfung wird durch eine Matrix beschrieben. Dies verursacht in kollinearen Konfigurationen, wie in Abschnitt 3.3.4 und 4 beschrieben, eine Anisotropie der Dämpfung bezüglich $\mathrm{d}\mathbf{e}/\mathrm{d}t$. Zudem hängen die Dämpfungsmatrizen von der Konfiguration der Magnetisierung ab. In kollinearen Systemen äußert sich dies in einer Anisotropie bezüglich der Richtung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall. In Abschnitt 6.2.1 wird in einer einfachen nichtkollinearen Konfiguration die Abhängigkeit der atomaren Dämpfungsmatrizen vom Grad der Nichtkollinearität untersucht. Die dabei ausgerechneten atomaren Dämpfungsmatrizen sind von der Austauschwechselwirkung bestimmt und sind deshalb betragsmäßig sehr viel größer als die durch die Spin-Bahn-Kopplung bestimmten Dämpfungsmatrizen in kollinearen Systemen. Die dritte Erweiterung gegenüber der Gilbertgleichung ist die Nichtlokalität der Bewegungsgleichung. Aufgrund der nichtlokalen atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ hängt die Dämpfung am Ort $\mathbf{R}$ von der Dynamik $\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}/\mathrm{d}t$ an anderen Orten $\mathbf{R}'$ ab. Die lokalen und nichtlokalen atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ werden in Abschnitt 6.2.2 in einer

nichtkollinearen Superzellrechnung untersucht.

Die Rechnungen im Rahmen der elektronischen Dichtefunktionaltheorie werden in allen nichtkollinearen Systemen ohne Spin-Bahn-Kopplung durchgeführt. Es wird dabei der elektronische Anteil der Dämpfungsmatrix berechnet. Dieser beschreibt die treibende Kraft, die zur Bildung von Elektron-Loch-Paaren aufgrund einer atmenden Fermifläche bei zeitabhängiger Nichtkollinearität führt. Um bei der Relaxation Drehimpuls vom Spinsystem an das Gitter abzuführen, ist wie bereits oben erwähnt die Spin-Bahn-Kopplung notwendig. Diese ist dann phänomenologisch in der Relaxationzeit τ enthalten.

Die atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ in periodischen Systemen nehmen in Polarkoordinaten die folgende Form an:

$$\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} = -\frac{\gamma\tau}{M_{\mathbf{R}}} \sum_j \int\limits_{1.\mathrm{BZ}} \frac{\mathrm{d}^3k}{V_{\mathrm{BZ}}} \frac{\partial f_{j\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}} \frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{e}_{\mathbf{R}}} \otimes \frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{e}_{\mathbf{R}'}} \tag{6.2}$$

mit

$$\frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{e}_{\mathbf{R}}} \otimes \frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{e}_{\mathbf{R}'}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \theta}\frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \theta'} & \frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \theta}\frac{1}{\sin\theta'}\frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \phi'} \\ 0 & \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \phi}\frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \theta'} & \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \phi}\frac{1}{\sin\theta'}\frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \phi'} \end{pmatrix}.$$

Dabei wurde verwendet, dass der Vektor $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ ein Einheitsvektor ist und die Komponente von $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ parallel zu $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ bei der Variation verschwindet. In Polarkoordinaten ist dies die r-Komponente und es entsteht dadurch in der obigen Matrix eine Nullzeile und Nullspalte.

Sind $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ und $\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}$ nicht parallel, unterscheiden sich die Basisvektoren des Polarkoorinatensystems an den Orten $\mathbf{R}$ und $\mathbf{R}'$ voneinander. Deshalb ist folgendes zu beachten: Multipliziert man die obige Matrix $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ von rechts mit einem Spaltenvektor, der die Komponenten des Vektors $\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}/\mathrm{d}t$ bezüglich der Basisvektoren am Ort $\mathbf{R}'$ enthält, so erhält man einen Spaltenvektor, der die Komponenten des Vektors $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \cdot \mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}/\mathrm{d}t$ bezüglich der Basisvektoren am Ort $\mathbf{R}$ enthält. Summiert man in der Bewegungsgleichung (3.13) über $\mathbf{R}'$, summiert man also über Spaltenvektoren, die alle Komponenten bezüglich des Koordinatensystems am Ort $\mathbf{R}$ enthalten. Dieser aufsummierte Vektor steht dann im Kreuzprodukt mit $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$. Die Tatsache, dass das Polarkoordinatensystem ortsabhängige Basisvektoren besitzt, führt hier also nicht zu Konflikten.

6.2.1 Einfachste Konfiguration – zwei verkippte Momente

Die erste nichtkollineare Konfiguration, in der die Eigenschaften des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells bzw. der darin berechneten atomaren Dämpfungsmatrizen untersucht werden, soll hier so einfach wie möglich gehalten werden. Die einfachste in einer periodischen Rechnung zu realisierende nichtkollineare Konfiguration entsteht durch eine Einheitszelle, in der zwei atomare magnetische Momente zueinander verkippt sind.

Eine solche Konfiguration wird im Folgenden in den Materialien hcp-Co und bcc-Fe untersucht. In hcp-Co ist die verwendete Einheitszelle die primitive Einheitszelle, die bereits zwei Atome enthält. In bcc-Fe enthält die primitive Einheitszelle nur ein Atom. Die hier verwendete Einheitszelle ist eine Superzelle, die dadurch entsteht, dass die primitive Einheitszelle in Richtung eines primitiven Translationsvektors verdoppelt wird.

Abbildung 6.8a) zeigt die schematisierte Darstellung einer Einheitszelle, die zwei zueinander verkippte atomare magnetische Momente enthält. Die Zeichenebene ist dabei eine Ebene, in der beide magnetische Momen-

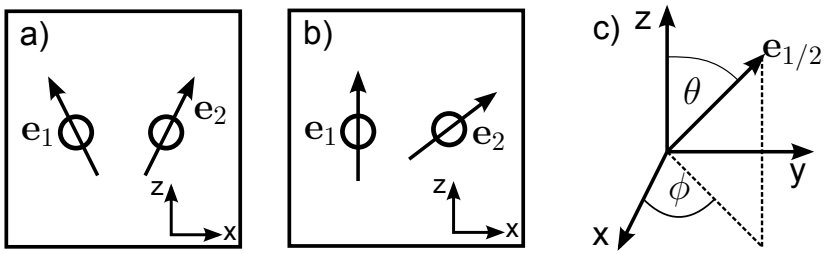

Abbildung 6.8: a) und b): Schematisierte Darstellung einer Einheitszelle mit zwei zueinander verkippten atomaren magnetischen Momenten. c): Polarkoordinatensystem.

te liegen. Der Zwischenwinkel in dieser Ebene ist der Zwischenwinkel der Momente. Die schematisiert wirkende Betrachtung ist keine Beschränkung der Allgemeinheit. Da ohne Spin-Bahn-Kopplung die Einelektronenenergien $\varepsilon_{j\mathbf{k}}$ invariant bei einer globalen Spinrotation sind, kann jedes System, das aus zwei zueinander verkippten Momenten aufgebaut wird, in die in Abbildung 6.8a) dargestellte Form transformiert werden. [1]

[1] Man wählt die z-Achse parallel zur Richtung eines Momentes. Dann führt man eine

Aufgrund der globalen Spinrotationsinvarianz hängen die Einelektronenenergien $\varepsilon_{j\mathbf{k}}$ auch nur von der Relativorientierung der Momente in der gezeigten Ebene, also von deren Zwischenwinkel ab. Daher ist die Betrachtung von Abbildung 6.8a) und 6.8b) äquivalent.

Betrachtet man Abbildung 6.8b) und verwendet das Polarkoordinatensystem aus Abbildung 6.8c), so folgen aus Symmetrieüberlegungen die folgenden Eigenschaften für die Ableitungen der Einelektronenenergien $\varepsilon_{j\mathbf{k}}$:

$$\frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \phi_1} = \frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \phi_2} = 0 \tag{6.3}$$

$$\frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \theta_1} = -\frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \theta_2}\,. \tag{6.4}$$

Das zweite Gleichheitszeichen der Beziehung (6.3) folgt aus der Überlegung, dass eine Rotation von $\mathbf{e}_2$ um die z-Achse in Abbildung 6.8b) einer globalen Spinrotation entspricht, unter der die Einelektronenenergien invariant sind. Führt man eine globale Spinrotation so aus, dass $\mathbf{e}_2$ parallel zur z-Achse ist, gilt dieselbe Überlegung für $\mathbf{e}_1$ und damit das erste Gleichheitszeichen der Beziehung (6.3). Gleichung (6.4) kann folgendermaßen abgeleitet werden:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \theta_1} &= \lim_{\Delta\theta\to 0} \frac{\varepsilon_{j\mathbf{k}}(\theta_1+\Delta\theta,\phi_1;\theta_2,\phi_2) - \varepsilon_{j\mathbf{k}}(\theta_1,\phi_1;\theta_2,\phi_2)}{\Delta\theta} \\ &= \lim_{\Delta\theta\to 0} \frac{\varepsilon_{j\mathbf{k}}(\theta_1,\phi_1;\theta_2-\Delta\theta,\phi_2) - \varepsilon_{j\mathbf{k}}(\theta_1,\phi_1;\theta_2,\phi_2)}{\Delta\theta} \\ &= \lim_{\Delta\theta'\to 0} \frac{\varepsilon_{j\mathbf{k}}(\theta_1,\phi_1;\theta_2+\Delta\theta',\phi_2) - \varepsilon_{j\mathbf{k}}(\theta_1,\phi_1;\theta_2,\phi_2)}{-\Delta\theta'} = -\frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \theta_2}\,.\end{aligned} \tag{6.5}$$

Dabei wurde verwendet, dass eine globale Spinrotation um die y-Achse um den Winkel $\Delta\theta$ folgendes ergibt: $\varepsilon_{j\mathbf{k}}(\theta_1+\Delta\theta,\phi_1;\theta_2,\phi_2) = \varepsilon_{j\mathbf{k}}(\theta_1,\phi_1;\theta_2-\Delta\theta,\phi_2)$.

Die atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ (6.2) in diesem System enthalten dann nur einen Eigenwert $A_{\theta,\theta'}$ der von Null verschieden ist:

$$A_{\theta,\theta'} = -\frac{\gamma\tau}{M_{\mathbf{R}}} \sum_j \int_{1.\mathrm{BZ}} \frac{\mathrm{d}^3k}{V_{\mathrm{BZ}}} \frac{\partial f_{j\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}} \frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \theta} \frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \theta'}\,. \tag{6.6}$$

globale (an jedem Atomort) Spinrotation um die z-Achse durch, bis das zweite Moment in der Ebene liegt, die von der z-Achse und der Verbindungslinie der beiden Atomorte aufgespannt wird.

Diese Eigenwerte erfüllen aufgrund (6.4) die folgende Relation:

$$A_{\theta_1,\theta_1} = -A_{\theta_1,\theta_2} = A_{\theta_2,\theta_2} = -A_{\theta_2,\theta_1} \tag{6.7}$$

und damit gilt für die atomaren Dämpfungsmatrizen in diesem System:

$$\mathbf{A}_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_1} = -\mathbf{A}_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2} = \mathbf{A}_{\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_2} = -\mathbf{A}_{\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_1} \,. \tag{6.8}$$

Numerische Ergebnisse

Der Eigenwert A_{θ_1,θ_1} wird hier in den Materialien hcp-Co und bcc-Fe berechnet. Wie oben beschrieben wird in hcp-Co die primitive Einheitszelle verwendet, die bereits zwei Atome und damit zwei atomare magnetische Momente enthält. In bcc-Fe wird eine Superzelle verwendet, die dadurch entsteht, dass die primitive einatomige Einheitszelle in Richtung eines primitiven Translationsvektors verdoppelt wird. Der Eigenwert A_{θ_1,θ_1} wird in beiden Systemen für verschiedene Zwischenwinkel berechnet und ist in den Abbildungen 6.9 und 6.10 in Einheiten von $M_{\mathbf{R}}/\gamma\tau \cdot \mu_{\mathrm{B}}^2/V_{\mathbf{R}}\hbar^2$ über dem Zwischenwinkel aufgetragen.

Bei der Berechnung der Werte in den Abbildungen 6.9 und 6.10 wurde die numerische Integration über die 1. Brillouinzone mit einem Stützstellennetz von 15×24^2 k-Punkten in hcp-Co und 20×40^2 k-Punkten in bcc-Fe durchgeführt. Außerdem wurde eine Gauß-Verschmierungsbreite von 5 mRy verwendet.

Abbildung 6.11 zeigt am Beispiel von hcp-Co und einem Zwischenwinkel von 10° das Konvergenzverhalten des elektronischen Anteils des Dämpfungseigenwerts $A_{\theta,\theta'}$ bezüglich der Anzahl der verwendeten Stützstellen im k-Raum und der Verschmierungsbreite.

Die in Abbildung 6.9 über den Zwischenwinkel aufgetragenen Werte von $A_{\theta,\theta'}$ sind also in hcp-Co bei 15×24^2 verwendeten k-Punkten und 5 mRy Verschmierungsbreite bis auf einen Faktor ≈1,2 auskonvergiert. Für die im folgenden Abschnitt getroffenen Aussagen reicht die mit den verwendeten Parametern erzielte Genauigkeit aus. Der enorme numerische Aufwand der nötig wäre, um die in den Abbildungen 6.9 und 6.10 gezeigten Werte bezüglich der Integrationsparameter im reziproken Raum genauer auszukonvergieren lohnt sich daher nicht.

Um die numerische Berechnung der Ableitungen $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ im Rahmen des verwendeten Magnetic-Force-Theorems in diesem nichtkollinearen System zu überprüfen, wird das effektive Feld $\mathbf{H}_{\mathrm{eff},\mathbf{R}}$ nach Gleichung

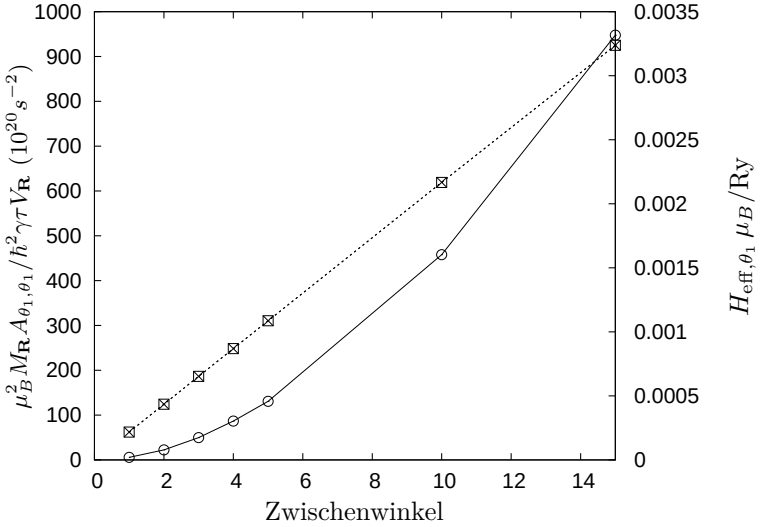

Abbildung 6.9: hcp-Co: Eigenwerte A_{θ_1,θ_1} aufgetragen über den Zwischenwinkel der beiden verkippten Momente (Symbol $\circ$, durchgezogene Linie, linke Achse). Effektives Feld $H_{\mathrm{eff},\theta_1}$ aus selbstkonsistenter DFT-Rechnung (Symbol $\square$) und mit Magnetic-Force-Theorem nach (6.9) berechnet (Symbol $\times$), jeweils gestrichelte Linie, rechte Achse.

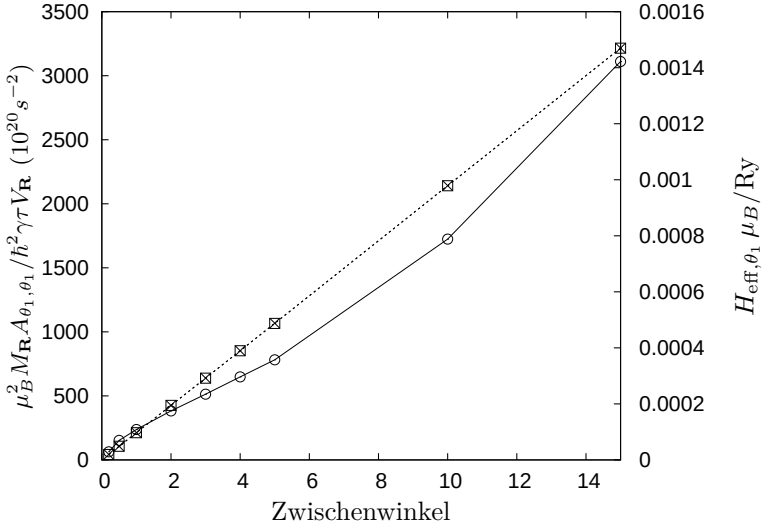

Abbildung 6.10: bcc-Fe: Eigenwerte A_{θ_1,θ_1} aufgetragen über den Zwischenwinkel der beiden verkippten Momente (Symbol $\circ$, durchgezogene Linie, linke Achse). Effektives Feld $H_{\mathrm{eff},\theta_1}$ aus selbstkonsistenter DFT-Rechnung (Symbol $\square$) und mit Magnetic-Force-Theorem nach (6.9) berechnet (Symbol $\times$), jeweils gestrichelte Linie, rechte Achse.

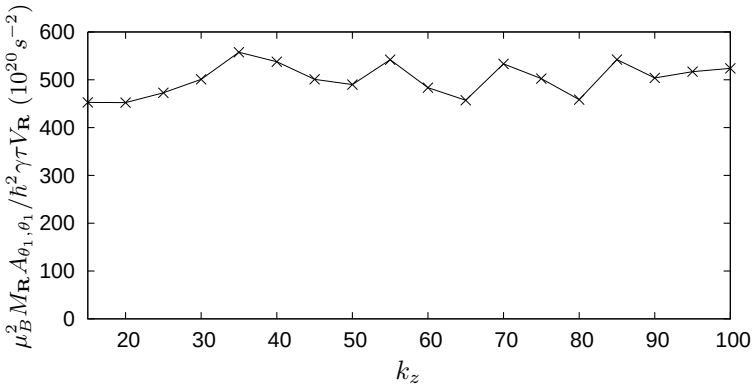

Abbildung 6.11: hcp-Co: Eigenwert A_{θ_1,θ_1} bei einem Zwischenwinkel von 10°, aufgetragen über die Anzahl k_z der k-Punkte parallel zur c-Achse, wobei $k_z\sigma = 0.05\,\mathrm{Ry}$ und $k_x = k_y = 8/5 \cdot k_z$ gilt.

(3.14) berechnet und mit dem der selbstkonsistenten DFT-Rechnung bei erzwungener Konfiguration verglichen. Bei einer selbstkonsistenten Rechnung mit erzwungener Konfiguration wird das effektive Feld gerade durch das angelegte Zwangsfeld kompensiert. Bei der verwendeten Methode setzt es sich aus dem Lagrange-Zwangsfeld und einem Austauschkorrelationsfeld zusammen, das durch die sogenannte Spin-ASA (Spin-Atomic-Sphere-Approximation) [10, 53] entsteht.

Stellt man das effektive Feld $\mathbf{H}_{\mathrm{eff},\mathbf{R}}$ (3.14) in Kugelkoordinaten dar, erkennt man mit (6.3) sofort, dass nur die θ-Komponente,

$$H_{\mathrm{eff},\theta} = \frac{1}{M_{\mathbf{R}}} \sum_j \int\limits_{1.\mathrm{BZ}} \frac{\mathrm{d}^3k}{V_{\mathrm{BZ}}} f_{j\mathbf{k}} \frac{\partial \varepsilon_{j\mathbf{k}}}{\partial \theta}\,, \tag{6.9}$$

von Null verschieden ist und mit (6.4), dass $H_{\mathrm{eff},\theta_1} = -H_{\mathrm{eff},\theta_2}$ gilt.

In den Abbildungen 6.9 und 6.10 ist $H_{\mathrm{eff},\theta_1}$ berechnet nach (6.9) und aus der jeweiligen selbstkonsistenten DFT-Rechnung über den Zwischenwinkel der beiden atomaren magnetischen Momente aufgetragen.

Diskussion

Die Abbildungen 6.9 und 6.10 zeigen, dass das mit dem Magnetic-Force-Theorem aus den Ableitungen $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ berechnete effektive Feld $\mathbf{H}_{\mathrm{eff},\mathbf{R}}$ mit dem effektiven Feld übereinstimmt, das man aus der selbstkonsistenten Rechnung für den jeweiligen Zwischenwinkel erhält. Damit ist gezeigt, dass durch das verwendete Verfahren die Ableitungen $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ in nichtkollinearen Systemen korrekt berechnet werden.

Aus Abbildung 6.11, die das Konvergenzverhalten des Eigenwerts $A_{\theta,\theta'}$ bezüglich der Parameter bei der Integration im k-Raum zeigt, ist ersichtlich, dass die in Abbildung 6.9 gezeigten Werte quantitativ bis auf einen Faktor 1,2 genau bestimmt sind.

Die numerische Untersuchung der Dämpfungseigenwerte $A_{\theta,\theta'}$ in diesem einfachen nichtkollinearen System führen zu zwei wichtigen Ergebnissen. Die Beträge der Eigenwerte $A_{\theta,\theta'}$ der Dämpfungsmatrix steigen mit zunehmendem Zwischenwinkel zwischen den beiden atomaren magnetischen Momenten an. Die allgemeine Konfigurationsabhängigkeit der Dämpfungsmatrizen im verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modell führt also in nichtkollinearen Systemen zu einer Abhängigkeit der Eigenwerte vom Grad der Nichtkollinearität. In kollinearen Systemen führt die Konfigurationsabhängigkeit zu einer Anisotropie der Eigenwerte bezüglich der Richtung der Magnetisierung im Kristall.

Ein zweites wichtiges Ergebnis ergibt sich, wenn man den hier berechneten elektronischen Anteil der Eigenwerte $A_{\theta,\theta'}$ betragsmäßig mit dem elektronischen Anteil der Eigenwerte der Dämpfungsmatrix in kollinearen Systemen vergleicht. In hcp-Co ist der elektronische Anteil von $A_{\theta,\theta'}$ bei einem Zwischenwinkel von 2° betragsmäßig um einen Faktor 22,5±6[2] größer als der elektronische Anteil des Dämpfungseigenwertes in kollinearem hcp-Co mit Magnetisierung parallel zur c-Achse. Bei einem Zwischenwinkel von 10° ist der elektronische Anteil von $A_{\theta,\theta'}$ betragsmäßig um einen Faktor ≈500 größer als der elektronische Anteil der Dämpfungsmatrix in kollinearem hcp-Co mit Magnetisierung parallel zur c-Achse. Vergleicht man in bcc-Fe jeweils die elektronischen Anteile von $A_{\theta,\theta'}$ und von der Dämpfungsmatrix bei kollinearer Magnetisierung parallel zur [001]-Richtung, ergibt

[2] Die Unsicherheit in diesem Faktor ergibt sich daraus, dass der berechnete Wert von $A_{\theta,\theta'}$ bei einem Zwischenwinkel von 2° bezüglich der Anzahl der k-Punkte nur bis auf einen Faktor 1,2 und der berechnete Wert in kollinearem hcp-Co bis auf einen Faktor 1,05 auskonvergiert ist.

sich bereits bei 0,2° Zwischenwinkel ein Faktor ≈30.

Wie bereits in Kapitel 3.3.5 erklärt, enthalten die Dämpfungsmatrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ im verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modell einen elektronischen Anteil, der die Anregung von Intraband-Elektron-Loch-Paaren durch eine zeitabhängige Fermifläche beschreibt und eine phänomenologische Relaxationszeit τ, durch die die Relaxation der Elektron-Loch-Paare beschrieben wird.

Die hier durchgeführten numerischen Berechnungen des elektronischen Anteils zeigen, dass dieser in nichtkollinearen Systemen betragsmäßig um eine oder mehrere (abhängig vom Grad der Nichtkollinearität) Größenordnungen größer ist als in kollinearen Konfigurationen.

Betrachtet man die Anregung von Elektron-Loch-Paaren als treibende Kraft, die eine Relaxation zur Folge hat, so ist diese treibende Kraft in nichtkollinearen Systemen im Allgemeinen sehr viel größer als in kollinearen Systemen. Dieses Ergebnis ist sinnvoll, da in Systemen mit zeitabhängiger Nichtkollinearität die treibende Kraft von der Austauschwechselwirkung dominiert wird, während die Fermifläche in kollinearen Konfigurationen aufgrund der sehr viel schwächeren Spin-Bahn-Kopplung atmet.

Um bei der Relaxation Drehimpuls vom Spinsystem an das Gitter abzuführen, ist sowohl in nichtkollinearen als auch in kollinearen Systemen die Spin-Bahn-Kopplung notwendig. Nimmt man an, dass die Relaxationszeit τ in beiden Fällen dieselbe Größenordung besitzt, gilt der oben bestimmte Größenunterschied des elektronischen Anteils auch für die gesamte Dämpfungsmatrix.

Die bis hier diskutierten atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ sind in der Bewegungsgleichung (3.13) des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells in nichtkollinearen Systemen nicht alleine dafür verantwortlich, dass in einer allgemeinen Dynamik auch große Dämpfungseffekte zu erwarten sind. Das gesamte dämpfende Feld am Ort $\mathbf{R}$ ist in (3.13) durch

$$\sum_{\mathbf{R}'} \mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \cdot \frac{\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}}{\mathrm{d}t} \tag{6.10}$$

gegeben und damit ebenso von der Relativdynamik der atomaren magnetischen Momente $\mathrm{d}\mathbf{e}_{\mathbf{R}'}/\mathrm{d}t$ bestimmt. Ist die relative Dynamik von der Gestalt, dass die Fermifläche zeitlich unverändert bleibt, verschwindet das dämpfende Feld an allen Orten $\mathbf{R}$.

Am obigen Beispiel der beiden verkippten magnetischen Momente ist

dies leicht an folgenden Grenzfällen einzusehen. Bleibt der Zwischenwinkel zeitlich unverändert, findet ohne Spin-Bahn-Kopplung keine Fermiflächenatmung statt. In der Bewegungsgleichung ist dann $\mathrm{d}\mathbf{e}_1/\mathrm{d}t \parallel \mathbf{e}_{\theta_1}$, $\mathrm{d}\mathbf{e}_2/\mathrm{d}t \parallel \mathbf{e}_{\theta_2}$ und $|\mathrm{d}\mathbf{e}_1/\mathrm{d}t| = |\mathrm{d}\mathbf{e}_2/\mathrm{d}t|$, wobei $\mathbf{e}_{\theta_1}$ und $\mathbf{e}_{\theta_2}$ die θ-Basisvektoren an den beiden Atomorten sind. Das gesamte dämpfende Feld verschwindet dann an beiden Atomorten aufgrund der Beziehung (6.7). Im zweiten Grenzfall ist $\mathrm{d}\mathbf{e}_2/\mathrm{d}t = 0$ und $\mathrm{d}\mathbf{e}_1/\mathrm{d}t \parallel \mathbf{e}_{\theta_1}$. Dann ist das gesamte auf $\mathbf{e}_1$ wirkende dämpfende Feld allein durch A_{θ_1,θ_1} bestimmt und damit im Vergleich zur kollinearen Situation sehr groß. [3]

In einem realen System mit zeitabhängiger Nichtkollinearität, das experimentell untersucht werden kann, ist es aufgrund der vorliegenden Theorie sehr schwierig zu beurteilen, wie groß das Verhältnis der Dämpfungseffekte verursacht durch eine zeitabhängige Fermifläche aufgrund der Austauschwechselwirkung oder aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung ist. Dieses Verhältnis hängt stark vom vorliegenden Grad der Nichtkollinearität und der Relativdynamik ab.

Um dies mit der vorliegenden Theorie beurteilen zu können, müsste man in einem realen System für jeden Zeitschritt in der Bewegungsgleichung (3.13) alle atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ und lokalen Felder ab initio berechnen. Der dafür benötigte numerische Aufwand ist nicht zu bewältigen.

Eine vereinfachte Simulation könnte durch eine atomistische Spin-Dynamik-Simulation realisiert werden, der eine Bewegungsgleichung zugrunde liegt, die einen modellhaften nichtlokalen Dämpfungsterm zwischen nächsten Nachbarn enthält. Bei konstantem Winkel zwischen nächsten Nachbarn muss dieser dann einem lokalen Dämpfungsterm entsprechen, wie er in kollinearen Systemen, verursacht durch Spin-Bahn-Kopplungs-Effekte auftritt.

6.2.2 Zwei verkippte Momente in ferromagnetischer Umgebung

Im vorigen Abschnitt wurde in einem sehr einfachen nichtkollinearen System die Konfigurationsabhängigkeit des elektronischen Anteils der atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ untersucht. Außerdem wurde ein quan-

[3] Auf $\mathbf{e}_2$ wirkt ein von A_{θ_2,θ_1} bestimmtes Feld, das aber nicht zu einer dissipierten Leistung führt, da $\mathrm{d}\mathbf{e}_2/\mathrm{d}t = 0$ (siehe Rayleigh'sche Dissipationsfunktion).

titativer Vergleich mit Dämpfungsmatrizen in kollinearen Systemen durchgeführt.

Im vorliegenden Abschnitt soll die Nichtlokalität der atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ betrachtet werden. Dazu wird das obige System der beiden verkippten Momente erweitert, indem diese entlang einer Richtung in eine ferromagnetische Umgebung eingebettet werden. Entlang dieser Richtung wird die Nichtlokalität der Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ untersucht.

Beschreibung des Systems

Die Konfiguration in der die Nichtlokalität untersucht wird, wird in bcc-Fe mit der in Abbildung 6.12a) abgebildeten 20-atomigen Einheitszelle realisiert. Die Vektoren $\mathbf{T}_i, i = 1,2,3$ sind die Translationsvektoren entlang denen die gezeichnete Einheitszelle periodisch fortgesetzt wird. Im gezeichneten kartesischen Koordinatensystem (Abbildung 6.12c)) gilt $\mathbf{T}_1 = a\,(0,0,10)$, $\mathbf{T}_2 = a\,(0,1,0)$ und $\mathbf{T}_3 = a\,(1,0,0)$, wobei $a = 286,65\,\mathrm{pm}$ die Gitterkonstante von bcc-Fe ist. Legt man den Ursprung des kartesischen Koordinatensystems in $\mathbf{R}_1$, befinden sich die Basisatome an den Orten $\mathbf{R}_n = a/2\,(0\,,0\,,(n-1))$ mit $n = 1..19$, ungerade und $\mathbf{R}_n = a/2\,(1\,,1\,,(n-1))$ mit $n = 2..20$, gerade.

Die Richtungen $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ der atomaren magnetischen Momente sind so gewählt, dass alle parallel zu der Ebene sind, die von $\mathbf{T}_1$ und $\mathbf{T}_3$ aufgespannt wird ($\phi_n = 0°$). Dieses System ist äquivalent zu einem System, in dem alle Momente in derselben Ebene liegen. Durch eine globale Spinrotation um die z-Achse, können alle Momente so gedreht werden, dass sie in der Ebene liegen, die von $\mathbf{T}_1$ und $\mathbf{T}_2 + \mathbf{T}_3$ aufgespannt wird. Die magnetische Konfiguration kann deshalb schematisiert wie in Abbildung 6.12b) dargestellt werden. Die Richtungen $\mathbf{e}_{10}$ und $\mathbf{e}_{11}$ sind zueinander verkippt und bilden einen Zwischenwinkel von 2β, wobei β der jeweilige Zwischenwinkel von $\mathbf{e}_{10}$ und $\mathbf{e}_{11}$ zur x-Achse ist ($\theta_{10} = 90° + \beta$ und $\theta_{11} = 90° - \beta$). Alle anderen Momente liegen parallel zur x-Achse ($\theta_n = 90°$, $n \neq 10, 11$).

Das periodische System, das durch die periodische Fortsetzung der Einheitszelle in Abbildung 6.12a) entsteht, besteht aus Schichten der Dicke a parallel zur x-y-Ebene, die zwei zueinander verkippte Momente enthalten und die durch ferromagnetische Schichten der Dicke $9a$ voneinander separiert sind.

In periodischen Systemen kann die Nichtlokalität der atomaren Dämp-

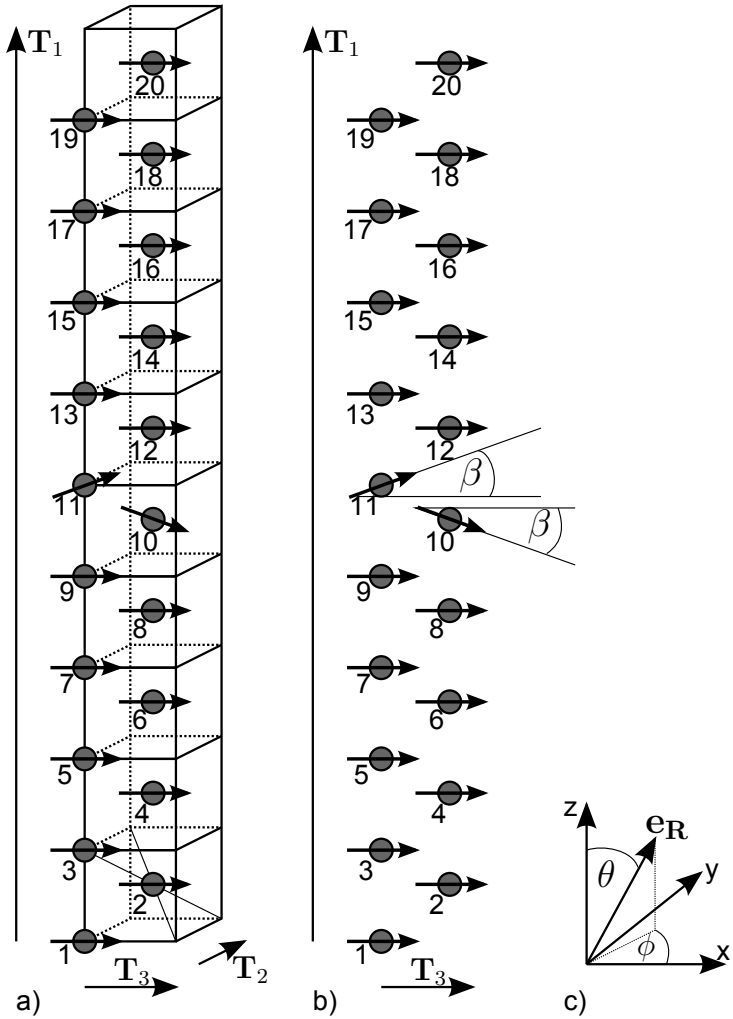

Abbildung 6.12: a): 20-atomige bcc-Fe Superzelle, mit zwei verkippten atomaren magnetischen Momenten $\mathbf{e}_{10}$ und $\mathbf{e}_{11}$ in ferromagnetischer Umgebung. b): Schematisierte Darstellung der Magnetisierungskonfiguration aus a). c): Verwendetes Koordinatensystem.

fungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ per Definition nur innerhalb der Einheitszelle untersucht werden, da eine unabhängige Variation und Dynamik der Richtungen $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$ nur innerhalb der Einheitszelle möglich ist.

Im vorliegenden System gilt $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\phi_n = 0\,\forall n$. Die atomaren Dämfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ besitzen also auch in diesem System nur einen Eigenwert $A_{\theta,\theta'}$ der von Null verschieden ist. Außerdem gilt $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\theta_n = -\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\theta_{21-n}$ und damit $A_{\theta_n,\theta_{21-n}} = A_{\theta_{21-n},\theta_n}$ bzw. $\mathbf{A}_{\mathbf{R}_n,\mathbf{R}_{21-n}} = \mathbf{A}_{\mathbf{R}_{21-n},\mathbf{R}_n}$.[4] Somit reicht es aus, die Eigenwerte $A_{\theta_n\theta_m}$ der Matrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R}_n,\mathbf{R}_m}$ für $n, m = 1..10$, also für die Atome „in einer Hälfte“ der Einheitszelle zu berechnen.

Numerische Ergebnisse

Die Eigenwerte A_{θ_n,θ_m}; $n, m = 1..10$ werden hier für verschiedene Konfigurationen mit den Winkeln $\beta = 2.5°, 5°, 15°, 30°$ berechnet. Die Richtungen $\mathbf{e}_{10}$ und $\mathbf{e}_{11}$ der verkippten Momente nehmen dabei also die Zwischenwinkel $2\beta = 5°, 10°, 30°, 60°$ ein. Die Ableitungen $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\theta$ werden im Rahmen des Magnetic-Force-Theorems numerisch berechnet. Bei der Brillouinzonenintegration wird ein Stützstellennetz von $2 \cdot 20^2$ k-Punkten und eine Gauß-Verschmierung von 5 mRy verwendet. Da im Folgenden nur relative Werte der berechneten Größen A_{θ_n,θ_m} eine Rolle spielen, ist es nicht notwendig die absoluten Werte der A_{θ_n,θ_m} bezüglich der Integrationsparameter im k-Raum auszukonvergieren.

Um die berechneten Werte A_{θ_n,θ_m} und die nichtlokalen Eigenschaften übersichtlich darzustellen, sind die Beträge $|A_{\theta_n,\theta_m}|$ in den Abbildungen 6.13 und 6.14 für den jeweiligen Zwischenwinkel 2β dargestellt. Entlang der beiden Achsen läuft $\mathbf{R}_n$ bzw. $\mathbf{R}_m$ von $\mathbf{R}_1$ bis $\mathbf{R}_{10}$. Die gezeigte Farbskala gibt die Werte $|A_{\theta_n,\theta_m}|\, M_{\mathbf{R}}/\gamma\tau \cdot \mu_{\mathrm{B}}^2/V_{\mathbf{R}}\hbar^2$ an.

Diskussion

Mit den durchgeführten Betrachtungen können zwei grundlegende Eigenschaften der Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R}_n,\mathbf{R}_m}$ untersucht werden. Ihre Konfigurationsabhängigkeit wird durch den Vergleich der berechneten Werte $|A_{\theta_n,\theta_m}|$ für verschiedene Winkel β betrachtet. Wie bei der einfachen Konfiguration von zwei verkippten Momenten zeigt sich, dass die Werte $|A_{\theta_n,\theta_m}|$

[4] Die Relationen $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\phi_n = 0\,\forall n$ und $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\theta_n = -\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\theta_{21-n}$ wurden im vorliegenden System numerisch überprüft.

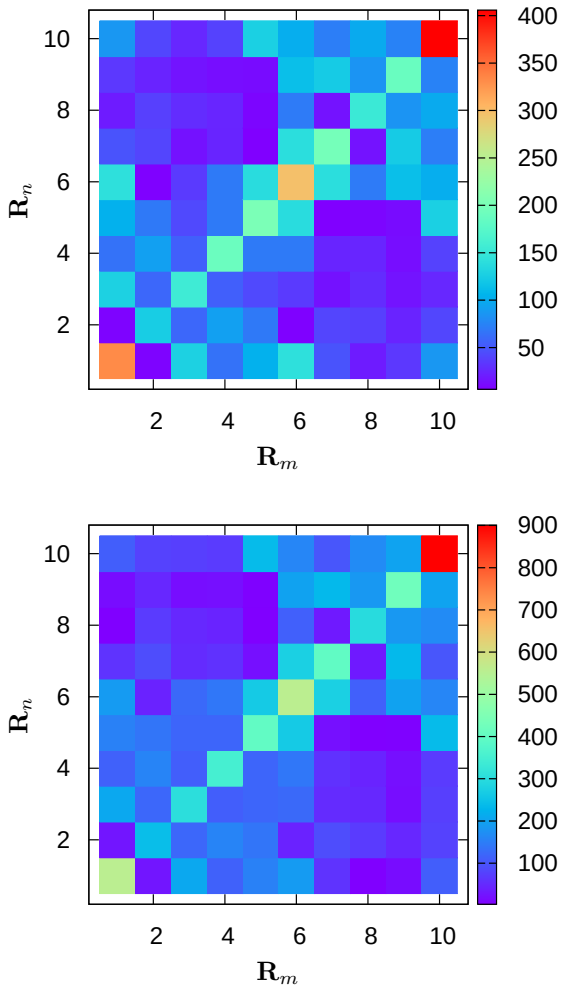

Abbildung 6.13: Eigenwerte der nichtlokalen atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R}_n,\mathbf{R}_m}$ für $n, m = 1..10$, bei einem Zwischenwinkel der Momente $\mathbf{e}_{10}$ und $\mathbf{e}_{11}$ von 5° (oben) und 10° (unten). Durch die Farbskala sind die Werte $|A_{\theta_n,\theta_m}|\, M_{\mathbf{R}}/\gamma\tau \cdot \mu_{\mathrm{B}}^2/V_{\mathbf{R}}\hbar^2(10^{20}s^{-2})$ wiedergegeben.

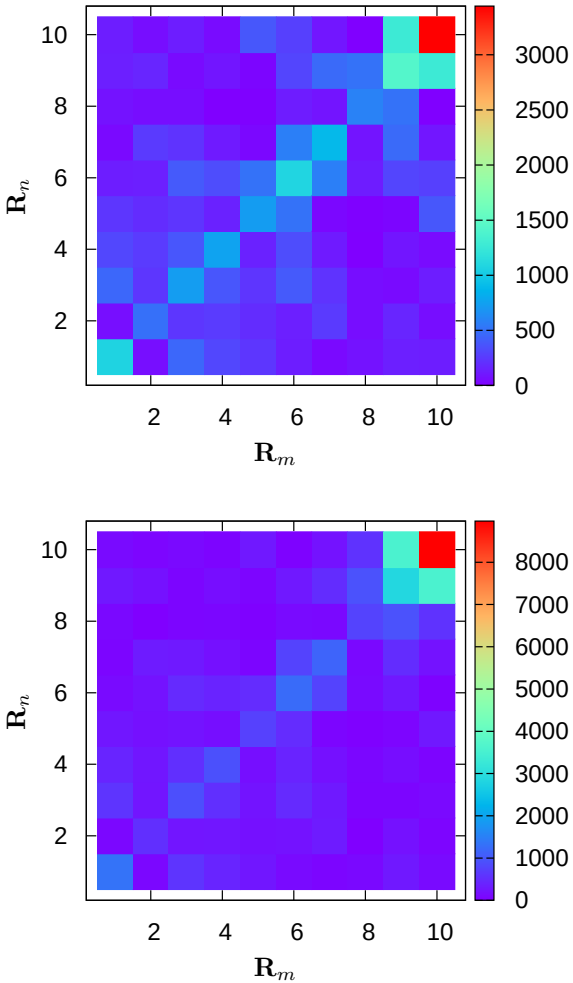

Abbildung 6.14: Eigenwerte der nichtlokalen atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R}_n,\mathbf{R}_m}$ für $n, m = 1..10$, bei einem Zwischenwinkel der Momente $\mathbf{e}_{10}$ und $\mathbf{e}_{11}$ von 30° (oben) und 60° (unten). Durch die Farbskala sind die Werte $|A_{\theta_n,\theta_m}|\, M_{\mathbf{R}}/\gamma\tau \cdot \mu_{\mathrm{B}}^2/V_{\mathbf{R}}\hbar^2(10^{20}s^{-2})$ wiedergegeben.

auch in diesem System mit zunehmendem Grad der Nichtkollinearität anwachsen.

Eine Untersuchung der Nichtlokalität bedeutet, zu betrachten, inwieweit die Dynamik am Ort $\mathbf{R}_n$ von der Dynamik an anderen Orten $\mathbf{R}_{m\neq n}$ beeinflusst wird. Diese Nichtlokalität wird durch die nichtlokalen atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R}_n,\mathbf{R}_m}$ vermittelt, die hier nur einen von null verschiedenen Eigenwert A_{θ_n,θ_m} besitzen. Die Eigenwerte A_{θ_n,θ_m} nehmen für unterschiedliche Kombinationen von n und m unterschiedliche Vorzeichen an. Da der Beitrag der Dynamik am Ort $\mathbf{R}_m$ zum dämpfenden Feld am Ort $\mathbf{R}_n$ nicht nur von A_{θ_n,θ_m} abhängt, sondern ebenso von der Relativdynamik (und deren „Vorzeichen“), ist für die Untersuchung der Nichtlokalität die Betrachtung der Beträge $|A_{\theta_n,\theta_m}|$ sinnvoll.

Betrachtet man die $|A_{\theta_n,\theta_m}|$ bei festem n und $m = 1..10$, so sind diese für $m = n$ maximal und nehmen für $m \neq n$ mit größer werdendem Abstand $|\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m|$ ab, allerdings nicht monoton. Dieses abstandsabhängige Verhalten entsteht wie bereits in Abschnitt 3.3.6 erläutert implizit durch die abstandsabhängige Änderung der Konfiguration und der damit verbundenen Austauschfelder. Eine explizite Abstandsabhängigkeit ist hier nicht enthalten. Sie könnte wie in Abschnitt 3.3.6 beschrieben durch eine phänomenologische Abfallfunktion eingeführt werden, die die Reichweite der Nichtlokalität auf die Kohärenzlänge der Einelektronenzustände beschränkt.

Auch der Einfluss der in der Bewegungsgleichung enthaltenen Nichtlokalität in realen nichtkollinearen Systemen mit nichtkollinearer Dynamik ist mit der vorliegenden Theorie schwer vorhersagbar. Möchte man diesen untersuchen, müsste man wie bereits oben beschrieben die Dynamik in einem System realer Größe durch eine Ab-initio-Spindynamiksimulation simulieren, die auf der nichtlokalen Bewegungsgleichung basiert.

6.2.3 Allgemeine Bemerkungen zur Dämpfung in der Dynamik von Spinwellen und Domänenwänden

Eine Dynamik in nichtkollinearen Systemen, die eine zeitabhängige Änderung der Fermifläche aufgrund der Austauschwechselwirkung verursacht, führt im verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modell zur Anregung von Elektron-Loch-Paaren.[5] Diese angeregten Elektron-Loch-Paare wirken

[5] Dabei ist die Spin-Bahn-Kopplung nicht notwendig.

wie eine treibende Kraft, die eine Relaxation durch Elektronenstreuprozesse auslöst.[6]

Es stellt sich nun die Frage, in welchen Typen von relevanten nichtkollinearen dynamischen Systemen eine Atmung der Fermifläche aufgrund der Austauschwechselwirkung stattfindet und damit zu Dämpfungseffekten im verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modell führt.

In [10] wird gezeigt, dass bei einer Spinwellendynamik mit konstantem Öffnungswinkel ohne Spin-Bahn-Kopplung keine Fermiflächenatmung stattfindet. Dies ist konsistent mit der Feststellung, dass in Abschnitt 6.2.1 die Ableitungen $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\phi_1$ und $\partial\varepsilon_{j\mathbf{k}}/\partial\phi_2$ verschwinden, da die Konfiguration der beiden verkippten Momente eine Spinwellenkonfiguration darstellt, wobei der halbe Zwischenwinkel β in Abschnitt 6.2.1 dem Öffnungswinkel der Spinwelle entspricht. In einer Spinwellenkonfiguration mit einer Dynamik, die den Öffnungswinkel (Zwischenwinkel in 6.2.1) ändert, atmet die Fermifläche und im verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modell treten wie in Abschnitt 6.2.1 gezeigt Dämpfungseffekte auf.

Eine weitere interessante Dynamik einer nichtkollinearen Konfiguration ist die Bewegung einer Domänenwand. Betrachtet man eine 360°-Domänenwand und eine Dynamik, die einer starren Verschiebung der Wand entspricht, bei der die Form der Domänenwand und damit die relativen Zwischenwinkel der atomaren magnetischen Momente unverändert bleibt, tritt keine Atmung der Fermifläche auf. Verändert sich bei der Dynamik die Breite und damit die Form und relativen Zwischenwinkel, so atmet die Fermifläche und es treten gemäß dem verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modell Dämpfungseffekte auf.

Bei der Dynamik einer 180°-Domänenwand, die einer starren Verschiebung entspricht und damit die Form unverändert lässt, wird während der Bewegung die Magnetisierung effektiv um 180° gedreht. Im gesamten System ändern sich somit die relativen Zwischenwinkel und die Fermifläche atmet.

Eine Verformung von Domänenwänden und damit ein Atmen der Fermifläche kann bei einer beschleunigten Bewegung auftreten. Dies wird in [54] bei der Beschleunigung einer Domänenwand durch einen Magnetfeldpuls beobachtet.

[6] Um bei der Relaxation Drehimpuls vom Spinsystem an das Gitter abzuführen, ist die Spin-Bahn-Kopplung notwendig.

7 Breathing-Fermi-Surface-Modell im Seltenerdmetall Gd

Sowohl in dieser Arbeit als auch in der sonstigen Literatur wurde die dissipative Magnetisierungdynamik im Rahmen des Breathing-Fermi-Surface-Modells nur in den 3d-Übergangsmetallen Ni, Fe und Co untersucht. In diesen Systemen ist das gesamte magnetische Moment durch das Moment der 3d4sp-Valenzelektronen gegeben. Die im Breathing-Fermi-Surface-Modell berechneten Dämpfungsmatrizen beschreiben die Dämpfung in der Bewegungsgleichung für dieses gesamte magnetische Moment.

In diesem Kapitel soll nun auch die dissipative Magnetisierungsdynamik für eine kollineare Magnetisierungskonfiguration im Seltenerdmetall Gd im Rahmen des Breathing-Fermi-Surface-Modells untersucht werden. In Gd liefert die Magnetisierung $\mathbf{M}_{4f}$ der energetisch tief liegenden halb gefüllten 4f-Schale mit einem magnetischen Moment von $7\mu_B$ den Hauptbeitrag zur gesamten Magnetisierung $\mathbf{M} = \mathbf{M}_{4f} + \mathbf{m}$. Die Valenzmagnetisierung $\mathbf{m}$ der 5d6sp-Valenzelektronen liefert einen Beitrag von $\approx 0.6\mu_B$. $\mathbf{M}_{4f}$ und $\mathbf{m}$ wechselwirken aufgrund der Austauschwechselwirkung zwischen den lokalisierten 4f-Elektronen und den delokalisierten 5d6sp-Valenzelektronen.

Im Folgenden werden zwei gekoppelte Bewegungsgleichungen für die 4f-Magnetisierung $\mathbf{M}_{4f}$ und die 5d6sp-Valenzmagnetisierung $\mathbf{m}$ aufgestellt. Es wird dabei angenommen, dass sowohl aus dem 4f-Elektronensystem als auch aus dem Valenzelektronensystem Drehimpuls an das Gitter abgeführt werden kann. Beide Bewegungsgleichungen haben daher die Gestalt einer Gilbertgleichung. Der Dämpfungsterm der Valenzmagnetisierung enthält die Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}_{5d6sp}$ und beschreibt die Dissipation durch Anregung und Relaxation von Elektron-Loch-Paaren. $\mathbf{A}_{5d6sp}$ wird in Abschnitt 7.2 numerisch im Rahmen des Breathing-Fermi-Surface-Modells untersucht und enthält dann nur den *conductivity like* Intraband-Anteil,

der bei niederen Streuraten (tiefen Temperaturen) dominiert. Der Dämpfungsterm für die 4f-Magnetisierung wird hier als „klassischer“ Gilbertterm mit skalarem Dämpfungsparameter α_{4f} angesetzt. Ein Ramanartiger Streumechanismus, der den Drehimpulsübertrag vom 4f-System an das Gitter beschreibt wird in [55] behandelt. Beide Bewegungsgleichungen sind durch das Austauschdrehmoment $\mathbf{T}$ gekoppelt, durch das die Austauschwechselwirkung zwischen 4f-Elektronen und Valenzelektronen modelliert wird. Der Dämpfungsparameter A_{5d6sp} für die Valenzmagnetisierung $\mathbf{m}$ trägt aufgrund der Austauschkopplung zur effektiven Dämpfung α_{4f}^{eff} der 4f-Magnetisierung $\mathbf{M}_{4f}$ bei, so dass diese nicht mehr allein durch α_{4f} bestimmt ist.

Die Behandlung der Austauschkopplung zwischen 4f- und 5d6sp-Elektronen stellt eine klassische Version des sf-Modells [56] dar und lehnt sich an das sd-Modell [57, 58, 59] für 3d-Übergangsmetalle an. Im sd-Modell wird der Einfluss von Relaxationsprozessen der delokalisierten 4sp-Valenzelektronen (dort als „s“-Elektronen bezeichnet) auf die Dynamik der 3d-Magnetisierung (der „d“-Elektronen) vermittelt über die Austauschwechselwirkung untersucht.

7.1 Bewegungsgleichungen für M_{4f} und m

Es werden hier die gekoppelten Bewegungsgleichungen für die dissipative Magnetisierungsdynamik einer in sich kollinearen 5d6sp-Valenzmagnetisierung $\mathbf{m}(t)$ und einer in sich kollinearen 4f-Magnetisierung $\mathbf{M}_{4f}(t)$ aufgestellt. $\mathbf{m}(t)$ und $\mathbf{M}_{4f}(t)$ sind dabei nicht unbedingt parallel. Die Dynamik der gesamten kollinearen Magnetisierung $\mathbf{M}(t) = \mathbf{m}(t) + \mathbf{M}_{4f}(t)$ erhält man dann aus der numerischen Lösung der beiden Bewegungsgleichungen für $\mathbf{m}(t)$ und $\mathbf{M}_{4f}(t)$.

Für die Dynamik der Valenzmagnetisierung wird hier eine Gilbertartige Bewegungsgleichung mit der Dämpfungsmatrix A_{5d6sp} verwendet,

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{m}}{\mathrm{d}t} = -\gamma\left(\mathbf{m} \times \mathbf{H}_m^{\text{eff}}\right) + \frac{1}{m}\mathbf{m} \times \mathsf{A}_{5d6sp}\frac{\mathrm{d}\mathbf{m}}{\mathrm{d}t} - \mathbf{T}\,. \tag{7.1}$$

$\mathbf{H}_m^{\text{eff}}$ ist dabei das effektive Feld, das auf die Valenzmagnetisierung wirkt. Es enthält im Allgemeinen das externe Feld $\mathbf{H}^{\text{ext}}$, das Anisotropiefeld $\mathbf{H}_m^{\text{aniso}}$ der 5d6sp-Valenzmagnetisierung und das Demagnetisierungsfeld

$\mathbf{H}^{\mathrm{demag}}$. $\mathbf{T}$ beschreibt die Drehmomentendichte, die aufgrund der Austauschwechselwirkung zwischen 4f-Elektronen und 5d6sp-Valenzelektronen von $\mathbf{M}_{4f}$ auf $\mathbf{m}$ ausgeübt wird. $\mathbf{T}$ wird hier analog zum sd-Modell [57] modelliert:

$$\mathbf{T} = -\frac{1}{\tau_{\mathrm{ex}} M_{4f}} \mathbf{M}_{4f} \times \mathbf{m}\,, \tag{7.2}$$

mit

$$\tau_{\mathrm{ex}} = \frac{\hbar}{S J_{\mathrm{ex}}}\,. \tag{7.3}$$

J_{ex} ist dabei die 4f-5d6sp Austauschkonstante und $S = 7/2$ ist das gesamte Spinmoment der 4f-Schale in Gd.

Um die Dynamik der 4f-Magnetisierung $\mathbf{M}_{4f}(t)$ zu beschreiben, wird ebenfalls eine Gilbertartige Bewegungsgleichung verwendet,

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{M}_{4f}}{\mathrm{d}t} = -\gamma \left(\mathbf{M}_{4f} \times \mathbf{H}_{4f}^{\mathrm{eff}}\right) + \frac{1}{M_{4f}} \mathbf{M}_{4f} \times \alpha_{4f} \frac{\mathrm{d}\mathbf{M}_{4f}}{\mathrm{d}t} + \mathbf{T}\,. \tag{7.4}$$

Das effektive Feld $\mathbf{H}_{4f}^{\mathrm{eff}}$ für die 4f-Magnetisierung setzt sich aus dem externen Feld $\mathbf{H}^{\mathrm{ext}}$ und dem Demagnetisierungsfeld $\mathbf{H}^{\mathrm{demag}}$ zusammen. Aufgrund der sphärisch symmetrischen 4f-Ladungsverteilung wirkt kein Anisotropiefeld [61]. Zur Beschreibung der Dämpfung im 4f-System wird ein Dämpfungsterm mit einfachem Gilbertskalar α_{4f} verwendet. Der dritte Term in der Bewegungsgleichung (7.4) beschreibt die Drehmomentendichte, die von $\mathbf{m}$ auf $\mathbf{M}_{4f}$ aufgrund der Austauschwechselwirkung ausgeübt wird.

Die Bewegungsgleichungen (7.1) und (7.4) bilden zusammen mit dem Kopplungsterm (7.2) ein geschlossenes System von Gleichungen für $\mathbf{m}(t)$ und $\mathbf{M}_{4f}(t)$ und damit auch für die gesamte Magnetisierung $\mathbf{M}(t) = \mathbf{M}_{4f}(t) + \mathbf{m}(t)$. Bei gegebenen Anfangswerten $\mathbf{m}(t = 0)$ und $\mathbf{M}_{4f}(t = 0)$ können diese numerisch gelöst werden. Aufgrund der Kopplung zwischen $\mathbf{M}_{4f}$ und $\mathbf{m}$ ist die effektive Dämpfung der 4f-Magnetisierung $\mathbf{M}_{4f}$ ebenfalls durch $\mathbf{A}_{5d6sp}$ und nicht allein durch α_{4f} bestimmt. Im Folgenden wird durch eine analytische Betrachtung untersucht, inwieweit $\mathbf{A}_{5d6sp}$ zur effektiven Dämpfung von $\mathbf{M}_{4f}$ beiträgt.

Damit eine analytische Untersuchung möglich ist, werden folgende Näherungen verwendet: Es wird angenommen, dass die Austauschkopplung

in Gleichung (7.1) viel stärker ist als das Drehmoment des effektiven Feldes $\mathbf{H}_m^{\text{eff}}$, weshalb dieses vernachlässigt wird. Außerdem wird eine momentane Orientierung von $\mathbf{m}$ parallel zu einer hochsymmetrischen Richtung (c-Achse) des Kristalls angenommen, wodurch beide Eigenwerte der Matrix $\mathbf{A}_{5d6sp}$ gleich sind und die Dämpfung in Gleichung (7.1) durch den Skalar A_{5d6sp} beschrieben wird. Mit diesen Näherungen vereinfacht sich Gleichung (7.1) zu

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{m}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{m}\mathbf{m} \times A_{5d6sp}\frac{\mathrm{d}\mathbf{m}}{\mathrm{d}t} - \mathbf{T}\,. \tag{7.5}$$

Gleichung (7.5) muss nun zusammen mit Gleichung (7.4) und (7.2) gelöst werden.

Um dies zu tun wird $\mathbf{m}(t)$ in zwei Teile geteilt:

$$\mathbf{m}(t) = \mathbf{m}_0(t) + \delta\mathbf{m}(t)\,, \tag{7.6}$$

wobei

$$\mathbf{m}_0(t) = \frac{m_0}{M_{4f}}\mathbf{M}_{4f}(t) \tag{7.7}$$

gilt. $\mathbf{m}_0$ ist die Komponente von $\mathbf{m}$ parallel zu $\mathbf{M}_{4f}$. $\delta\mathbf{m}$ steht senkrecht auf $\mathbf{M}_{4f}$ und ist durch nichtadiabatische Prozesse verursacht. Um dies zu verstehen hilft es Gleichung (7.1) und (7.4) zuerst einmal für $\mathbf{H}_{4f}^{\text{eff}} = \mathbf{H}_m^{\text{eff}}$, also zu vernachlässigendes $\mathbf{H}_m^{\text{aniso}}$ und im adiabatischen Limit, also ohne Dämpfungsterme zu betrachten. Für eine Anfangssituation $\delta\mathbf{m}(t=0) = 0$ verschwindet $\mathbf{T}$ in beiden Bewegungsgleichungen und die Dynamik von $\mathbf{m}(t)$ und $\mathbf{M}_{4f}(t)$ verläuft parallel. Es gilt also $\delta\mathbf{m}(t \neq 0) = 0$. Nimmt man den nichtadiabatischen Dämpfungsterm in (7.1) hinzu, verläuft die Dynamik von $\mathbf{m}(t)$ und $\mathbf{M}_{4f}(t)$ nicht mehr parallel und $\delta\mathbf{m}(t)$ ist $\neq 0$. Damit gilt $\mathbf{T} \neq 0$ und $\mathbf{m}$ präzidiert um $\mathbf{M}_{4f}$. Der Dämpfungsterm in (7.5) beschreibt dann die Relaxation von $\mathbf{m}$ hin zur Gleichgewichtslage parallel zu $\mathbf{M}_{4f}$.

Setzt man Gleichung (7.6) und (7.7) in die Gleichung (7.5) ein, verwendet (7.2) und vernachlässigt analog zum sd-Modell $\mathrm{d}(\delta\mathbf{m})/\mathrm{d}t$, findet man nach einigen Umformungen

$$\mathbf{T} = -\frac{m_0}{M_{4f}}\frac{\mathrm{d}\mathbf{M}_{4f}}{\mathrm{d}t} + \frac{m_0}{M_{4f}^2}\mathbf{M}_{4f} \times A_{5d6sp}\frac{\mathrm{d}\mathbf{M}_{4f}}{\mathrm{d}t}\,. \tag{7.8}$$

Setzt man dies in die Bewegungsgleichung (7.4) für die 4f-Magnetisierung $\mathbf{M}_{4f}$ ein, so erhält man

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{M}_{4f}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\gamma}{1+m_0/M_{4f}}\left(\mathbf{M}_{4f}\times\mathbf{H}_{4f}^{\mathrm{eff}}\right)+\frac{1}{M_{4f}}\mathbf{M}_{4f}\times\alpha_{4f}^{\mathrm{eff}}\frac{\mathrm{d}\mathbf{M}_{4f}}{\mathrm{d}t}\,. \quad (7.9)$$

Gleichung (7.9) ist eine Gilbertgleichung mit einem renormierten gyromagnetischen Verhältnis $\gamma/(1+m_0/M_{4f})$ und einem effektiven 4f-Dämpfungsskalar

$$\alpha_{4f}^{\mathrm{eff}} = \frac{\alpha_{4f}}{1+m_0/M_{4f}}+\frac{A_{5d6sp}}{1+M_{4f}/m_0}\,. \quad (7.10)$$

Der Beitrag von A_{5d6sp} zum effektiven Dämpfungsskalar $\alpha_{4f}^{\mathrm{eff}}$ hängt nicht explizit von der Stärke J_{ex} der Austauschkopplung zwischen 4f-Magnetisierung und 5d6sp-Valenzmagnetisierung ab. Dies ist anders als im sd-Modell. Dort hängt der Beitrag zu $\alpha_{3d}^{\mathrm{eff}}$, der von Streuprozessen der „s“-Elektronen verursacht wird explizit von der Austauschstärke ab.

Dieser Unterschied kommt durch die Verwendung unterschiedlicher Ansätze für den Relaxationsterm in der Bewegungsgleichung für die Magnetisierung der delokalisierten Valenzelektronen. Im sd-Modell hat die Bewegungsgleichung der „s“-Valenzmagnetisierung die Form

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{m}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\delta\mathbf{m}}{T_2}-\mathbf{T}\,, \quad (7.11)$$

wobei T_2 in [58] als „spin-flip time“ T_2, in [57] als „spin-flip relaxation time“ τ_{sf} und in [59] als „spin-relaxation time“ $\tau_{\mathrm{sf}}^{\mathrm{s}}$ bezeichnet wird. Der effektive Dämpfungsskalar $\alpha_{3d}^{\mathrm{eff}}$ für die 3d-Magnetisierung enthält dann das Verhältnis $T_2/\tau_{\mathrm{ex}} = \Omega T_2$ mit $\Omega = 1/\tau_{\mathrm{ex}}$.

Man kann die Bewegungsgleichung (7.5), wie in [60] gezeigt wird, mit den Näherungen $m = m_0$ und $|\delta\mathbf{m}|^2 = 0$ in einer zu (7.11) analogen Form schreiben:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{m}}{\mathrm{d}t} = -\frac{A_{5d6sp}}{\tau_{\mathrm{ex}}(1+A_{5d6sp}^2)}\delta\mathbf{m}-\frac{\mathbf{T}}{(1+A_{5d6sp}^2)}\,. \quad (7.12)$$

Setzt man nun in diese Gleichung (7.12) wieder die Gleichungen (7.6), (7.7) und (7.2) ein, erhält man wieder (7.8) und damit den effektiven Dämpfungsskalar $\alpha_{4f}^{\mathrm{eff}}$ (7.10) ohne Abhängigkeit von J_{ex}. Dies ist bei der

Beschreibung der Relaxation durch einen Gilbertdämpfungsterm physikalisch sinnvoll, da dieser proportional zu $\mathrm{d}\mathbf{m}/\mathrm{d}t$ und damit auch zu J_{ex} ist.

Es ist nun möglich, einen Zusammenhang zwischen einer im Sinne des sd-Modells definierten Relaxationszeit $\tilde{T_2}$ und den Größen, die in Gleichung (7.12) die Relaxation der Valenzmagnetisierung beschreiben, herzustellen. Dabei wird der Vorfaktor von $-\delta\mathbf{m}$ in (7.12) als das Inverse einer Relaxationszeit $\tilde{T_2}$ definiert:

$$\frac{1}{\tilde{T_2}} = \frac{A_{5d6sp}}{\tau_{\mathrm{ex}}(1 + A_{5d6sp}^2)} = \frac{\Omega A_{5d6sp}}{(1 + A_{5d6sp}^2)} \,. \tag{7.13}$$

Setzt man Gleichung (7.10) für den Fall $\alpha_{4f} = 0$ in (7.13) ein, erhält man den Zusammenhang

$$\frac{1}{\tilde{T_2}} = \frac{\Omega\alpha_{4f}^{eff}(1 + \frac{M_{4f}}{m_0})}{1 + (\alpha_{4f}^{eff})^2(1 + \frac{M_{4f}}{m_0})^2} \tag{7.14}$$

zwischen der Relaxationszeit $\tilde{T_2}$ und dem effektiven Dämpfungsskalar α_{4f}^{eff} der 4f-Magnetisierung. Der analoge Zusammenhang im sd-Modell lautet [58]:

$$\alpha_{3d}^{eff} = \Omega T_2[1 + (\Omega T_2)^2]^{-1}\frac{m_0}{M_{3d}} \,, \tag{7.15}$$

wobei M_{3d} der Betrag der lokalisierten 3d-Magnetisierung ist.

Man kann nun die Grenzfälle betrachten, in denen die Dynamik des Valenzmoments $\mathbf{m}$ in Gleichung (7.12) entweder durch den Relaxationsterm oder durch den Präzessionsterm dominiert wird. In [60] wird gezeigt, dass (7.14) und (7.15) in beiden Grenzfällen jeweils dasselbe asymptotische Verhalten aufweisen. In (7.12) dominiert der Präzessionsterm für $A_{5d6sp} \sim \alpha_{4f}^{eff} \ll 1$ und aus (7.14) ergibt sich dann:

$$\alpha_{4f}^{\mathrm{eff}} = \frac{1}{(1 + \frac{M_{4f}}{m_0})\Omega\tilde{T_2}} \,. \tag{7.16}$$

Dieser Zusammenhang entspricht exakt der analogen Gleichung (1) in [59] im sd-Modell. Im sd-Modell dominiert der Präzessionsterm für $\Omega T_2 \gg 1$

und (7.15) geht in diesem Grenzfall in

$$\alpha^{\mathrm{eff}}_{3d} = \frac{1}{(\frac{M_{3d}}{m_0})\Omega\tilde{T}_2} \tag{7.17}$$

über, was für $M_{4f}/m_0, M_{3d}/m_0 \gg 1$ ebenfalls mit (7.16) übereinstimmt. Dieser Grenzfall wird in [58] als „spin-pumping“ bezeichnet: Drehimpuls wird aus dem 4f-System in das Valenzelektronensystem gepumpt und dort durch Elektronenstreuprozesse an das Gitter abgegeben.

Der Grenzfall, in dem die Dynamik der delokalisierten Valenzmagnetisierung durch den Relaxationsterm dominiert wird, tritt in Gleichung (7.12) für großes $A_{5d6sp} \sim \alpha^{eff}_{4f}$ ein. Für $\alpha^{eff}_{4f} \gg 1$ nimmt die Beziehung (7.14) folgende Gestalt an:

$$\alpha^{eff}_{4f} = \frac{\Omega}{(1+\frac{M_{4f}}{m_0})}\tilde{T}_2\,. \tag{7.18}$$

Mit $M_{4f}/m_0 \gg 1$ entspricht dies dem Grenzfall der Gleichung (7.15) für $T_2 \ll 1$, in dem der Relaxationsterm des sd-Modells dominiert.

7.2 Ergebnisse des Breathing-Fermi-Surface-Modells für $\mathbf{A}^{\mathrm{Gd}}_{5d6sp}$

In diesem Abschnitt wird die Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}^{\mathrm{Gd}}_{5d6sp}$ der Valenzmagnetisierung $\mathbf{m}$ in hcp-Gd im Rahmen des Breathing-Fermi-Surface-Modells berechnet und mit Ergebnissen für $\mathbf{A}^{\mathrm{Co}}_{3d4sp}$ in hcp-Co verglichen. Wie bereits in Kapitel 3.3.5 erläutert, untersucht das Breathing-Fermi-Surface-Modell explizit die durch die Dynamik hervorgerufene Variation der Fermifläche, die zur Bildung von Elektron-Loch-Paaren führt und damit als treibende Kraft der anschließenden Relaxationsprozesse zu sehen ist, durch die der Energie- und Drehimpulsübertrag an das Gitter stattfindet. Die Relaxationsprozesse selbst werden im Modell durch die phänomenologische Relaxationszeit τ beschrieben.

Möchte man Ergebnisse des Breathing-Fermi-Surface-Modells für verschiedene Materialien miteinander vergleichen, so ist es sinnvoll dies für die Größe

$$m\mathbf{A}(\mathbf{e})/\gamma\tau = -\sum_i \frac{\partial f_i}{\partial \varepsilon_i}\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \mathbf{e}} \otimes \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \mathbf{e}} \tag{7.19}$$

zu tun, da in ihr die volle elektronische Information enthalten ist. m ist dabei der Betrag der jeweiligen Valenzmagnetisierung (5d6sp in Gd und 3d4sp in Co) und $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ ($= \mathbf{A}^{\mathrm{Gd}}_{5d6sp}(\mathbf{e})$ in Gd und $\mathbf{A}^{\mathrm{Co}}_{3d4sp}(\mathbf{e})$ in Co) die Dämpfungsmatrix der Valenzmagnetisierung.

Bei den numerischen Untersuchungen werden periodische Systeme betrachtet. Die Einelektronenenergien ε_i in (7.19) sind dann Energien $\varepsilon_{j\mathbf{k}}$ von Blochzuständen mit Bandindex j und Wellenvektor $\mathbf{k}$ und die Summe über i geht in eine Summe über j und ein Integral über die 1. Brillouinzone über. Sowohl in hcp-Gd als auch in hcp-Co wird die primitive zweiatomige Einheitszelle verwendet. Die Zustände der halb gefüllten 4f-Schale in Gd werden gemäß [61] als „open core“-Zustände behandelt.

Die Abbildungen 7.1 und 7.2 zeigen die Eigenwerte $mA_p^{\mathrm{Gd/Co}}/\gamma\tau\,, p = 1, 2$ der Matrix $m\mathbf{A}^{\mathrm{Gd}}_{5d6sp}/\gamma\tau$ für hcp-Gd und $m\mathbf{A}^{\mathrm{Co}}_{3d4sp}/\gamma\tau$ für hcp-Co, aufgetragen über die Richtung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall. Bei der numerischen Integration im reziproken Raum wurden $15{\cdot}24^2$ Stützstellen und eine Gauß-Verschmierung von 5 mRy verwendet. Die Eigenwerte $mA_p^{\mathrm{Gd/Co}}/\gamma\tau$ zeigen in beiden Materialien einen ähnlichen Grad an Anisotropie. Außerdem zeigen die Abbildungen 7.1 und 7.2 den Mittelwert der Eigenwerte $mA_p^{\mathrm{Gd/Co}}/\gamma\tau$, durch den die Linienbreite der dissipierten Leistung in einem FMR-Experiment bestimmt ist [44]. In Situationen in denen die Beschreibung der Dämpfung durch das Breathing-Fermi-Surface-Modell gültig und dominant ist, also bei einer langsamen Magnetisierungsdynamik und tiefen Temperaturen (kleinen Streuraten), sollte in der FMR-Linienbreite in beiden betrachteten Systemen eine Anisotropie bezüglich der Richtung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall zu beobachten sein.

Um die Ergebnisse für die Dämpfungsmatrix $m\mathbf{A}^{\mathrm{Gd}}_{5d6sp}/\gamma\tau$ in Gd und $m\mathbf{A}^{\mathrm{Co}}_{3d4sp}/\gamma\tau$ in Co quantitativ miteinander zu vergleichen, wurden in beiden Materialien für $\mathbf{e}$ parallel zur c-Achse Konvergenzrechnungen bezüglich der Parameter bei der numerischen Integration im k-Raum durchgeführt. Dabei wurde das Produkt $k_z\sigma = 0.05\,\mathrm{Ry}$ konstant gehalten. k_z ist dabei die Anzahl der Stützstellen entlang des reziproken Gittervektors parallel zur c-Achse und σ die Gauß-Verschmierung. Für die Anzahl der Stützstellen senkrecht zur c-Achse wurde $k_x = k_y = 8/5 \cdot k_z$ verwendet. Da die Richtung $\mathbf{e}$ hier parallel zu einer hochsymmetrischen Kristallrichtung ist, sind die beiden nichtverschwindenden Eigenwerte der jeweiligen Dämpfungsmatrix identisch und sie werden hier mit A^{Gd}_{5d6sp} in Gd und mit A^{Co}_{3d4sp} in Co bezeichnet.

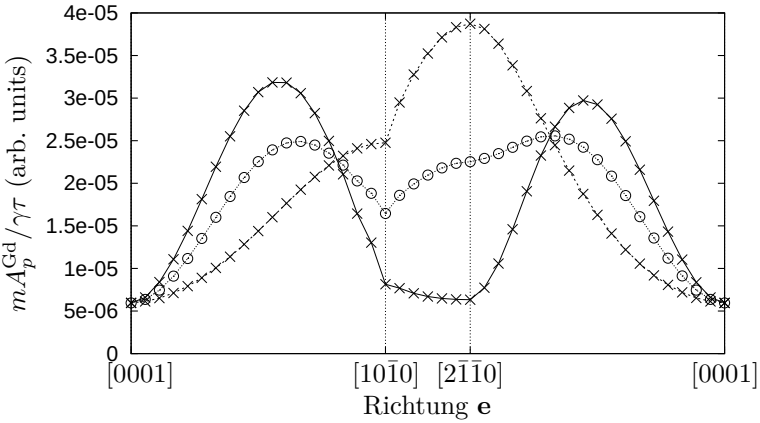

Abbildung 7.1: hcp-Gd: Eigenwerte $mA_p^{\mathrm{Gd}}/\gamma\tau$, aufgetragen über die Richtung **e** (Symbol $\times$). Die beiden Eigenwerte sind jeweils durch die gestrichelte und durchgezogene Linie gegeben. Mittelwert der Eigenwerte $mA_p^{\mathrm{Gd}}/\gamma\tau$ (Symbol $\circ$).

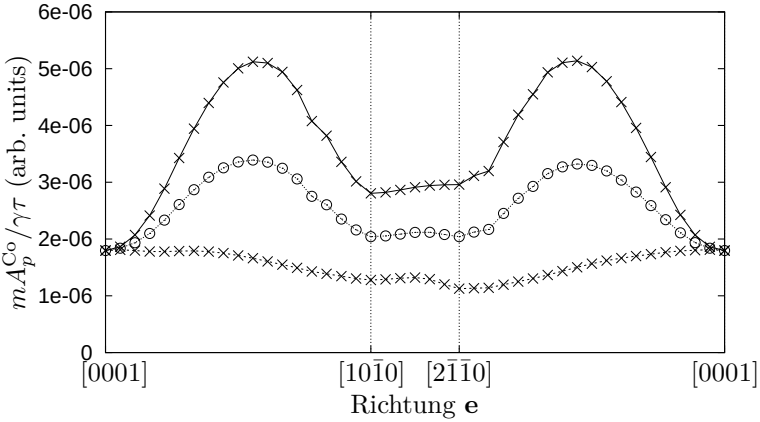

Abbildung 7.2: hcp-Co: Eigenwerte $mA_p^{\mathrm{Co}}/\gamma\tau$, aufgetragen über die Richtung **e** (Symbol $\times$). Die beiden Eigenwerte sind jeweils durch die gestrichelte und durchgezogene Linie gegeben. Mittelwert der Eigenwerte $mA_p^{\mathrm{Co}}/\gamma\tau$ (Symbol $\circ$).

Die Ergebnisse in Abbildung 7.3 zeigen, dass die Eigenwerte der Matrix $m\mathbf{A}^{\mathrm{Gd}}_{5d6sp}/\gamma\tau$ in Gd um einen Faktor $\approx 3,8$ größer sind als die Eigenwerte der Matrix $m\mathbf{A}^{\mathrm{Co}}_{3d4sp}/\gamma\tau$ in Co. Nimmt man an, dass die phänomenologische Relaxationszeit τ in den beiden Materialien Gd und Co gleich ist, können auch die Eigenwerte A^{Gd}_{5d6sp} und A^{Co}_{3d4sp} miteinander verglichen werden. Da der Betrag m des Valenzmoments in Co um einen Faktor $\approx 2,5$ größer ist als in Gd, ergibt sich $A^{\mathrm{Gd}}_{5d6sp} \approx 3,8 \cdot 2,5 \cdot A^{\mathrm{Co}}_{3d4sp} = 9,5 \cdot A^{\mathrm{Co}}_{3d4sp}$.

Betrachtet man den Fall $\alpha_{4f} = 0$ und verwendet in Gd $M_{4f}/m \approx 10,5$, erhält man mit (7.10) den quantitativen Zusammenhang zwischen dem effektiven Dämpfungsskalar $\alpha^{\mathrm{eff}}_{4f}$ in Gd und dem Skalar A^{Co}_{3d4sp} in Co: $\alpha^{\mathrm{eff}}_{4f} \approx 0,8 \cdot A^{\mathrm{Co}}_{3d4sp}$. Unter den verwendeten Annahmen ist also die effektive Dämpfung in Gd von gleicher Größenordnung wie in Co.

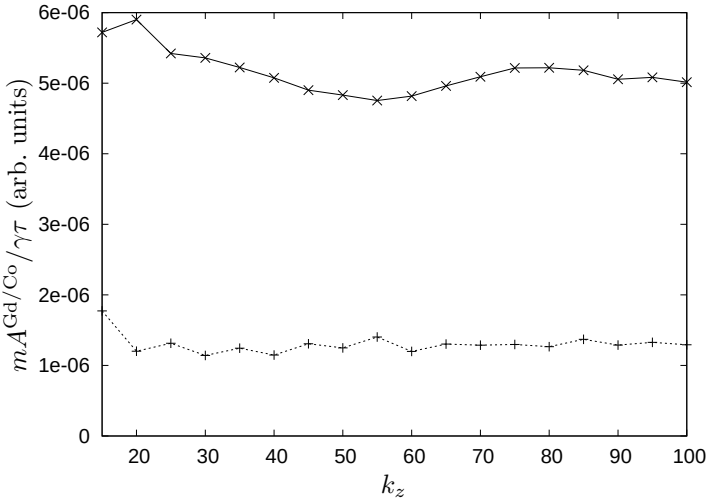

Abbildung 7.3: Eigenwerte $mA^{\mathrm{Gd}}_{5d6sp}/\gamma\tau$ und $mA^{\mathrm{Co}}_{3d4sp}/\gamma\tau$, aufgetragen über die Anzahl k_z der k-Punkte parallel zur c-Achse, wobei $k_z\sigma = 0.05\,\mathrm{Ry}$ und $k_x = k_y = 8/5 \cdot k_z$ gilt. hcp-Gd: Symbol $\times$ und hcp-Co: Symbol $+$.

8 Zusammenfassung

8.1 Deutsche Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der theoretischen Beschreibung der dissipativen Magnetisierungsdynamik nahe des adiabatischen Limits auf einer Zeitskala von einigen Pikosekunden bis Nanosekunden.

Die etablierte phänomenologische Gilbertgleichung [2] ist die einfachste Bewegungsgleichung, die eine gedämpfte Präzession der Magnetisierung um ein lokales Feld beschreibt. Sie setzt sich aus zwei Termen zusammen, dem Präzessionsterm, der die Präzession um das lokale effektive Feld beschreibt, und dem Dämpfungsterm, der proportional zur zeitlichen Änderung der Magnetisierung ist und die Relaxation hin zur Gleichgewichtslage parallel zum effektiven Feld verursacht. Die Stärke des Dämpfungsterms ist dabei durch den phänomenologischen Dämpfungsskalar α charakterisiert.

Ein mikroskopischer Mechanismus, durch den die Magnetisierungsdämpfung, also der Energie- und Drehimpulsübertrag vom Spinsystem an das Gitter verursacht wird, ist die Anregung von Elektron-Loch-Paaren durch die Dynamik und deren anschließende Relaxation durch Elektron-Gitter-Streuprozesse. In dieser Arbeit wird das Bild dieses Mechanismus in einer Form dargestellt, in der die dabei auftretenden physikalischen Prozesse verständlich zu erkennen sind. In einer kollinearen Magnetisierungskonfiguration mit Spin-Bahn-Kopplung und einer zeitabhängigen Richtung $\mathbf{e}(t)$ der Magnetisierung kann man in einem effektiven Einelektronenbild zwei Anregungsprozesse von Elektron-Loch-Paaren unterscheiden. Aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung hängen die adiabatischen Einelektronenenergien ε_i der Einelektronenzustände, ihre adiabatischen Fermi-Dirac-Besetzungszahlen f_i und die Fermifläche von der zeitabhängigen Richtung $\mathbf{e}(t)$ im Kristall ab, was als Atmen der Fermifläche bezeichnet wird (*breathing Fermi surface*). Im adiabatischen Limit befindet sich das Elektronensystem zu jedem Zeitpunkt im Grundzustand bezüglich der momentanen Magnetisierungsrichtung, und es finden während der Dynamik un-

endlich schnelle (im Vergleich zur Dynamik der Magnetisierung) Umbesetzungen durch Elektronenstreuprozesse (an Phononen oder Defekten) statt. Es kann gezeigt werden, dass in diesem Grenzfall die Dynamik ungedämpft ist. Sind die Umbesetzungen aufgrund endlicher Streuzeiten nicht unendlich schnell, können nichtadiabatische Besetzungszahlen n_i eingeführt werden, die durch Streuprozesse hin zur Fermi-Dirac-Besetzung f_i relaxieren. Betrachtet man die momentane adiabatische Besetzung f_i als Referenzsituation, entstehen bei endlicher Relaxationszeit Intraband-Elektron-Loch-Paare, bei deren Relaxation Energie und Drehimpuls an das Gitter abgegeben wird. Dieser Beitrag zur Dämpfung wird als *breathing Fermi surface* Beitrag bezeichnet. Interband-Elektron-Loch-Paare werden im effektiven Einelektronenbild durch die zeitabhängige Störung des zeitabhängigen Spin-Bahn-Kopplungs-Beitrags angeregt. Auch diese Elektron-Loch-Paare besitzen eine endliche Lebensdauer und relaxieren durch Elektronenstreuprozesse. Dieser Beitrag zur Dämpfung durch Anregung von Elektron-Loch-Paaren wird als *bubbling Fermi surface* Beitrag bezeichnet. Der Dämpfungsmechanismus durch Anregung von Elektron-Loch-Paaren liefert in 3d-Übergangsmetallen den dominierenden Beitrag [4].

Die in dieser Arbeit behandelten Theorien zur Dämpfung durch Bildung von Elektron-Loch-Paaren beschreiben den Anregungsprozess ab initio im Rahmen der elektronischen Spindichtefunktionaltheorie, während die Relaxation durch eine phänomenologische Relaxationszeit oder Lebensdauer behandelt wird.

In magnetisch kollinearen Systemen kann mit Kamberskýs Torque-Correlation-Modell [8] der Gilbert-Dämpfungsparameter α für eine zirkulare Kleinwinkelpräzession berechnet werden. Dieses Modell beschreibt die Dämpfung durch Bildung von Elektron-Loch-Paaren. Der skalare Dämpfungsparameter des Torque-Correlation-Modells enthält die Beiträge von Intraband- und Interband-Elektron-Loch-Paaren. Der Intrabandanteil verhält sich in Abhängigkeit der Streurate (Temperatur) wie die elektrische Leitfähigkeit (*conductivity like*) und dominiert bei niederen Streuraten (tiefen Temperaturen). Der Interbandanteil verhält sich wie der elektrische Widerstand (*resistivity like*) und dominiert bei höheren Streuraten (höheren Temperaturen). Bei welcher Temperatur welcher Beitrag dominiert, ist materialabhängig.

Das Torque-Correlation-Modell wird hier zu einem „Matrix-Torque-Correlation-Modell“ erweitert, in dem eine Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ in kollinear magnetisierten Systemen berechnet werden kann. Auch diese Dämp-

fungsmatrix enthält einen *conductivity like* Intrabandanteil, der bei kleinen Streuraten (tiefen Temperaturen) dominiert und einen *resistivity like* Interbandanteil, der bei großen Streuraten dominiert.

Die Dämpfungsmatrix besitzt zwei im Allgemeinen nicht verschwindende unterschiedliche Eigenwerte $\mathcal{A}_1(\mathbf{e})$ und $\mathcal{A}_2(\mathbf{e})$, die von der Orientierung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall abhängen.

Der durch eine Dämpfungsmatrix beschriebene Dämpfungsterm enthält damit zwei Typen der Anisotropie. Sind die Eigenwerte der Dämpfungsmatrix verschieden, hängt die momentane Dämpfung von der zeitlichen Ableitung $\mathrm{d}\mathbf{e}/\mathrm{d}t$ der Richtung der Magnetisierung ab, was als *rotational* Anisotropie bezeichnet wird. Die *orientational* Anisotropie ist durch die Abhängigkeit der Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{e})$ von der Orientierung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall verursacht.

Der Dämpfungsskalar der Gilbertgleichung kann in einem FMR-Experiment (Ferromagnetische Resonanz) über die Linienbreite der dissipierten Leistung bestimmt werden. Ist die Dynamik der Magnetisierung durch eine Bewegungsgleichung mit Dämpfungsmatrix bestimmt, so ist die FMR-Linienbreite bei zirkularer Trajektorie, wie hier gezeigt wird, vom Mittelwert der beiden Eigenwerte $\mathcal{A}_1(\mathbf{e})$ und $\mathcal{A}_2(\mathbf{e})$ bestimmt. Die *rotational* Anisotropie wird bei dieser erzwungenen Trajektorie ausgemittelt. In einem FMR-Experiment ist es dann nur möglich, die *orientational* Anisotropie dieses Mittelwerts zu untersuchen, indem durch ein externes konstantes Feld eine Kleinwinkelpräzession um kristallographisch verschiedene Richtungen im Kristall erzwungen wird.

Bei vorgegebener elliptischer Trajektorie der Magnetisierung wird mithilfe der Rayleigh'schen Dissipationsfunktion ein effektiver Dämpfungsskalar definiert. Dieser ist eine von der Elliptizität abhängige Linearkombination der Eigenwerte $\mathcal{A}_1(\mathbf{e})$ und $\mathcal{A}_2(\mathbf{e})$. Im zirkularen Fall geht dieser effektive Dämpfungsskalar in den Mittelwert über und im Grenzfall einer linearen Trajektorie in einen der beiden Eigenwerte.

Im Rahmen des „Matrix-Torque-Correlation-Modells“ wird die *orientational* Anisotropie des effektiven Dämpfungsskalars bei zirkularer Trajektorie in den Materialien fcc-Ni, hcp-Co und bcc-Fe in Abhängigkeit der Elektronenstreurate τ^{-1} untersucht. Es wird dabei sowohl Intra- und Interbandanteil einzeln als auch der gesamte effektive Dämpfungsskalar betrachtet. Alle drei betrachteten Materialien zeigen dasselbe Verhalten. Der Intrabandanteil, der bei niederen Streuraten (tiefen Temperaturen) dominiert, verhält sich bei allen Streuraten anisotrop. Beim Interbandanteil, der

bei hohen Streuraten (hohen Temperaturen) bestimmend ist, ist für niedere Streuraten die *orientational* Anisotropie vorhanden, verschwindet aber beim Übergang zu hohen Streuraten. Der gesamte effektive Dämpfungsparameter, der auch die FMR-Linienbreite bestimmt, verhält sich also bei tiefen Temperaturen, wo der *conductivity like* Intrabandanteil dominiert, anisotrop und bei hohen Temperaturen, wo der *resistivity like* Interbandanteil vorwiegend bestimmend ist isotrop. Bei welcher Temperatur dieser Übergang stattfindet hängt vom jeweiligen Material ab. In Ni, wo der *conductivity like* Intrabandanteil bis zur Raumtemperatur dominant ist [41], wurde eine Anisotropie der FMR-Linienbreite beobachtet [45].

Im Rahmen des „Matrix-Torque-Correlation-Modells“ wird außerdem die *rotational* Anisotropie in Abhängigkeit der Elektronenstreurate untersucht. Dafür wird der Intra- und Interbandanteil der Eigenwerte der Dämpfungsmatrix abhängig von der Streurate berechnet. Hierbei zeigt sich ein zur Untersuchung der *orientational* Anisotropie analoges Verhalten. In den betrachteten Materialien Ni, Co und Fe ist der Intrabandanteil der beiden Eigenwerte $\mathcal{A}_1$ und $\mathcal{A}_2$ für alle Streuraten unterschiedlich. Im Interbandanteil unterscheiden sich die Eigenwerte $\mathcal{A}_1$ und $\mathcal{A}_2$ bei niederen Streuraten. Dieser Unterschied verschwindet beim Übergang zu hohen Streuraten. Damit ist die *rotational* Anisotropie wie die *orientational* Anisotropie in dem Temperaturbereich vorhanden, in dem der Intrabandanteil dominiert und verschwindet bei höheren Temperaturen bei denen der Interbandanteil bestimmend ist.

Das ebenfalls auf Kamberský zurückgehende Breathing-Fermi-Surface-Modell [7] beschreibt die Dämpfung durch die oben beschriebene Anregung von Intraband-Elektron-Loch-Paaren in kollinearen Systemen.

Im hier und in [5, 10] abgeleiteten verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modell wird Kamberskýs Modell auf die Behandlung von nichtkollinearen Magnetisierungskonfigurationen erweitert. Die Fermifläche atmet in kollinearen Konfigurationen bei zeitabhängiger Magnetisierungsrichtung aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung, was zur Anregung von Intraband-Elektron-Loch-Paaren und mit der anschließenden Relaxation zum Drehimpulsübertrag vom Spinsystem an das Gitter führt. In Systemen mit zeitabhängigem Grad der Nichtkollinearität atmet die Fermifläche auch aufgrund der Austauschwechselwirkung, wodurch Elektron-Loch-Paare angeregt werden. Bei der Relaxation, bei der der Drehimpulsübertrag an das Gitter stattfindet, ist auch bei einer nichtkollinearen Dynamik die Spin-Bahn-Kopplung notwendig. Die Anregung der Elektron-Loch-Paare auf-

grund einer zeitabhängigen Fermifläche ist als treibende Kraft zu betrachten, die den Drehimpulsübertrag durch Streuprozesse auslöst.

Ausgehend von einem Magnetic-Force-Theorem, das die Darstellung des effektiven Feldes durch Besetzungszahlen und Ableitungen von Einelektronenenergien nach der Richtung von atomaren magnetischen Momenten ermöglicht, wird im verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modell eine Bewegungsgleichung für atomare magnetische Momente abgeleitet. Diese enthält wie die Gilbertgleichung einen Präzessionsterm und einen zur zeitlichen Änderung der Magnetisierungsrichtungen proportionalen Dämpfungsterm. Gegenüber der konventionellen Gilbertgleichung zeigt die Bewegungsgleichung des verallgemeinerten Breathing-Fermi-Surface-Modells zwei Verallgemeinerungen, die bereits von Gilbert phänomenologisch [2, 3] vorgeschlagen wurden. Dies ist zum einen die Erweiterung von einem Dämpfungsskalar auf Dämpfungsmatrizen und zum anderen die Nichtlokalität des dämpfenden Feldes, was bedeutet, dass das dämpfende Feld am Ort $\mathbf{R}$ von der Dynamik an anderen Orten $\mathbf{R}'$ abhängt. Diese Nichtlokalität wird durch die atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ vermittelt.

Eine weitere Verallgemeinerung besteht darin, dass die Matrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\{\mathbf{e}_{\mathbf{R}''}\})$ wie das effektive Feld von der Magnetisierungskonfiguration $\{\mathbf{e}_{\mathbf{R}''}\}$ abhängen.

In nichtkollinearen Systemen sind die Matrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ durch die Austauschwechselwirkung bestimmt, und die Konfigurationsabhängigkeit stellt eine Abhängigkeit vom Grad der Nichtkollinearität und von der genauen nichtkollinearen Konfiguration dar. In kollinearen Systemen kann der Dämpfungsterm bei einer kollinearen Dynamik durch eine lokale Dämpfungsmatrix $\mathsf{A}(\mathbf{e})$ beschrieben werden, die von der Spin-Bahn-Kopplung bestimmt ist. Die Abhängigkeit von der Konfiguration ist dann eine Abhängigkeit von der Richtung $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall, was der *orientational* Anisotropie des Intrabandanteils der im „Matrix-Torque-Correlation-Modell“ berechneten Dämpfungsmatrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{e})$ entspricht.

Der elektronische Anteil der Dämpfungsmatrizen $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ und A, der die Anregung von Intraband-Elektron-Loch-Paaren beschreibt, wird für verschiedene kollineare und nichtkollineare Systeme berechnet. Diese numerischen Untersuchungen werden mit dem vorgestellten Magnetic-Force-Theorem im Rahmen der elektronischen Spindichtefunktionaltheorie mit Nebenbedingungen für die Richtungen der atomaren magnetischen Momente durchgeführt.

In kollinearen Systemen (fcc-Ni, hcp-Co, bcc-Fe und einer Co-Schicht)

werden die Eigenwerte der Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ für verschiedene Richtungen $\mathbf{e}$ der Magnetisierung im Kristall mit dem Magnetic-Force-Theorem berechnet und eine sehr gute Übereinstimmung mit Ergebnissen der Torque-Operator-Methode [16, 34] erzielt. Außerdem werden mit dem Magnetic-Force-Theorem in kollinearem hcp-Co und bcc-Fe die atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\mathbf{e})$ berechnet, was mit der Torque-Operator-Methode nicht möglich ist. Die atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ erfüllen die theoretisch abgeleitete Beziehung zur Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}$. Damit ist gezeigt, dass die numerische Berechnung der atomaren Matrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ mit dem Magnetic-Force-Theorem zuverlässig funktioniert.

Um die Konfigurationsabhängigkeit der atomaren Dämpfungsmatrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ in nichtkollinearen Systemen zu untersuchen, wird ein einfaches Modellsystem von zwei zueinander verkippten periodisch fortgesetzten magnetischen Momenten betrachtet. In diesem System wird der eine von null verschiedene Eigenwert der Matrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ für verschiedene Zwischenwinkel der Momente berechnet und es wird ein betragsmäßiger Anstieg bei anwachsendem Zwischenwinkel beobachtet. Im Vergleich zur Dämpfungsmatrix $\mathbf{A}$ im kollinearen System sind die Eigenwerte betragsmäßig um eine bis mehrere Größenordnungen (je nach Zwischenwinkel) größer. Der Grund dafür ist die im Vergleich zur Spin-Bahn-Kopplung sehr viel stärkere Austauschwechselwirkung, die in Systemen mit zeitabhängiger Nichtkollinearität für das Atmen der Fermifläche verantwortlich ist.

An diesem einfachen Beispiel wird gezeigt, dass betragsmäßig große atomare Dämpfungsmatrizen nicht zwangsläufig große Dämpfungseffekte zur Folge haben, da neben den Matrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ auch die vorliegende Relativdynamik berücksichtigt werden muss.

Wie groß in realen nichtkollinearen dynamischen Systemen die Dämpfungseffekte aufgrund der dort vorliegenden zeitabhängigen Nichtkollinearität im Vergleich zur durch die Spin-Bahn-Kopplung verursachten Dämpfung ist, kann in dieser Theorie nicht geklärt werden.

Die durch die Matrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ vermittelte Nichtlokalität wird ebenfalls an einem einfachen Modellsystem numerisch untersucht. Zwei zueinander verkippte atomare magnetische Momente werden in einer Richtung in eine ferromagnetische Umgebung eingebettet. Dabei sind die Matrizen $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ bei festem $\mathbf{R}$ für $\mathbf{R}' = \mathbf{R}$ maximal und nehmen mit wachsendem Abstand $|\mathbf{R}' - \mathbf{R}|$ betragsmäßig (nicht monoton) ab. Diese Abstandsabhängigkeit ist implizit durch die abstandsabhängige Veränderung der Konfiguration verursacht.

Es wird diskutiert, dass eine explizite Abstandsabhängigkeit und Reichweite der Nichtlokalität durch eine phänomenologische Abfallfunktion eingeführt werden kann. Diese beschränkt die Reichweite der Nichtlokalität auf die Kohärenzlänge der Einelektronenzustände. Eine explizite Form dieser Abfallfunktion kann hier nicht angegeben werden.

Im Seltenerdmetall hcp-Gd wird für eine kollineare Konfiguration die Anisotropie der Dämpfungsmatrix **A** untersucht. Es wird dabei ein ähnlicher Grad der Anisotropie wie in hcp-Co beobachtet. Die im Breathing-Fermi-Surface-Modell berechnete Dämpfungsmatrix **A** beschreibt nur die Dämpfung in einer Bewegungsgleichung für das Valenzmoment der 5d6sp-Elektronen. Den Hauptbeitrag zum gesamten magnetischen Moment liefert in Gd das Moment der halbgefüllten energetisch tief liegenden 4f-Schale. Aufgrund der Austauschwechselwirkung zwischen 5d6sp-Valenzelektronen und den 4f-Elektronen ist die effektive Dämpfung des 4f-Moments auch durch **A** bestimmt. Dieser Beitrag wird durch eine analytische Betrachtung bestimmt, in der die Bewegungsgleichungen des Valenzmoments und des 4f-Moments durch ein Austauschdrehmoment gekoppelt sind.

8.2 English summary

The topic of the present thesis is the theoretical description of the dissipative magnetization dynamics in the near-adiabatic time regime of several picoseconds to nanoseconds.

The simplest equation of motion, which describes a damped precession of the magnetization around an effective local field, is the common phenomenological Gilbert equation. This equation consists of two terms. The precession term is the origin of the precessional motion around the effective local field. The damping term is proportional to the change of the magnetization direction in time and causes a relaxation of the magnetization to the equilibrium direction parallel to the effective field. Thereby the strength of the damping term is characterized by the phenomenological damping scalar α.

The excitation of electron-hole pairs by the dynamics itself and the subsequent relaxation by electron-lattice scattering processes combine to a microscopic mechanism which causes the transfer of energy and angular momentum from the spin system to the lattice, i.e., which causes damping. Within the present thesis, the physical picture of this mechanism

is depicted in such a way, that the underlying physical processes become obvious. Regarding a collinear configuration of the magnetization with time dependent direction $\mathbf{e}(t)$, including spin-orbit coupling, there are two different types of electron-hole excitations within an effective single electron picture. The adiabatic single electron energies ε_i of the single electron states, their adiabatic Fermi-Dirac occupation numbers f_i and the Fermi surface depend on the time dependent direction $\mathbf{e}(t)$ in the crystal because of the spin-orbit interaction. This time dependence is called "breathing Fermi surface". In the adiabatic limit, the electron system is at any instant in its ground state with respect to the momentary direction of the magnetization. During the dynamics, the change of the occupation numbers takes place infinitly fast (compared to the dynamics of the magnetization) by electron scattering processes (at phonons or defects). It can be shown that in this limit there is no damping at all. If the changes of occupation numbers are not infinitly fast because of finite scattering times, then nonadiabatic occupation numbers n_i can be introduced and these relax towards the Fermi-Dirac occupation f_i by scattering processes. In the case of finite relaxation times, there occur intraband electron-hole pairs with respect to the momentary adiabatic occupation f_i as a reference situation. During their relaxation, energy and angular momentum is transfered to the lattice. This contribution to damping is called *breathing Fermi surface* contribution. In the effective single electron picture, interband electron-hole pairs are excited by the time dependent perturbation of the time dependent contribution of the spin-orbit coupling. The life time of these interband electron-hole pairs is also finite, and they relax by electron scattering. This contribution to damping is called *bubbling Fermi surface* contribution. The damping mechanism by the excitation of electron-hole pairs is the dominant contribution in 3d transition metals [4].

While the theories presented in this thesis describe the excitation process of electron-hole pairs in the framework of the ab initio electron spin density functional theory, the relaxation processes are accounted for by a phenomenological relaxation or life time.

In magnetic collinear systems, the Gilbert damping scalar α can be calculated for a circular small angle precession within Kamberský's torque-correlation model [8]. This model describes the damping caused by the mechanism of excitation of electron-hole pairs. The scalar damping parameter of the torque-correlation model includes the contributions of intraband and interband electron-hole pairs. The intraband contribution depends on the

scattering rate (temperature) like the electrical conductivity does (*conductivity like*) and dominates at low scattering rates (low temperatures). The interband contribution behaves like the electrical resistivity does (*resistivity like*) and dominates at high scattering rates (high temperatures). It depends on the material, which contribution is the dominating at a certain temperature.

In this thesis, the torque-correlation model is extended to a "matrix torque-correlation model", in which a damping matrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ can be calculated in collinear magnetization configurations. This damping matrix also consists of a *conductivity like* intraband contribution which dominates at low scattering rates and a *resistivity like* interband contribution, which is dominating at high scattering rates.

The damping matrix has two nonzero generally different eigenvalues $\mathcal{A}_1(\mathbf{e})$ and $\mathcal{A}_2(\mathbf{e})$, which in general depend on the orientation $\mathbf{e}$ of the magnetization in the crystal.

The damping term described by a damping matrix includes two types of anisotropy. If the eigenvalues of the damping matrix are different, then the momentary damping depends on the direction of the time derivative $\mathrm{d}\mathbf{e}/\mathrm{d}t$ of the direction of the magnetization. This is called *rotational* anisotropy. The *orientational* anisotropy is caused by the dependence of the damping matrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{e})$ on the orientation $\mathbf{e}$ in the crystal.

The damping scalar of the Gilbert equation can be determined via the linewidth of the dissipated power in a FMR-experiment (ferromagnetic resonance). It is shown, that if the magnetization dynamics is described by an equation of motion with a damping matrix, then the FMR-linewidth for a circular trajectory is determined by the mean value of the eigenvalues $\mathcal{A}_1(\mathbf{e})$ and $\mathcal{A}_2(\mathbf{e})$. The *rotational* anisotropy is smeared out for such a constrained trajectory. In a FMR-experiment, it is only possible to investigate the *orientational* anisotropy of the mean value. This can be done by enforcing a circular small angle precession around crystallographically different directions with the help of a strong external constant field.

For the case of a given elliptical trajectory, an effective damping scalar is determined with the help of the Rayleigh dissipation function. This scalar is a linear combination of the eigenvalues $\mathcal{A}_1(\mathbf{e})$ and $\mathcal{A}_2(\mathbf{e})$, which depends on the ellipticity. For the case of a circular trajectory, this effective damping scalar is equal to the mean value and in the limit a linear trajectory, it is equal to one of the eigenvalues.

The dependence on the electron scattering rate τ^{-1} of the *orientational*

anisotropy of the effective damping scalar for a circular trajectory is investigated. This is done within the framework of the "matrix torque-correlation model" for the materials fcc-Ni, hcp-Co and bcc-Fe. Thereby the intraband and interband contributions are considered separately as well as the total effective damping scalar is investigated. The three materials show the same behaviour. The intraband contribution, which dominates at low scattering rates (low temperatures), is anisotropic for all scattering rates. The interband contribution, which dominates at high scattering rates (high temperatures), shows an *orientational* anisotropy for low scattering rates, but it becomes isotropic for high scattering rates. So, the total effective damping parameter, which determines the FMR-linewidth, is anisotropic for low temperatures where the *conductivity like* intraband contribution dominates, but becomes isotropic for high temperatures where the *resistivity like* interband contribution is dominant. At which temperature this transition takes place depends on the material. In Ni, where the *conductivity like* intraband contribution is dominant up to room temperature [41], an anisotropy of the FMR-linewidth has been observed [45].

Also the dependence of the *rotational* anisotropy on the electron scattering rate is investigated within the framework of the "matrix torque-correlation model". To do this, the intra- and interband contributions of the eigenvalues of the damping matrix are calculated in dependence of the scattering rate. Thereby a behaviour similar to the investigation of the *orientational* anisotropy is observed. In the considered materials Ni, Co and Fe, the intraband contribution of the eigenvalues $\mathcal{A}_1$ and $\mathcal{A}_2$ is different for all scattering rates. The interband contribution of $\mathcal{A}_1$ and $\mathcal{A}_2$ is different for low scattering, and this difference vanishes for high scattering rates. So the *rotational* anisotropy as well as the *orientational* anisotropy is present in the low temperature regime, where the intraband contribution dominates, but both vanish at high temperatures when the interband contribution is dominating.

The breathing Fermi surface model, which was also developed by Kamberský [7], describes the damping by the above discussed excitation of intraband electron-hole pairs in collinear systems.

In a unified or generalized breathing Fermi surface model, which is developed in this thesis as well as in [5] and [10], Kamberský's model is extended to describe damping in noncollinear systems. In collinear systems with time dependent direction of the magnetization, the Fermi surface breathes because of the spin-orbit interaction. This causes the excitation of intraband

electron-hole pairs and the subsequent relaxation where angular momentum is transfered from the spin system to the lattice. In systems with time dependent noncollinearity, the Fermi surface additionally breathes because of the exchange interaction and electron-hole pairs are generated. For the transfer of angular momentum during the relaxation, the spin-orbit interaction is also necessary in noncollinear dynamics. The excitation of electron-hole pairs as a consequence of a time dependent Fermi surface can be considered as a driving force, which is followed by the transfer of angular momentum by scattering processes.

Within a magnetic force theorem, the effective field can be expressed by occupation numbers and derivatives of single electron energies with respect to the direction of atomic magnetic moments. Starting with this expression, the generalized breathing Fermi surface model derives an equation of motion for atomic magnetic moments. As the Gilbert equation, this equation of motion consists of a precession term and a damping term, which is proportional to the change in time of the directions of the atomic magnetic moments. The equation of motion of the generalized breathing Fermi surface model includes two generalizations compared to the conventional Gilbert equation, which have already been suggested by Gilbert himself [2, 3]. The first is the extension from a damping scalar to a damping matrix. The second is the nonlocality of the damping field, which means that the damping field at a site $\mathbf{R}$ depends on the dynamics at other sites $\mathbf{R}'$. This nonlocality is mediated by the atomic damping matrices $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$.

An additional generalization is that the matrices $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\{\mathbf{e}_{\mathbf{R}''}\})$ depend on the magnetic configuration $\{\mathbf{e}_{\mathbf{R}''}\}$ as the effective field does.

In noncollinear systems, the matrices $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ are determined by the exchange interaction. The configuration dependence describes the dependence on the degree of noncollinearity and on the detailed noncollinear configuration. In collinear systems with a collinear dynamics, the damping can be described by a local damping matrix $\mathsf{A}(\mathbf{e})$, which is determined by the spin-orbit interaction. Then, the configuration dependence is a dependence on the direction $\mathbf{e}$ of the magnetization in the crystal, and this corresponds to the *orientational* anisotropy of the intraband contribution of the matrix $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{e})$ calculated in the "matrix torque-correlation model".

The electronic part of the damping matrices $\mathsf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ and A, which describes the excitation of intraband electron-hole pairs, is calculated for various collinear and noncollinear systems. These numerical investigations are carried out within the presented magnetic force theorem in the frame-

work of the electronic spin density functional theory with constrains for the directions of the atomic magnetic moments.

In collinear systems (fcc-Ni, hcp-Co, bcc-Fe and a Co-layer), the eigenvalues of the damping matrix $\mathbf{A}(\mathbf{e})$ are calculated for various directions $\mathbf{e}$ of the magnetization within the magnetic force theorem. Very good agreement is found with the values calculated by the torque-operator method [16, 34]. In addition, the atomic damping matrices $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\mathbf{e})$ are calculated in collinear hcp-Co and bcc-Fe by the magnetic force theorem, which is not possible by the torque-operator method. The numerically determined atomic damping matrices $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ fulfill the theoretical realtion to the damping matrix $\mathbf{A}$, which shows that the numerical calculation of the atomic damping matrices $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ within the magnetic force theorem works reliable.

To analyse the configuration dependence of the atomic damping matrices $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ in noncollinear systems, a basic model system is investigated which consists of two canted periodically arranged atomic magnetic moments. In this system, one eigenvalue of the matrices $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ is nonzero, and it is calculated for different canting angles between the atomic moments. The absolute values of the eigenvalues increase with increasing canting angle. Compared to the damping matrix $\mathbf{A}$ in collinear systems the absolute values of the eigenvalues are one or several orders of magnitude larger (depending on the canting angle). The origin of this difference in magnitude is that the exchange interaction, which is much stronger than the spin-orbit interaction, is responsible for the breathing of the Fermi surface in systems with time dependent noncollinearity.

In this basic example, it is shown that damping matrices with large absolute values do not necessary lead to strong damping effects, because beside the matrices $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ also the relative dynamics of the atomic moments have to be considered.

How large the damping effects caused by the time dependent noncollinearity are in a real noncollinear dynamic system in comparison to the damping effects caused by spin-orbit coupling can not be answered within this theory.

The nonlocality mediated by the matrices $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ is also investigated numerically within a basic model system. Two canted atomic magnetic moments are embedded into a ferromagnetic surrounding into one direction. Here, the eigenvalues of the matrices $\mathbf{A}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ with fixed $\mathbf{R}$ are maximum for $\mathbf{R}' = \mathbf{R}$ and the absolute values decrease (not monotonically) for increasing distance $|\mathbf{R}' - \mathbf{R}|$. This dependence on the distance is caused

implicitly by the changing configuration with increasing distance.

It is discussed that an explicit dependence on the distance and a finite range of the nonlocality can be introduced by a phenomenological decay function. This confines the range of nonlocality to the length of coherence of the single electron states. An explicit form of such a decay function can not be given here.

In the rare earth metal hcp-Gd, the anisotropy of the damping matrix $\mathbf{A}$ is investigated for a collinear magnetization. Thereby a similar degree of anisotropy is observed as in the 3d transition metal hcp-Co. The damping matrix $\mathbf{A}$, which can be calculated within the breathing Fermi surface model, describes the damping in an equation of motion for the valence magnetic moment of the 5d6sp valence electrons. The main contribution to the total magnetic moment in Gd is given by the moment of the half-filled energetically low lying 4f shell. Because of the exchange coupling between the 5d6sp valence electrons and the 4f electrons, the effective damping of the 4f moment is also determined by the damping matrix $\mathbf{A}$. This contribution is investigated by an analytical approach in which the equations of motion of the valence moment and the 4f moment are coupled by an exchange torque.

Literaturverzeichnis

[1] W.F. Brown, *Micromagnetics*, Wiley, New York (1963).

[2] T.L. Gilbert, *Formulation, Foundations and Applications of the Phenomenological Theory of Ferromagnetism*, PhD Thesis Illinois Institute of Technology, Chicago (1956).

[3] T.L. Gilbert, *A Phenomenological Theory of Damping in Ferromagnetic Materials*, IEEE Trans. Mag. **40**, 3443–3449 (2004).

[4] K. Gilmore, Y.U. Idzerda, and M.D. Stiles, *Identification of the Dominant Precession-Damping Mechanism in Fe, Co, and Ni by First-Principles Calculations*, Phys. Rev. Lett. **99**, 027204 (2007).

[5] D. Steiauf, J. Seib, and M. Fähnle, *Unified theory of near-adiabatic magnetization dynamics for collinear and noncollinear magnetization*, Phys. Rev. B **78**, 020410(R) (2008).

[6] M. Fähnle, D. Steiauf, and J. Seib, *The Gilbert equation revisited: anisotropic and nonlocal damping of magnetization dynamics*, J. Phys. D **41**, 164014 (2008).

[7] V. Kamberský, *On the Landau-Lifshitz relaxation in ferromagnetic metals*, Canadian Journal of Physics **48**, 2906–2911 (1970).

[8] V. Kamberský, *Ferromagnetic Resonance Damping in Metals*, Czechoslovak Journal of Physics B **26a**, 1366–1383 (1976).

[9] R.M. Dreizler and E.K.U. Gross, *Density Functional Theory: An Approach to the Quantum Many Body Problem*, Springer (1990).

[10] D. Steiauf, *Dissipative Magnetisierungsdynamik – Ein Zugang über die ab-initio Elektronentheorie*, Dissertation Universität Stuttgart (2008).

[11] R. Singer, *Modellierung von Spinwechselwirkungen auf atomarer Skala und Energetik konkurrierender Spinkonfigurationen in fcc-Eisen*, Dissertation Universität Stuttgart (2008).

[12] P. Hohenberg and W. Kohn, *Inhomogeneous Electron Gas*, Phys. Rev. **136**, B864–B871 (1964).

[13] W. Kohn and L.J. Sham, *Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects*, Phys. Rev. **140**, A1133-A1138 (1965).

[14] U. von Barth and L. Hedin, *A local exchange-correlation potential for the spin polarized case. i*, J. Phys. C: Solid State Phys. **5**, 1629-1642 (1972).

[15] J. Kübler, K.-H. Höck, J. Sticht, and A.R. Williams, *Density functional theory of non-collinear magnetism*, J. Phys. F: Met. Phys. **18**, 469–483 (1988).

[16] J. Seib, D. Steiauf, and M. Fähnle, *Local and nonlocal atomic contributions to unit-cell damping in near-adiabatic collinear magnetization dynamics*, Phys. Rev. B **79**, 064419 (2009).

[17] P.H. Dederichs, S. Blügel, R. Zeller, and H. Akai, *Ground States of Constrained Systems: Application to Cerium Impurities*, Phys. Rev. Lett. **53**, 2512–2515 (1984).

[18] P. Bruno, *Exchange Interaction Parameters and Adiabatic Spin-Wave Spectra of Ferromagnets: A "Renormalized Magnetic Force Theorem"*, Phys. Rev. Lett. **90**, 087205 (2003).

[19] J. Harris, *Simplified method for calculating the energy of weakly interacting fragments*, Phys. Rev. B **31**, 1770–1779 (1985).

[20] W.M.C. Foulkes and R. Haydock, *Tight-binding models and density-functional theory*, Phys. Rev. B **39**, 12520–12536 (1989).

[21] P. Bruno, private Mitteilung (2007).

[22] C. Ederer, *Theorie magneto-optischer Effekte im Röntgenbereich und Anwendung auf niedrigdimensionale magnetische Systeme*, Dissertation Universität Stuttgart (2003).

[23] M. Kläui and C. A. F. Vaz, *Magnetization Configurations and Reversal in Small Magnetic Elements*, in: *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials, Vol. 2: Micromagnetism*, edited by H. Kronmüller and S. Parkin, Wiley (2007);
L. Thomas and S. Parkin, *Current Induced Domain-wall Motion in Magnetic Nanowires*, ibid..

[24] B. Van Waeyenberge, A. Puzic, H. Stoll, K. W. Chou, T. Tyliszczak, R. Hertel, M. Fähnle, H. Brückl, K. Rott, G. Reiss, I. Neudecker, D. Weiss, C. H. Back, and G. Schütz, *Magnetic vortex core reversal by excitation with short bursts of an alternating field*, Nature **444**, 503 (2006).

[25] B. Koopmans, *Time-resolved Kerr-effect and Spin Dynamics in Itinerant Ferromagnets*, in: *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials, Vol. 3: Novel Techniques for Characterizing and Preparing Samples*, edited by H. Kronmüller and S. Parkin, Wiley (2007);
H.A. Dürr and C.M. Schneider, *Ultrafast Magnetodynamics with Lateral Resolution: A view by Photoemission Microscopy*, ibid.;
J.-Y. Bigot, M. Vomir, and E. Beaurepaire, *Coherent ultrafast magnetism induced by femtosecond laser pulses*, Nature Physics **5**, 515 (2009).

[26] H. Suhl, *Theory of the Magnetic Damping Constant*, IEEE Trans. Mag. **34**, 1834–1838 (1998).

[27] B. Heinrich, *Spin relaxation in magnetic metallic layers and multilayers*, in: *Ultrathin Magnetic Structures III* edited by J. A. C. Bland and B. Heinrich. Springer: Berlin, Heidelberg, New York (2005).

[28] K. Gilmore, Y.U. Idzerda, and M.D. Stiles, *Spin-orbit precession damping in transition metal ferromagnets*, J. Appl. Phys. **103**, 07D303 (2008).

[29] V. L. Safonov, *Tensor form of magnetization damping*, J. Appl. Phys. **91**, 8653 (2002).

[30] K. Capelle and B. L. Gyorffy, *Exploring dynamical magnetism with time-dependent density-functional theory: From spin fluctuations to Gilbert damping*, Europhys. Lett. **61**, 354 (2003).

[31] A. Brataas, Y. Tserkovnyak, and G. E. W. Bauer, *Scattering Theory of Gilbert Damping*, Phys. Rev. Lett. **101**, 037207 (2008).

[32] S. Zhang and S. S. L. Zhang, *Generalization of the Landau-Lifshitz-Gilbert Equation for Conducting Ferromagnets*, Phys. Rev. Lett. **102**, 086601 (2009).

[33] C. Vittoria and S. D. Yoon, *Relaxation mechanism for ordered magnetic materials*, Phys. Rev. B **81**, 014412 (2010).

[34] D. Steiauf and M. Fähnle, *Damping of spin dynamics in nanostructures: An ab initio study*, Phys. Rev. B **72**, 064450 (2005).

[35] M. Fähnle and D. Steiauf, *Dissipative Magnetization Dynamics Close to the Adiabatic Regime*, in: *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials, Vol 1: Fundamentals and Theory*, edited by H. Kronmüller and S. Parkin, Wiley (2007).

[36] K. Gilmore, M. D. Stiles, J. Seib, D. Steiauf, and M. Fähnle, *Anisotropic damping of the magnetization dynamics in Ni, Co and Fe*, Phys. Rev. B **81**, 174414 (2010).

[37] J. Kuneš and V. Kamberský, *First-principles investigation of the damping of fast magnetization precession in ferromagnetic 3d metals*, Phys. Rev. B **65**, 212411 (2002); *Erratum* Phys. Rev. B **68**, 019901(E) (2003).

[38] D. Steiauf and M. Fähnle, *Elliott-Yafet mechanism and the discussion of femtosecond magnetization dynamics*, Phys. Rev. B **79**, 140401(R) (2009).

[39] J. Seib, D. Steiauf and M. Fähnle, *Damping of near-adiabatic magnetization dynamics by excitations of electron-hole pairs*, J. Phys.: Conf. Ser. **200**, 042023 (2010).

[40] V. Kamberský, *Spin-orbital Gilbert damping in common magnetic metals*, Phys. Rev. B **76**, 134416 (2007).

[41] B. Heinrich, D.J. Meredith, and J.F. Cochran, *Wave number and temperature dependent Landau-Lifshitz damping in nickel*, J. Appl. Phys. **50**, 7726–7728 (1979).

[42] I. Garate and A. MacDonald, *Gilbert damping in conducting ferromagnets. I. Kohn-Sham theory and atomic-scale inhomogeneity*, Phys. Rev. B **79**, 064403 (2009).

[43] K. Gilmore, private Mitteilung (2010).

[44] J. Seib, D. Steiauf, and M. Fähnle, *Linewidth of ferromagnetic resonance for systems with anisotropic damping*, Phys. Rev. B **79**, 092418 (2009).

[45] J.M. Rudd, K. Myrtle, J.F. Cochran, and B. Heinrich, *Anisotropic ferromagnetic resonance linewidth in nickel at low temperatures*, J. Appl. Phys. **57**, 3693–3695 (1985).

[46] C. Vittoria, R.C. Barker, and A. Yelon, *Anisotropic Ferromagnetic Resonance Linewidth in Ni Platelets*, Phys. Rev. Lett. **19**, 792–794 (1967).

[47] S. Y. Savrasov, A. Toropova, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, V. Antropov and G. Kotliar, *Electronic structure and magnetic properties of solids*, Z. Kristallogr. **220**, 473 (2005).

[48] J. P. Perdew and Y. Wang, *Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy*, Phys. Rev. B **45**, 13244–13249 (1992).
J. P. Perdew and Y. Wang, *Accurate and simple density functional for the electronic exchange energy: Generalized gradient approximation*, Phys. Rev. B **33**, 8800–8802 (1986).

[49] O.K. Andersen and O. Jepsen, *Explicit, First-Principles Tight-Binding Theory*, Phys. Rev. Lett. **53**, 2571–2574 (1984).

[50] C. Ederer, M. Komelj, M. Fähnle, and G. Schütz, *Theory of induced magnetic moments and x-ray magnetic circular dichroism in Co-Pt multilayers*, Phys. Rev. B **66**, 094413 (2002).

[51] O. Eriksson, M.S.S. Brooks, and B. Johansson, *Orbital polarization in narrow-band systems: Application to volume collapses in light lanthanides*, Phys. Rev. B **41**, 7311–7314(R) (1990).

[52] D. Steiauf, *Elektronentheorie der Dissipation bei ultraschneller Spindynamik*, Diplomarbeit Universität Stuttgart (2003).

[53] R. Singer, F. Dietermann, D. Steiauf, and M. Fähnle, *Ab initio calculations of adiabatic magnon spectra using the atomic-sphere approximation for the spin direction*, Phys. Rev. B **76**, 052403 (2007).

[54] J. Rhensius, L. Heyne, D. Backes, S. Krzyk, L. J. Heyderman, L. Joly, F. Nolting, and M. Kläui, *Imaging of Domain Wall Inertia in Permalloy Half-Ring Nanowires by Time-Resolved Photoemission Electron Microscopy*, Phys. Rev. Lett. **104**, 067201 (2010).

[55] W. Hübner and K. H. Bennemann, *Simple theory for spin-lattice relaxation in metallic rare-earth ferromagnets*, Phys. Rev. B **53**, 3422 (1995).

[56] W. Nolting, *Theory of Ferromagnetic Semiconductors*, phys. stat. sol. (b) **96**, 11 (1979).

[57] S. F. Zhang and Z. Li, *Roles of Nonequilibrium Conduction Electrons on the Magnetization Dynamics of Ferromagnets*, Phys. Rev. Lett. **93**, 127204 (2004).

[58] Y. Tserkovnyak, G. A. Fiete, and B. I. Halperin, *Mean-field magnetization relaxation in conducting ferromagnets* Appl. Phys. Lett. **84**, 5234 (2004).

[59] L. Berger, *Gilbert damping and current-induced torques on a domain wall: A simple theory based on itinerant 3d electrons only*, Phys. Rev. B **80**, 144427 (2009).

[60] J. Seib and M. Fähnle, *Calculation of the Gilbert damping matrix at low scattering rates in Gd*, Phys. Rev. B **82**, 064401 (2010).

[61] K. Hummler and M. Fähnle, *Full-potential linear-muffin-tin-orbital calculations of the magnetic properties of rare-earth–transition-metal intermetallics. I. Description of the formalism and application to the series RCo5 (R=rare-earth atom)*, Phys. Rev. B **53**, 3272 (1996).

Danksagung

An erster Stelle möchte ich Herrn Prof. Dr. Manfred Fähnle für die gute Betreuung und stets sehr angenehme und fruchtbare Zusammenarbeit während meiner Zeit am MPI für Metallforschung danken.

Mein besonderer Dank gilt auch Herrn Prof. Dr. H.-R. Trebin und Herrn Prof. Dr. G. Wunner für die spontane Bereitschaft zur Übernahme des Haupt- und Mitberichts.

Herrn Dr. D. Steiauf möchte ich für die Vorarbeit und gute Zusammenarbeit auf dem Gebiet der dissipativen Magnetisierungsdynamik, sowie für viele hilfreiche Diskussionen während unserer gemeinsamen Zeit in Stuttgart danken.

Herrn Dr. M.D. Stiles und Herrn Dr. K. Gilmore vom NIST (Center for Nanoscale Science and Technology, Gaithersburg, USA) danke ich für zahlreiche Diskussionen und die gute Kooperation.

Außerdem danke ich den Mitgliedern der Elektronentheoriegruppe, allen Mitarbeitern der Abteilung Schütz und den Kollegen der EDV-Abteilung für die stets gute Arbeitsatmosphäre.

Meiner Frau Tina, unseren Familien und Freunden möchte ich für die kontinuierliche Unterstützung der unterschiedlichsten Art danken.