

D I P L O M A R B E I T

Untersuchungen des Ferrimagnetismus von $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$

ausgeführt am
Institut für Festkörperphysik
der Technischen Universität Wien

unter Anleitung von
Ao. Univ. Prof. Dr. Herwig Michor und
Univ. Prof. Dr. Gerfried Hilscher

durch
Özcan Soner
Hütteldorferstrasse 130C/4/10
1140 Wien

Wien, März 2005

Unterschrift

Danksagung

Mein ganz besonderer Dank gilt meinem Betreuer, Univ. Doz. Dr. Herwig Michor, der mir nicht nur jederzeit mit Rat und Tat zur Seite stand, sondern mich auch durch interessante und herausfordernde Aufgabenstellung motivierte.

Für die Unterstützung im Zuge dieser Arbeit möchte ich mich weiters bei Univ. Prof. Dr. Gerfried Hilscher bedanken.

Dank gebührt auch allen Mitarbeitern des Instituts für Festkörperphysik für die freundschaftliche Atmosphäre, für die Bereitstellung von Räumen, Instrumenten, Computern usw. und für die damit verbundene gute Zusammenarbeit.

Den Forschungsprojekten mit den Bezeichnungen "FWF Projekt P15066" danke ich für die finanzielle Unterstützung während der Arbeit.

Contents

1	Einleitung	3
2	Theoretische Konzepte	5
2.1	Magnetismus	5
2.1.1	Die Molekularfeldtheorie des Ferromagnetismus	6
2.1.2	Die Néeltheorie des Ferrimagnetismus	8
2.1.3	Itineranter Magnetismus	17
2.2	Elektrischer Widerstand	17
3	Experimentelles	21
3.1	RF-SQUID-Magnetometrie	21
3.2	Messung der magnetischen Suszeptibilität	30
3.3	Messung des elektrischen Widerstandes	34
3.4	Röntgendiffraktion	36
3.4.1	Profilanalyse mit Fullprof	37
4	Intermetallische Verbindungen RCo_9Si_4	45
5	Probenherstellung und Charakterisierung	47
5.1	Herstellung von $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$	47
5.2	Meßergebnisse	49
5.2.1	Strukturanalyse mittels Röntgendiffraktion	49
5.2.2	Widerstandsmessungen der Serie $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$	52
5.2.3	Messungen der magnetischen Suszeptibilität	54
5.2.4	Magnetisierungsmessungen	56
6	Anwendung der Néeltheorie	61
7	Zusammenfassung	69
A	Programmbeschreibung	75
B	Zusätzliche Rechnungen	99

Chapter 1

Einleitung

Intermetallische Selten Erd Verbindungen wie $RT_{13-x}M_x$ ($R = \text{La, Ce, Pr, } \dots, T = \text{Co, Fe and M} = \text{Si, Al}$) haben die Aufmerksamkeit vieler Forscher für Untersuchungen als magnetokalorische Materialien, wegen ihrer sehr großen Magnetostriktion und eventuell auch als permanent magnetische Materialien angezogen [1, 2, 3, 4]. Außer diesen Aspekten für technische Anwendungen zeigen sie auch Eigenschaften, die für die Grundlagenforschung interessant sind, nämlich das auftreten von itinerantem Metamagnetismus und schwachem itinerantem Ferromagnetismus [5, 6, 7]. In der Serie $\text{LaCo}_{13-x}\text{Si}_x$ verschwindet der Ferromagnetismus in der Nähe der stöchiometrischen Verbindung LaCo_9Si_4 , für die eine komplette Translationssymmetrie (Raumgruppe $I4/mcm$) mit Einkristall-Diffraktometrie bestätigt wurde [8, 5]. LaCo_9Si_4 ist ein Pauli Paramagnet mit einer großen Sommerfeldkonstante vom elektronischen Anteil der spezifischen Wärme ($\gamma \simeq 200[\frac{mJ}{molK^2}]$), welcher mit einer durch Spinfluktuation bedingten Elektronen-Massenerhöhung $\lambda_{sf} \sim 3.3$ in Zusammenhang gebracht wird. Die Nähe zur ferromagnetischen Instabilität wurde bei niedrigen externen magnetischen Feldern von 3.5 T für $H \parallel c$ und 6 T für $H \perp c$ beobachtet, bei welchen LaCo_9Si_4 einen metamagnetischen Phasenübergang zeigt, der durch die itineranten Elektronen bedingt ist [5]. Für die Verbindung YCo_9Si_4 ergeben Bandstrukturrechnungen sehr ähnliche Bandeigenschaften für die $\text{Co-}d$ -Bänder wie es bei LaCo_9Si_4 der Fall ist. Ergebnisse aus Messungen der spezifischen Wärme liefern fast die gleichen Resultate für die Sommerfeldkonstante des elektronischen Anteils $\gamma \simeq 200[\frac{mJ}{molK^2}]$. Trotz des kleineren Zellvolumens der Elementarzelle, zeigt YCo_9Si_4 spontanen schwachen itineranten Ferromagnetismus unter $T_C \simeq 25$ K [5]. Andere Verbindungen RCo_9Si_4 (ausser $R = \text{Ce}$, [7]) zeigen Ferromagnetismus (eventuell auch Ferrimagnetismus) mit Übergangstemperaturen von $T_C \simeq 20 - 50$ K [9, 7, 10, 11].

Um die Wechselwirkung zwischen den lokalen $4f$ -Momenten und den

itineranten $3d$ -Momenten zu studieren wurden in dieser Diplomarbeit hauptsächlich die magnetischen Eigenschaften von $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$ (mit x maximal 0.2) untersucht. Denn bei Gd Verbindungen sind Kristallfeldeffekte wegen der halbgefüllten $4f$ -Schale ($^8S_{7/2}$ Grundzustand, $S = \frac{7}{2}$ Spinmoment und Bahndrehimpuls von $L = 0$) zu vernachlässigen.

In dieser Arbeit wurden die Proben $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$ unter Verwendung eines Hochfrequenz-Induktionsofens hergestellt, die Phasenanalyse der Proben wurde mittels Röntgendiffraktion durchgeführt und die Auswertung der Röntgendiffraktionsdaten wurde mit dem Program 'Fullprof' [13] durchgeführt. Die magnetischen Eigenschaften wurden mittels Widerstandsmessungen, Suszeptibilitätsmessungen und Magnetisierungsmessungen untersucht. Für die Beschreibung der magnetischen Eigenschaften von $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$ mit der Molekularfeldtheorie wurde ein Computerprogramm (in der Programmiersprache C) geschrieben.

Chapter 2

Theoretische Konzepte

2.1 Magnetismus

Magnetismus ist untrennbar mit der Quantenmechanik verbunden, denn wie van Leeuwen zeigte [14] kann ein streng klassisches System im thermischen Gleichgewicht, selbst wenn man ein Magnetfeld anlegt, kein magnetisches Moment zeigen. Bei magnetischen Erscheinungen im Festkörper, insbesondere bei Ferro- oder Antiferromagnetismus, mischen sich kollektive und lokale Aspekte [15]. Der Ferromagnetismus der $3d$ -Metalle Ni, Co und Fe entsteht durch Austauschwechselwirkung der weitgehend delokalisierten $3d$ -Elektronen [16]. Für die viele magnetische Verbindungen und insbesondere auch für die $4f$ -Übergangsmetalle und ihren Verbindungen ist eine lokale Beschreibung angebracht [17].

Zu den Seltenen Erden ist zu erwähnen, dass sie sich in ihren chemischen Eigenschaften sehr ähnlich sind [18, 19, 20]. Ihr magnetisches Verhalten ist: ihre magnetischen Momente sind sehr stark lokalisiert und die Hundschen Regeln gelten für den Gesamtspin S (S maximal, der durch das Pauli-Prinzip zugelassen ist), Bahndrehimpuls L (L maximal, der mit dem obigen Wert von S konsistent ist) und für den Gesamtdrehimpuls J ($J = |L - S|$, wenn die Schale weniger als zur Hälfte gefüllt ist, $J = |L + S|$, wenn sie mehr als zur Hälfte gefüllt ist und wenn die Schale genau zur Hälfte gefüllt ist $J = S$). Die chemischen Eigenschaften der dreiwertigen Ionen ähneln sich, weil die äußersten Elektronenschalen $5s^25p^6$ Konfiguration des neutralen Xenon aufweisen. In Lanthan, dem ersten Element vor der Gruppe der seltenen Erden, ist die $4f$ -Schale leer. Cer besitzt ein $4f$ -Elektron und die Anzahl der $4f$ -Elektronen nimmt innerhalb der Gruppe stetig zu, bis bei Lutetium mit $4f^{14}$ die $4f$ -Schale gefüllt ist.

Das unterschiedliche magnetische Verhalten der einzelnen Ionensorten ergibt sich aus der Anzahl der $4f$ -Elektronen. Die Ausdehnung der $4f$ -Wellenfunktion ist ungefähr 0.1 \AA bis 0.2 \AA , die Ausdehnung des Atoms ist aber in der Größenordnung von \AA . Aus diesem Grund ist die direkte Wechselwirkung der $4f$ -Elektronen vernachlässigbar. Eine indirekte Wechselwirkung der $4f$ -Elektronen mit den Leitungselektronen kommt durch die RKKY-Wechselwirkung (Rudermann, Kittel [21], Kasuya [22] and Yoshida [23]) zustande. Selbst in den Metallen bleibt der $4f$ -Ionenrumpf annähernd unversehrt und behält seine atomaren Eigenschaften. D.h., dass die Hundschen gut erfüllt sind und somit der Gesamtbahndrehimpuls J und die z -Komponente des Bahndrehimpulses L_z noch gute Quantenzahlen sind.

2.1.1 Die Molekularfeldtheorie des Ferromagnetismus

Eine einfache Theorie zur Beschreibung magnetischer Eigenschaften geht von der Annahme lokalisierter Momente im Kristall aus. So wird jedem Ion auf den verschiedenen Gitterplätzen ein gewisses magnetisches Moment zugeordnet. Die Wechselwirkung eines Atoms mit den übrigen im Kristall, wird durch das sogenannte Molekularfeld H_e , das von Pierre Weiss (1907) [24] postuliert wurde, beschrieben.

$$\mathbf{H}_e = \gamma \mathbf{M}, \quad (2.1)$$

dabei ist M die Magnetisierung aller Atome und γ eine Konstante, der sogenannte Weiss'sche Molekularfeldkoeffizient. Dieser phänomenologische Ansatz erhält durch den Heisenberghamiltonoperator seine mikroskopische Rechtfertigung.

$$\mathcal{H}_H = -2 \sum_{i < j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (2.2)$$

Woraus für ein Atom ein Atom folgt

$$\mathcal{H}_1 = -2J \mathbf{S}_i \cdot \sum_{j=1}^Z \mathbf{S}_j. \quad (2.3)$$

wobei die Summation nur über die Z nächsten Nachbarn des i -ten Atoms durchgeführt wird, und J das Austauschintegral darstellt. Der magnetische Einfluß der Nachbaratome kann somit durch das Molekularfeld ausgedrückt werden.

$$\mathcal{H}_1 = -g\mu_B \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}_e, \quad (2.4)$$

Gleichung (2.3) und (2.4) zusammengefaßt ergeben:

$$H_e = \frac{2J}{g\mu_B} \sum_{j=1}^Z \mathbf{S}_j. \quad (2.5)$$

Mit der Annahme, dass die Atome gleichartig sind, kann man die Summe über die \mathbf{S}_j durch ihren Mittelwert $\langle \mathbf{S}_j \rangle$ (mikroskopischer Kern der Molekularfeldtheorie) ersetzen. Die Gesamtmagnetisierung des Kristalls ist dann

$$\mathbf{M} = Ng\mu_B \langle \mathbf{S}_j \rangle, \quad (2.6)$$

und

$$\mathbf{H}_e = \frac{2zJ}{g\mu_B} \langle \mathbf{S}_j \rangle = \frac{2zJ}{Ng^2\mu_B^2} \mathbf{M}, \quad (2.7)$$

woraus der Molekularfeldkoeffizient γ folgt

$$\gamma = \frac{2zJ}{Ng^2\mu_B^2}. \quad (2.8)$$

Der Molekularfeldkoeffizient γ ist also sowohl der Anzahl der Nachbarn Z , als auch dem Austauschintegral J proportional und charakterisiert sowie letzteres die magnetischen Eigenschaften. Ist γ größer als 0 so liegt eine parallele und kleiner 0 eine antiparallele Kopplung der magnetischen Momente vor. Interessiert auch das Verhalten in einem von außen angelegten Feld \mathbf{H}_0 , so ist in obigen Überlegungen das Molekularfeld durch das effektive Feld

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_e, \quad (2.9)$$

zu ersetzen. Für ein Atom führt das auf

$$\mathcal{H}_1 = -g\beta S_z H_{\text{eff}}, \quad (2.10)$$

mit den Energieeigenwerten

$$E = -g\mu_B m H \quad m = S, S-1, \dots, -S, \quad (2.11)$$

Der Hamiltonoperator (2.10) entspricht genau dem Hamiltonoperator eines einfachen Paramagneten. Das berechtigt zu analogen Überlegungen wie bei diesem:

$$M = Ng\mu_B B_S(hS), \quad (2.12)$$

mit B_S der Brioullionfunktion und

$$h = \frac{g\mu_B H_{\text{eff}}}{k_B T}. \quad (2.13)$$

Für $h \ll 1$, d.h. vor allem für große Temperaturwerte, kann die Brioullinfunktion vereinfacht werden, woraus für die Magnetisierung

$$M = \frac{Ng^2\mu_B^2 S(S+1)}{3k_B T} H_{eff} = \frac{CH_{eff}}{T}, \quad (2.14)$$

folgt, mit $\mathbf{H}_{eff} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_e = \mathbf{H}_0 + \gamma M$ folgt aus (2.14):

$$\chi = \frac{M}{H_0} = \frac{C}{T - \theta}, \quad (2.15)$$

wobei

$$\theta = \frac{2ZJS(S+1)}{3k_B}. \quad (2.16)$$

Dieses Ergebnis beschreibt das paramagnetische Verhalten von Ferromagneten. Gleichung (2.15) ist bekannt als das Curie-Weiss'sche Gesetz, θ ist die sogenannte paramagnetische Curietemperatur, die, wie γ , von Z und J abhängt. θ ist also für einen Ferromagneten größer 0. Auch antiferromagnetisches Verhalten kann mithilfe der Molekularfeldtheorie beschrieben werden wobei der allgemeinere Fall Ferrimagnetismus ist [30, 31, 32]. Dazu muss das Gitter der magnetischen Momente in zwei Untergitter A und B geteilt werden, und zwar so, dass die A -Atome nur B -Atome als nächste Nachbarn haben und die B -Atome nur A -Atome. Zwischen A und B -Atomen herrscht negativer Austausch herrschen.

2.1.2 Die Néeltheorie des Ferrimagnetismus

Sie war die erste theoretische Erklärung für das magnetische Verhalten der Ferrite (Ferrimagnetismus) [30, 31, 32, 33, 34]. Sie beruht auf der allgemeineren Annahme von 2 oder mehr magnetischen Untergittern, die parallel oder antiparallel gekoppelt sind. Wieder werden im einfachsten Fall zwei verschiedene Plätze, der magnetischen Atome, im Kristallgitter, d.h. zwei magnetische, ineinandergeschachtelte Untergitter A und B , angenommen. Im Fall von 2 Untergittern A und B : Die A -Atome haben den Spin S_A und den Landefaktor g_A , und die B -Atome haben den Spin S_B und den Landefaktor g_B , so kann die Wechselwirkung zwischen den beiden Atomen durch das Molekularfeld

$$H_{ab} = \frac{2Z_{ab}J_{ab}}{N_b g_a g_b \mu_B^2} M_b = \gamma_{ab} M_b, \quad (2.17)$$

beschrieben werden. J_{ab} ist dabei das Austauschintegral, Z_{ab} die Zahl der B -Nachbarn eines A -Atoms, N_b die Gesamtzahl der B -Atome im Gitter und H_{ab} das Feld, die A -Atome von den B -Atomen her spüren. Weiters ergibt sich die Gesamt Curiekonstante

$$C = C_a + C_b, \quad (2.18)$$

aus den Untergitter Curiekonstanten oder mit

$$\lambda = \frac{C_a}{C} \quad \text{und} \quad \mu = \frac{C_b}{C},$$

folgt daraus

$$\lambda + \mu = 1. \quad (2.19)$$

Man betrachtet aber hier sowohl die Wechselwirkung A - B , als auch die der gleichartigen Atome miteinander. Das ergibt insgesamt folgende Molekularfelder:

$$H_{aa} = \gamma_{aa}M_a, \quad H_{bb} = \gamma_{bb}M_b,$$

$$H_{ab} = \gamma_{ab}M_b, \quad H_{ba} = \gamma_{ba}M_a.$$

Wobei die Molekularfeld-Koeffizienten nach der Formel (2.17) definiert sind. In einem äußeren Feld H_0 ergeben sich schließlich die toalen Felder

$$H_a = H_0 + \gamma_{aa}M_a + \gamma_{ab}M_b \quad (2.20)$$

$$H_b = H_0 + \gamma_{ba}M_a + \gamma_{bb}M_b, \quad (2.21)$$

oder allgemein für n Untergitter

$$H_n = H_0 + \gamma_{nm}M_m, \quad (2.22)$$

bzw. die Untergittermagnetisierungen

$$M_a = M_{a_0} B_{S_a} \left(\frac{g_a \mu_B S_a H_a}{k_B T} \right) \quad (2.23)$$

$$M_b = M_{b_0} B_{S_b} \left(\frac{g_b \mu_B S_b H_b}{k_B T} \right), \quad (2.24)$$

M_{a_0} und M_{b_0} sind die Untergittersättigungsmagnetisierungen für $T = 0$ oder wieder für n Untergitter

$$M_n = M_{n_0} B_{S_n} \left(\frac{g_n \mu_B S_n H_n}{k_B T} \right). \quad (2.25)$$

Für bekannte Molekularfeldkoeffizienten γ_{nm} können so aus den Gleichungen (2.23) und (2.24) die Magnetisierungen M_n ausgerechnet werden. Dies ist jedoch wegen der transzendenten Gleichungen nur über ein Iterationsverfahren möglich. In dieser Diplomarbeit wurde um die Gleichungen (2.23) und (2.24) zu lösen eine multidimensionale rootfinding Methode verwendet.

Anders hingegen ist die Situation für hohe Temperaturwerte (paramagnetisches Verhalten), da die Hochtemperaturentwicklung der Brillouinfunktion, die Situation vereinfacht.

Die Untergittermagnetisierungen

$$M_a = \frac{C_a}{T} H_a = \frac{C_a}{T} (H_0 + \gamma_{aa} M_a + \gamma_{ab} M_b) \quad (2.26)$$

$$M_b = \frac{C_b}{T} H_b = \frac{C_b}{T} (H_0 + \gamma_{ba} M_a + \gamma_{bb} M_b) \quad (2.27)$$

mit

$$\chi_n = \frac{M_n}{H_0}, \quad (2.28)$$

$$\begin{pmatrix} T - C_a \gamma_{aa} & -C_a \gamma_{ab} \\ -C_b \gamma_{ba} & T - C_b \gamma_{bb} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \chi_a \\ \chi_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_a \\ C_b \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

$$A_{nm} \chi_n = C_n, \quad (2.30)$$

$$\chi_a = \frac{\begin{vmatrix} C_a & -C_a \gamma_{ab} \\ C_b & T - C_b \gamma_{ab} \end{vmatrix}}{|A_{nm}|} \quad (2.31)$$

$$\chi_b = \frac{\begin{vmatrix} T - C_a \gamma_{aa} & C_a \\ -C_b \gamma_{ab} & C_b \end{vmatrix}}{|A_{nm}|} \quad (2.32)$$

ergeben die Gesamtsuszeptibilität

$$\begin{aligned} \chi_{ges} &= \chi_a + \chi_b \\ &= \frac{aT + b}{T^2 + fT} \\ &= \frac{CT + \lambda\mu C^2 \gamma_{ab} (2 - \frac{\gamma_{aa}}{\gamma_{ab}} - \frac{\gamma_{bb}}{\gamma_{aa}})}{T^2 - CT \gamma_{ab} (\lambda \frac{\gamma_{aa}}{\gamma_{ab}} + \mu \frac{\gamma_{bb}}{\gamma_{ab}}) + \lambda\mu C^2 \gamma_{ab}^2 (\frac{\gamma_{aa} \gamma_{bb}}{\gamma_{ab}^2} - 1)} \end{aligned} \quad (2.33)$$

wie aus den Determinanten zu sehen ist. Die übliche Darstellung der Temperaturabhängigkeit der Suszeptibilität von der Temperatur als $\frac{1}{\chi}$ über T führt auf

$$\frac{1}{\chi} = \frac{T - \theta}{C} - \frac{\eta}{T - \theta'}, \quad (2.34)$$

eine Hyperbel, die sogenannte Néel-Hyperbel mit den Parametern C , θ , η und θ' , in welchen die Hyperbel eindeutig bestimmt ist.

Sie stellt eine Verallgemeinerung des Curie-Weiss'schen Gesetzes dar, genauso wie Ferrimagnetismus eine Verallgemeinerung des Modells für Ferro- bzw. Antiferromagnetismus ist. Weiters ergeben sich daraus die Abhängigkeiten:

$$\theta = C\gamma_{ab}\lambda\mu\left(2 + \frac{\lambda\gamma_{aa}}{\mu\gamma_{ab}} + \frac{\mu\gamma_{bb}}{\lambda\gamma_{ab}}\right), \quad (2.35)$$

$$\theta' = -C\gamma_{ab}\lambda\mu\left(2 - \frac{\gamma_{aa}}{\gamma_{ab}} - \frac{\gamma_{bb}}{\gamma_{ab}}\right), \quad (2.36)$$

$$\eta = C\gamma_{ab}^2\left(\lambda\left(1 - \frac{\gamma_{aa}}{\gamma_{ab}}\right) - \mu\left(1 - \frac{\gamma_{bb}}{\gamma_{ab}}\right)\right)^2, \quad (2.37)$$

woraus folgt:

$$\theta = 2C\lambda\mu\gamma_{ab} + C\lambda^2\gamma_{aa} + C\mu^2\gamma_{bb}, \quad (2.38)$$

$$\theta' = -2C\lambda\mu\gamma_{ab} + C\lambda\mu\gamma_{aa} + C\lambda\mu\gamma_{bb}, \quad (2.39)$$

$$\pm\sqrt{\frac{\eta}{C\lambda\mu}} = \gamma_{ab}(\lambda - \mu) - \lambda\gamma_{aa} + \gamma_{bb}. \quad (2.40)$$

Für bekannte Parameter C , θ , η und θ' können aus den Gleichungen (2.38) bis (2.39) die Molekularfeldkoeffizienten γ_{nm} ausgerechnet werden. Üblicherweise unterscheidet man beim ferromagnetischen Zwischengitter Austausch zwischen A-B und antiferromagnetischen Zwischengitter Austausch. Beim ferromagnetischen Zwischengitter Austausch ist γ_{ab} positiv und beim antiferromagnetischen Zwischengitter Austausch ist γ_{ab} negativ.

Ferromagnetischer Zwischengitter Austausch $\gamma_{ab} > 0$

Im Bereich der spontanen Magnetisierung stehen hier also beide Gitter zueinander parallel. J_{ab} bzw. γ_{ab} ist größer als Null.

Nach außen wirkt diese Art der Kopplung wie ein Ferromagnet, nur dass im Gegensatz zu diesem die Untergittermagnetisierungen im allgemeinen nicht gleich groß sind. Natürlich ist der Ferromagnet in dieser Gruppe als Spezialfall enthalten. Es gilt für diesen:

$$\lambda = \mu = \frac{1}{2},$$

und

$$\alpha = \beta,$$

mit

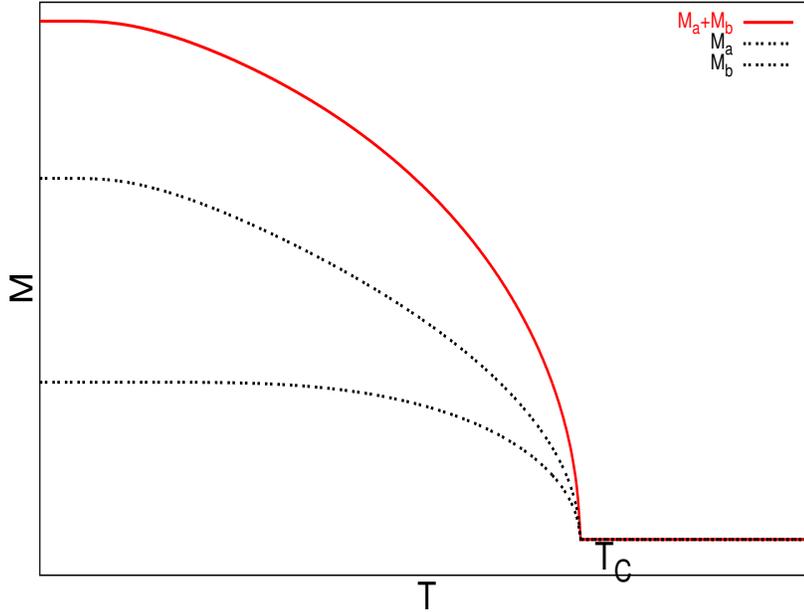


Figure 2.1: Schematische Darstellung der Gesamtmagnetisierung $M = M_a + M_b$ und den Untergittermagnetisierungen M_a und M_b bei positiven Austausch.

$$\alpha = \frac{\gamma_{aa}}{\gamma_{ab}} \quad \beta = \frac{\gamma_{bb}}{\gamma_{ab}}.$$

Wie aus den Gleichungen (2.34 - 2.36) zu ersehen, geht die Néel-Hyperbel dann in das Curie-Weiss'sche Gesetz über. Die Form der Kurven M , M_a und M_b über T hängt neben λ und μ hauptsächlich von den Molekularfeldkoeffizienten ab. Je nach Größe von α und β lassen sich verschiedene Magnetisierungstypen feststellen. Um diejenige Temperatur zu erhalten, unterhalb derer es zu einer spontanen Ordnung kommt, muss χ in Gleichung (2.33) unendlich, also der Nenner gleich Null gesetzt werden.

Das führt auf die Ordnungstemperatur:

$$T_C = \frac{1}{2} C \gamma_{ab} \left[\lambda \alpha + \mu \beta + \sqrt{(\lambda \alpha - \mu \beta)^2 + 4 \alpha \mu} \right] \quad (2.41)$$

Betrachtet man in Abbildung 31 nur die Größen α und β im Bereich G

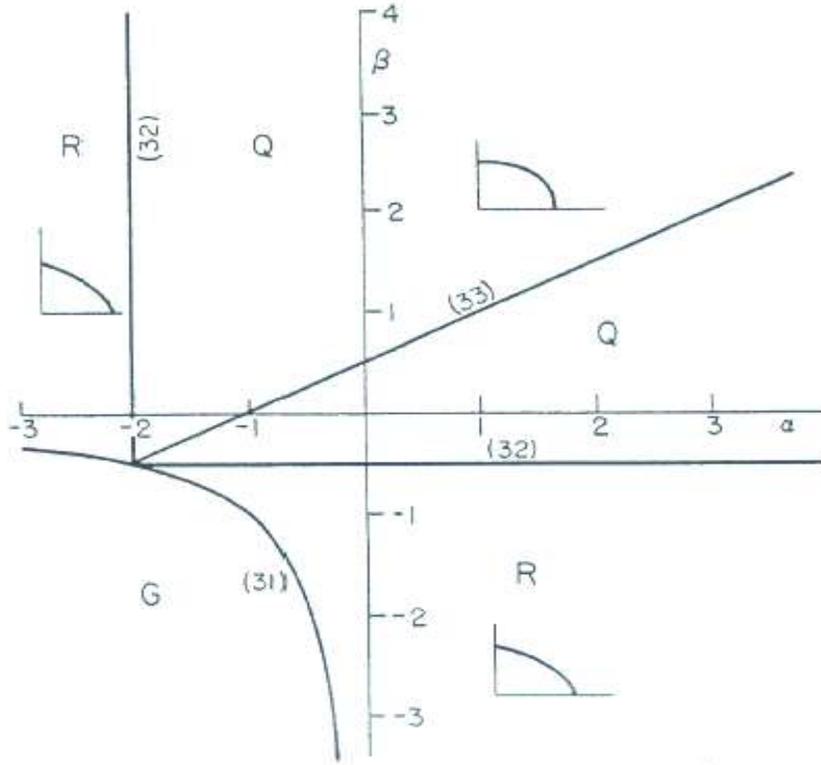


Figure 2.2: Schematische Darstellung der verschiedenen Arten der Magnetisierungen für verschiedene α und β beim positiven Austausch. Die Gerade 31 stellt $\alpha\beta = 1$, die Gerade 32 stellt $\alpha = -\frac{\mu}{\lambda}$ und $\beta = -\frac{\lambda}{\mu}$, die Gerade 33 stellt $\lambda(1 - \alpha) = \mu(1 - \beta)$ dar, Abbildung aus Ref. [32].

(abgegrenzt durch die Hyperbel $\alpha\beta = 1$), so ergibt sich für solche Molekularfeldkoeffizienten ($\gamma_{aa} < 0$, $\gamma_{bb} < 0$ und $\gamma_{ab} > 0$) T_C immer kleiner Null. Es kommt also im gesamten Temperaturbereich zu keiner spontanen Magnetisierung. Im übrigen Bereich des Diagramms ist T_C größer Null. Die zwei Untergitter ordnen spontan. Kurven des Typs Q (abgegrenzt durch $\alpha = -\frac{\mu}{\lambda}$ bzw. $\beta = -\frac{\lambda}{\mu}$ für diese α und β geht die Asymptote der Néelhyperbel durch den Nullpunkt) zeichnen sich durch Sättigung der Untergittermagnetisierungen am absoluten Nullpunkt aus.

$$\sigma = \frac{M}{M_0}|_{T=0} = 1, \quad (2.42)$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{d\sigma}{dT} = 0, \quad (2.43)$$

$$\lim_{T \rightarrow T_0} \frac{d\sigma}{dT} = -\infty. \quad (2.44)$$

Hingegen ist bei Magnetisierungen vom Typ R, durch das zu große Bestreben nach Antiparallelstellung einer der Komponenten (γ_{aa} oder $\gamma_{bb} < 0$), eines der beiden Untergitter am absoluten Nullpunkt nicht gesättigt.

$$\sigma|_{T=0} \neq 1, \quad (2.45)$$

$$\frac{d\sigma}{dT}|_{T=0} \neq 0. \quad (2.46)$$

Für die Molekularfeldkoeffizienten auf der Geraden

$$\lambda(1 - \alpha) = \mu(1 - \beta), \quad (2.47)$$

gilt $H_a = H_b$ und die Néelhyperbel geht wieder in das Curie-Weisse'sche Gesetz über.

Antiferromagnetischer Zwischengitter Austausch $\gamma_{ab} < 0$

Hier stehen nun im Bereich der spontanen Magnetisierung beide Untergitter zueinander antiparallel. J_{ab} bzw. γ_{ab} ist kleiner Null.

Wenn man in den Gleichungen (2.33) bis (2.37) γ_{ab} durch $-\gamma_{ab}$ ersetzt kommt man auf

$$\theta = -C\gamma_{ab}\lambda\mu\left(2 - \frac{\lambda\gamma_{aa}}{\mu\gamma_{ab}} - \frac{\mu\gamma_{bb}}{\lambda\gamma_{ab}}\right), \quad (2.48)$$

$$\theta' = C\gamma_{ab}\lambda\mu\left(2 + \frac{\gamma_{aa}}{\gamma_{ab}} + \frac{\gamma_{bb}}{\gamma_{ab}}\right), \quad (2.49)$$

$$\eta = C\gamma_{ab}^2\left(\lambda\left(1 + \frac{\gamma_{aa}}{\gamma_{ab}}\right) - \mu\left(1 + \frac{\gamma_{bb}}{\gamma_{ab}}\right)\right)^2, \quad (2.50)$$

woraus folgt

$$\theta = -2C\gamma\mu\gamma_{ab} + C\lambda^2\gamma_{aa} + C\mu^2\gamma_{bb}, \quad (2.51)$$

$$\theta' = 2C\gamma\mu\gamma_{ab} + C\lambda\mu\gamma_{aa} + C\lambda\mu\gamma_{bb}, \quad (2.52)$$

$$\pm\sqrt{\frac{\eta}{C\lambda\mu}} = \gamma_{ab}(\mu - \lambda) - \lambda\gamma_{aa} + \mu\gamma_{bb}, \quad (2.53)$$

woraus wiederum folgt,

$$\theta + 2C\gamma\mu\gamma_{ab} + C\lambda^2\gamma_{aa} + C\mu^2\gamma_{bb} = 0, \quad (2.54)$$

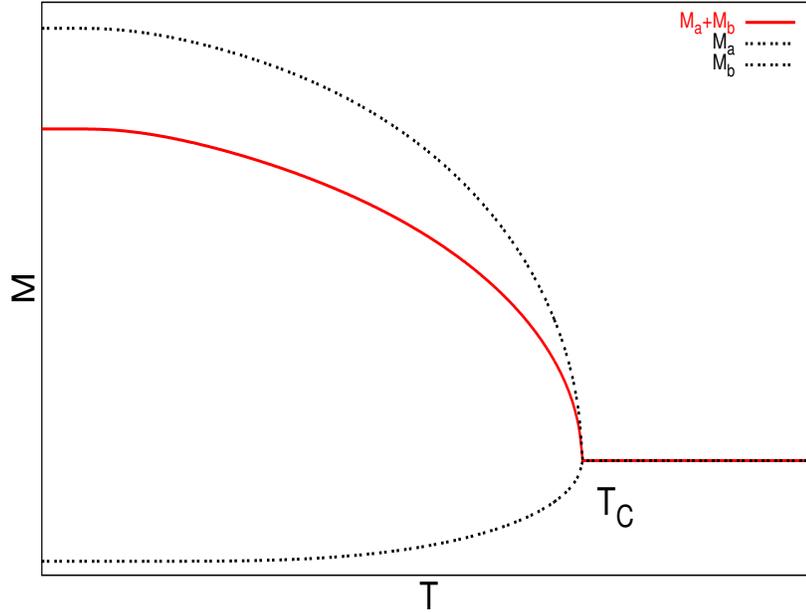


Figure 2.3: Schematische Darstellung der Gesamtmagnetisierung $M = M_a - M_b$ und den Untergittermagnetisierungen M_a und M_b bei negativem Austausch.

$$\theta' - 2C\gamma\mu\gamma_{ab} + C\lambda\mu\gamma_{aa} + C\lambda\mu\gamma_{bb} = 0, \quad (2.55)$$

$$\pm \sqrt{\frac{\eta}{C\lambda\mu}} + \gamma_{ab}(\lambda - \mu) + \lambda\gamma_{aa} - \mu\gamma_{bb} = 0. \quad (2.56)$$

Aus diesen drei Gleichungen folgen die drei Molekularfeldkoeffizienten aus denen wiederum die Magnetisierung berechnet werden kann. In dieser Arbeit werden die Gleichungen (2.54) bis (2.56) durch ein iteratives Verfahren gelöst, es gibt 2 verschiedene Lösungen für die γ_{ij} , weil die Wurzel in Gleichung (2.56) sowohl positiv als auch negativ sein kann, die γ_{ij} , die besser mit dem Experiment übereinstimmen werden verwendet. Mit den γ_{ij} aus den Gleichungen (2.54) bis (2.56) berechnet sich die Gesamtmagnetisierung dann aus

$$M_{ges} = M_a - M_b. \quad (2.57)$$

Im Falle des negativen Austauschs sind die Kurventypen der Néelhyperbel mannigfaltiger, wie man in Abbildung 2.4 sehen kann. Die Typen P, Q und N zeichnen sich wieder durch Sättigung am absoluten Nullpunkt aus. Beim Typ N (abgegrenzt durch die Gerade $\lambda(1 + \alpha) = \mu(1 + \beta)$) kommt es zu einem Nulldurchgang der Magnetisierung (Kompensationspunkt). Die Magnetisierungen beider Untergitter sind also bei einer gewissen Temperatur T gleich groß nur entgegengesetzt gerichtet.

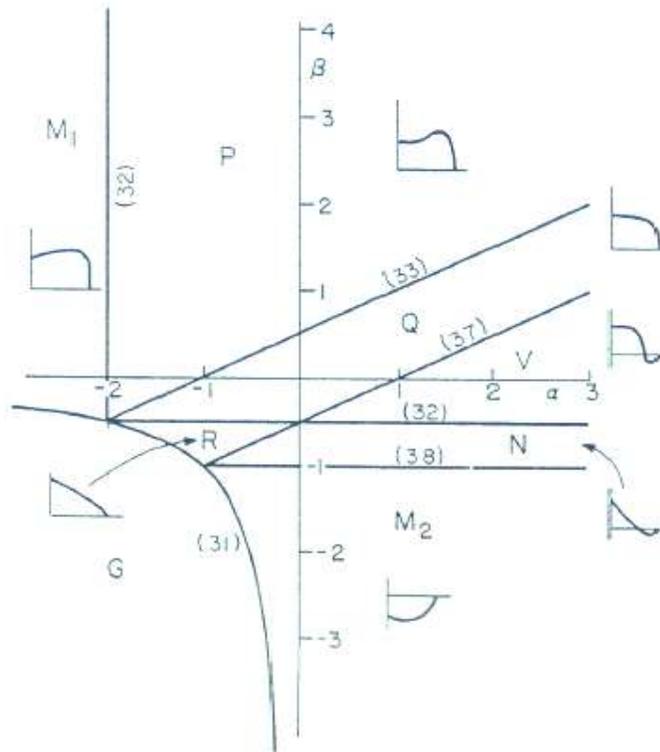


Figure 2.4: Schematische Darstellung der verschiedenen Arten der Magnetisierungen für verschiedene α und β beim negativen Austausch, Abbildung aus [32].

Die Typen M_1 , M_2 , R und V sind wieder nicht gesättigt. Oft wird dieses Nichtgesättigtsein, welches ja eigentlich dem dritten Hauptsatz der Wärmelehre widerspricht, durch gekantete magnetische Strukturen erklärt.

2.1.3 Itineranter Magnetismus

Bei itinerantem Magnetismus oder Bandmagnetismus werden die magnetischen Eigenschaften durch delokalisierte Elektronen (sogenannten Bandelektronen) bestimmt, wobei die Einelektronenterme durch eine Korrelation von Elektronen mit gleichem Spin ersetzt werden. Das Modell geht auf Stoner [35] und Wohlfarth [36] zurück.

Das Ergebnis der Suszeptibilität im Bandmodell lautet

$$\chi_S = \frac{\chi_P}{1 - I_s N(E_F)} \quad (2.58)$$

mit

$$\chi_P = 2\mu_B^2 N(E_F) \quad (2.59)$$

Wobei χ_P in (2.58) die Pauli-Suszeptibilität der Bandelektronen ist. In Ref. [17] ist eine genaue Ableitung von (2.58). Die Quantität in I_s in (2.58) ist der Stoner Wechselwirkungsfaktor, welche für verschiedene Metalle verschiedene Werte hat. Der Nenner in (2.58) erlaubt es ein Kriterium für spontane Magnetisierung zu formulieren. Wenn in der paramagnetischen Phase der Nenner in (2.58) negativ ist, ist die daraus resultierende Suszeptibilität negativ, was im Bandmodell aber unphysikalisch ist. Das heisst, dass die paramagnetische Phase kein Minimum der totalen Energie darstellt sondern ein lokales Maximum, damit muss ein magnetisch geordneter Zustand eine niedrigere totale Energie haben. Das ist das sogenannte Stoner-Kriterium für das Auftreten von Ferromagnetismus, welches wie folgt lautet

$$I_s N(E_F) \geq 1. \quad (2.60)$$

Unter der Voraussetzung, dass dieses Kriterium erfüllt ist, liefert das Stoner-Modell auch die Temperatur, bei der das magnetische Moment verschwindet (Curietemperatur),

$$T_C^2 = T_F^2 (I_s N(E_F) - 1). \quad (2.61)$$

Gleichung (2.61) verbindet die Fermitemperatur T_F und die Curietemperatur T_C . Aber da die Fermitemperatur T_F immer in der Ordnung von einigen Tausend Kelvin liegt, liefert (2.61) nur dann vernünftige Werte für T_C wenn $(I_s N(E_F) - 1)$ sehr klein wird. Das heisst, dass die Stoner-Theorie nur auf sehr schwache itinerante Systeme [5, 6, 37, 38, 39] anwendbar ist, aber bei den meisten üblichen magnetischen Materialien versagt.

2.2 Elektrischer Widerstand

In einem Metall mit magnetischen Ionen sind im Zusammenhang mit dem elektrischen Widerstand drei primäre Streumechanismen in Betracht zu

ziehen. Diese sind Streuung der Elektronen an Fremdatomen und Gitterdefekten, der sog. Potentialstreuung, Streuung der Elektronen an Gitterschwingungen, der sog. Phononenstreuung, und magnetische Streuung [40]. Letztere kann sowohl durch kollektive wie auch durch Einzelionen-Anregungen bedingt sein (sog. paramagnetischer Spin-disorder Streuung). Sind die verschiedenen Streueignisse und somit auch die inverse Relaxationszeit $\frac{1}{\tau}$, zumindest in guter Näherung von einander unabhängig, so können die jeweiligen Beiträge zum elektrischen Widerstand nach der Matthiessen Regel als additiv angenommen werden,

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_{ph}} + \frac{1}{\tau_{mag}}, \quad (2.62)$$

$$\varrho(T) = \varrho_0 + \varrho_{ph}(T) + \varrho_{mag}(T). \quad (2.63)$$

ϱ_0 , der Restwiderstand, verursacht einen konstanten Widerstandsbeitrag über den gesamten Temperaturbereich, wird aber erst bei tiefen Temperaturen erkennbar. Er wird durch Fremdatome an Gitterfehlstellen verursacht. ϱ_{ph} wird durch Streuung der Elektronen an Phononen erzeugt. Dieser ist temperaturabhängig und kann in vielen Fällen mittels der Bloch-Grüneisen Gleichung [41, 42, 43], die sich durch einen Variationsansatz aus der linearisierten Boltzmann Gleichung ergibt wird, berechnet werden

$$\varrho_{ph}(T) = C\theta_D \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^5 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{z^5}{(e^z - 1)(1 - e^{-z})} dz \quad (2.64)$$

In dieser Gleichung sind mehrere Näherungen, wie die Annahme von nur longitudinalen Phononen, Vernachlässigung von Umklappprozessen oder die Annahme eines Debyespektrums für die Phononen, gemacht worden. θ_D ist die Debyetemperatur, sie gibt die höchste Phononenenergie an. C ist eine Konstante, welche zur Elektron-Phonon Wechselwirkungstärke proportional ist. Für $T \gg \theta_D$ und $T \ll \theta_D$ kann man die Exponentialfunktionen in (2.64) in ihre Taylorreihen entwickeln. Man erhält somit für ϱ_{ph}

$$\varrho_{ph}(T) \approx \left(\frac{124.4C}{\theta_D}\right) \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^5 \quad T \ll \theta_D, \quad (2.65)$$

$$\varrho_{ph}(T) \approx \left(\frac{C}{4}\right) \left(\frac{T}{\theta_D^2}\right) \quad T \gg \theta_D. \quad (2.66)$$

Die Hochtemperaturentwicklung zeigt die bekannte lineare Temperaturabhängigkeit des elektrischen Widerstandes normaler Metalle. Sind außer den genannten Streuprozessen der Leitungselektronen auch Wechselwirkungen mit magnetischen Momenten zu berücksichtigen, so ergibt sich der zusätzliche Beitrag $\rho_{mag}(T)$.

Werden nur lokale magnetische Momente berücksichtigt, so wie sie in nahezu idelaer Weise die $4f$ -Momente der seltenen Erden darstellen, so folgt aus der Störungsrechnung im Rahmen des Heisenbergmodells der Beitrag für $\rho_{mag}(T)$ [44, 45, 46, 47, 48]. Für den paramagnetischen Temperaturbereich ($T > T_C$), indem die lokalen Spins unabhängig voneinander sind, findet man einen temperaturunabhängigen Beitrag

$$\rho_{mag} = \frac{3\pi N m^*}{2\hbar e^2 E_F} |J|^2 (g-1)^2 j(j+1), \quad (2.67)$$

dessen Größe vom sogenannten de Gennes-Faktor $(g-1)^2 j(j+1)$ bestimmt wird. g stellt dabei den Landé-Faktor und j den gesamten Drehimpuls des magnetischen Ions dar. J ist die Kopplungskonstante zwischen den Leitungselektronenspins und den magnetischen Momenten. Im magnetisch geordneten Bereich ($T < T_C$) ergibt sich dagegen eine ausgeprägte Temperaturabhängigkeit. Nimmt man z.B. die ferromagnetische Spinwellendispersionsrelation mit $\omega(q) \propto q^2$ an, so erhält man

$$\rho_{mag}(T) = AT^2, \quad (2.68)$$

wobei A eine Konstante darstellt, siehe Ref. [48]. Abbildung 2.5 zeigt die schematische Temperaturabhängigkeit, die sich aus den beschriebenen Beiträgen ergibt.

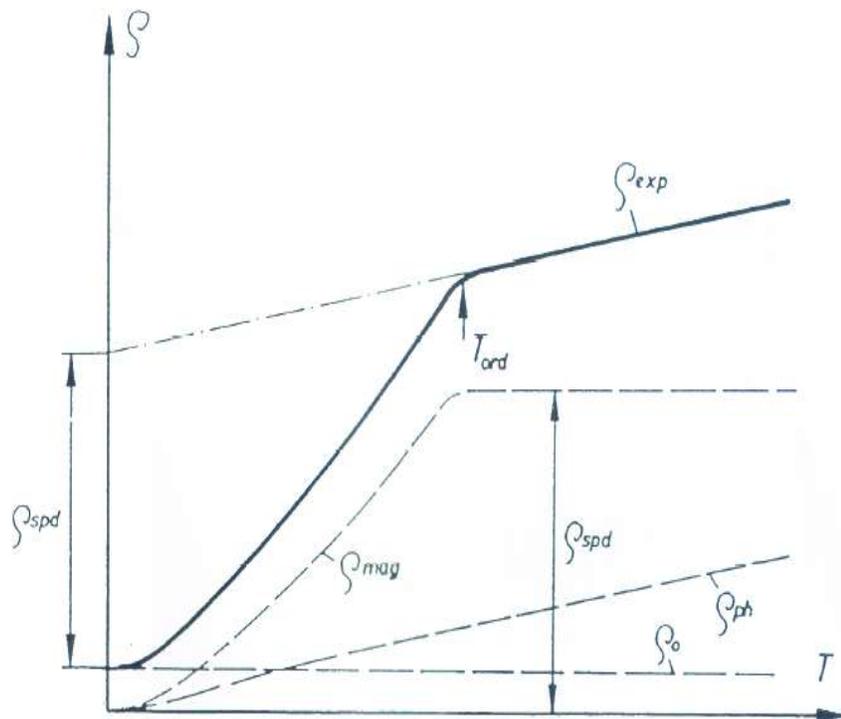


Figure 2.5: Schematische Temperaturabhängigkeit des elektrischen Widerstandes magnetischer Seltener-Erd-Verbindungen mit vernachlässigbarem d -Elektronenanteil Abbildung aus Ref. [48].

Chapter 3

Experimentelles

3.1 RF-SQUID-Magnetometrie

Das im folgenden beschriebene RF-SQUID-Magnetometer [49] dient zur Messung der Magnetisierung von kleinen Proben.

Um nun die Magnetisierung sehr genau messen zu können, ist es notwendig den Fluß in der Schleife möglichst genau zu bestimmen, dies wird mit einem SQUID gemacht.

Die Flußquantisierungsbedingung in einem Supraleitenden Ring lautet:

$$\phi_n = \frac{nh}{2e}, \quad \phi_0 = \frac{h}{2e}. \quad (3.1)$$

Der Fluß im Inneren kann auch als Funktion des äußeren Flusses und des Abschirmstromes dargestellt werden.

$$\phi_I = n\phi_0 = \phi_a + LI_S. \quad (3.2)$$

Wenn man das äußere Feld erhöht wird in der Supraleiter-Schleife ein Suprastrom induziert, so dass der Fluß im inneren konstant bleibt. Dieser Strom I_S wird als Abschirmstrom bezeichnet. Erhöht man nun den von außen angelegten Fluß, so bleibt das Feld im inneren konstant bis ein kritischer Zustand erreicht wird.

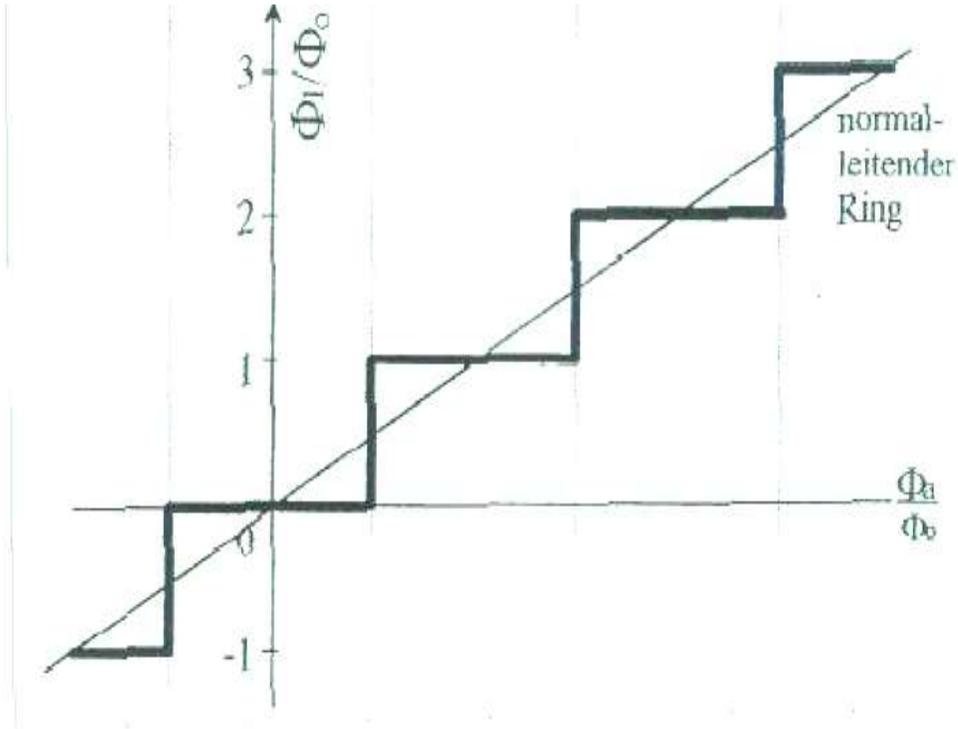


Figure 3.1: Magnetischer Fluß ϕ_i in einem Ring mit einem Punktkontakt als Bereich schwacher Kopplung als Funktion als Funktion im Außenbereich $\frac{\phi_a}{\phi_0}$.

Überschreitet der Abschirmstrom I_S den kritischen Strom I_C im Supraleiter, wird der Ring für kurze Zeit normalleitend und ein Flußquant kann in den Ring eindringen. Da nun aber das Feld im inneren kleiner als das Feld im Außenraum ist wird wieder ein Abschirmstrom angeworfen der nun nicht den nötigen Fluß kompensiert sondern diesen generiert. Erhöht man den äußeren Fluß konstant so ergibt sich ein Verlauf für den Fluß im Inneren wie er in Abbildung 3.1 dargestellt ist. Die Gerade, die durch die Treppenfunktion läuft stellt den Verlauf des Flusses für einen normalleitenden Ring dar.

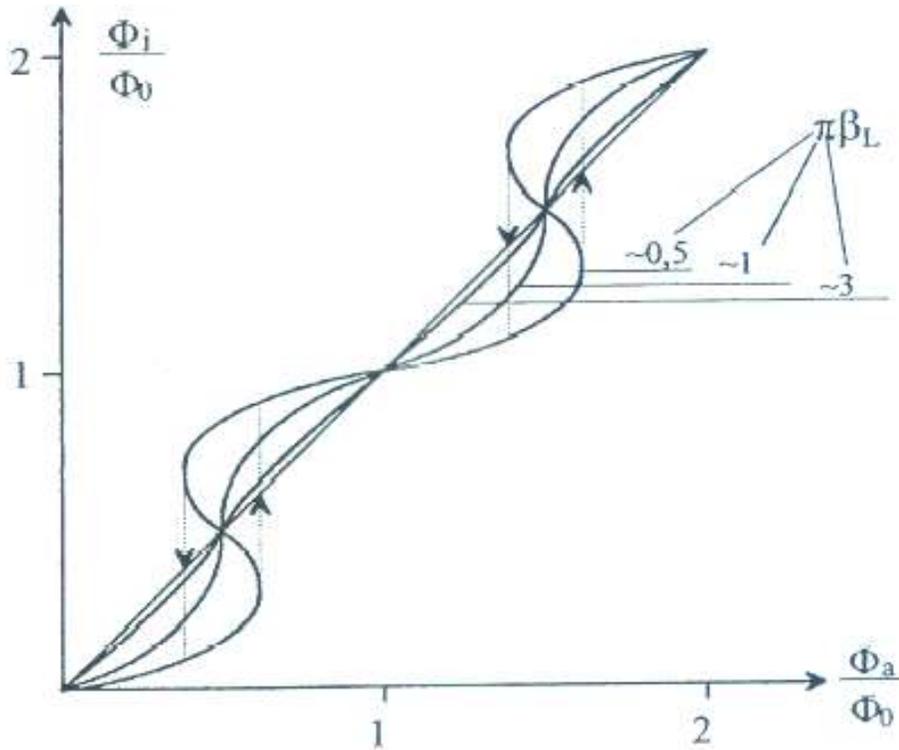


Figure 3.2: Verlauf des Flusses im Inneren eines SL-Ringes mit einem Weak-Link in Abhängigkeit von β_L .

Weak Link

Ein Weak-Link ist eine Schwachstelle im SL-Ring mit einem deutlich kleineren I_C als der restliche Ring. Ein Weak-Link kann gewollt durch den Einbau einer Korngrenzschicht und einer Oxydbarriere erreicht werden. Ein Weak-Link beeinflusst die Eigenschaften eines SL-Ringes wesentlich. In Gleichung (3.2) sieht man, dass bei der Flußquantisierung nur L als variable Größe auftritt, da I_S mit I_C begrenzt ist und dies eine Materialkonstante darstellt. Durch ein Weak-Link ist es aber auch möglich den kritischen Strom im Ring einzustellen und somit ist es nicht mehr nötig über L , d.h. über eine andere Geometrie, den Faktor $\phi_C = LI_C$ auf ein gewünschtes Verhältnis von $\frac{\phi_0}{2}$ zu bringen. Aber durch ein Weak-Link verändern sich auch andere Eigenschaften des Ringes und das Verhalten bei der Flußquantisierung. Das Verhalten von einem Weak-Link wurde als erstes von B.D. Josephson entdeckt. In [50] sind die Josephson-Effekte gut beschrieben.

Durch den Josephson-Effekt kommt es zu einer Verschmierung der ur-

sprünglichen Stufenfunktion in Abhängigkeit von der Größe $\frac{LI_C}{\phi_0} = \beta_L$. Dieser verschmierte Kurvenverlauf ist in Abbildung 3.2 zu sehen. Wird der Faktor β_L zu groß, kommt es bei veränderlichem Fluß zu einer Hysterese, dies ist energetisch begründbar, da keine negativen Steigungen möglich sind.

Hochfrequenz-SQUID

Bei einem HF-SQUID wird der SL-Ring induktiv an einen RF-Schwingkreis (Resonanzfrequenz $\sim 20\text{MHz}$) gekoppelt. Die Spannung über dem RF-Resonanzkreis wird mit einem RF-Verstärker und einem RF-Detektor gemessen.

Die Hochfrequenzabtastung

Zur einfacheren Betrachtung ersetzen wir die in Abbildung 3.1 gezeigte Kennlinie durch lineare Kennlinien für jedes Quantenlevel. Dadurch erhalten wir die in Abbildung 3.3 vereinfachte Darstellung.

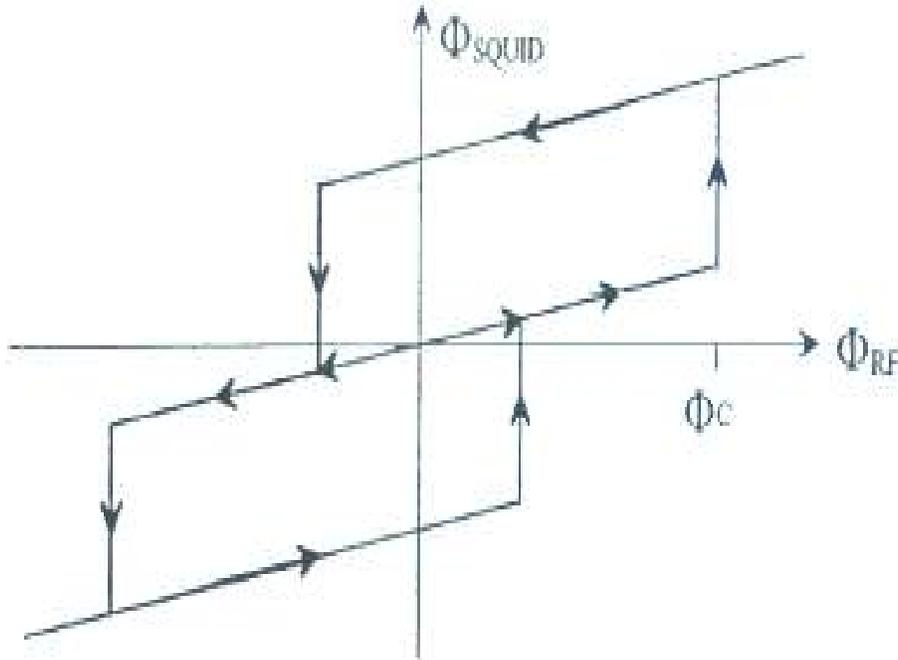


Figure 3.3: Vereinfachte Darstellung der $\phi_{ext} - \phi_i$ -Kennlinie eines RF-SQUID's.

Die Quantenlevels werden nunmehr durch einfache lineare Gleichungen beschrieben. Im nächsten Schritt wird das SQUID an einen Parallelschwingkreis gekoppelt.

Solange der Treiberstrom I_{RF} klein ist, bewegt das System sich auf einer linearen Kennlinie und dem Schwingkreis wird keine Energie entzogen. Die Ausgangsspannung V_{RF} steigt linear mit dem Strom an bis eine Amplitude des Flusses ϕ_{RF} erreicht wird, sodaß der Fluß durch das SQUID den kritischen Fluß ϕ_C übersteigt und es wird eine Hysterisis durchlaufen. Die benötigte Energie wird dem Schwingkreis entnommen. Es kommt zu einem Einbruch in der Ausgangsspannung, die sich erst nach einigen Perioden wieder erholt.

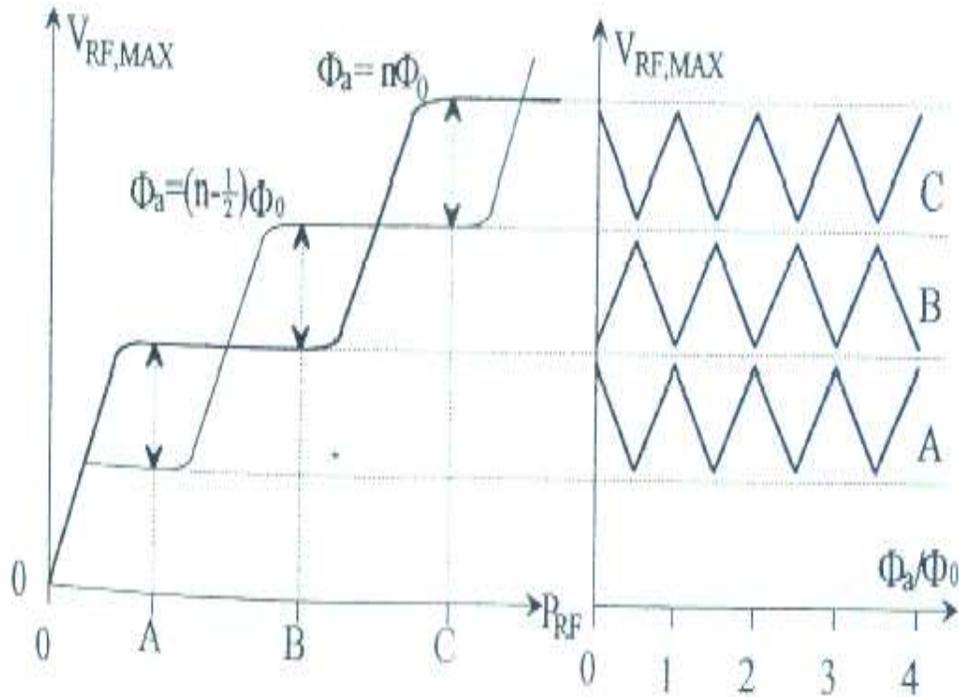


Figure 3.4: $V_{RF}(\phi_a)$ in Abhängigkeit der Generatorleistung.

Dann wird erneut der kritische Fluß erreicht und die Dissipation beginnt von neuem. Erhöht man den Treiberstrom weiter, so erholt sich die Ausgangsspannung zwar rascher, aber solange die Anstiegszeit größer ist als eine Periode des Schwingkreises, ergibt sich keine Änderung in der mittleren Ausgangsspannung. Ist dieser Punkt überschritten so kann das SQUID die zugeführte Leistung nicht mehr übernehmen und die Ausgangsspannung V_{RF} steigt wieder an. Es kommt also zu einer Stufenförmigen $I_{RF} - V_{RF}$ -Kennlinie des Schwingkreises. Die eingezeichneten Kurven unterscheiden sich lediglich in der Einstellung des Arbeitspunktes, der über ein externes Magnetfeld gewählt werden kann.

Bei soeben besprochene Kennlinie verändert sich stark, wenn zusätzlich noch ein externes Feld, d.h. ein externer Fluß ϕ_a , angelegt werden. Hält man die Leistung des RF-Generators fest, so erhält man für $V_{RF}(\phi_a)$ eine mit ϕ_0 periodische Funktion, die in Abhängigkeit von der eingestellten Leistung des Generators zwischen zwei Extremwerten variiert.

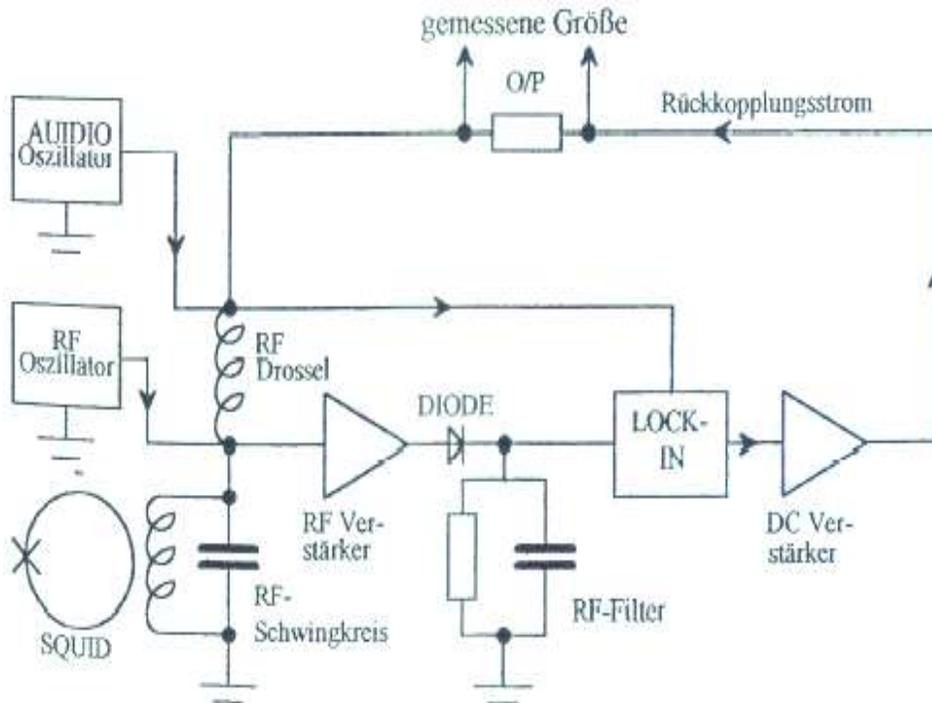


Figure 3.5: Vereinfachtes Blockschaltbild eines RF-SQUIDS im Flux-Locked-Loop.

Abbildung 3.4 stellt die Funktion $V_{RF}(\phi_a)$ in Abhängigkeit der Generatorleistung dar. Zur möglichst genauen Erfassung des Flusses, bzw. der Flußänderung, wählt man in einem ersten Schritt die Generatorleistung so, dass sich für Variationen von ϕ_a eine Maximale Änderung der Ausgangsspannung ergibt. Eine niederfrequente Modulation des externen Flusses mit überlagerter Gleichfeldkomponente ergeben dann das in Abbildung 3.4 dargestellte mit ϕ_0 periodische stehende Dreiecksmuster. Es ist auch sofort ersichtlich, dass eine Änderung von ϕ_a um genau ein Flußquant ϕ_0 eine Verschiebung des Musters um eine Periode mit sich bringt. Verschiebungen erfolgen bei jeder Änderung und durch genaues ausmessen derselben, läßt sich eine Auflösung von $10^{-3} - 10^{-4}$ Flußquanten erreichen. Die Phasenverschiebung ist also ein Maß für Änderung des Flusses, die eigentliche Meßgröße ist jedoch der Strom, der aufgebracht werden muss, um eben jene Flußänderung zu kompensieren. Abbildung 3.5 zeigt ein vereinfachtes Blockschaltbild, dass es jedoch ermöglicht den Meßvorgang nachzuvollziehen. Zur phasensensitiven Messung der Ausgangsspannung wird ein Lock-In-Verstärker verwendet.

Messung der Magnetisierung

Ein herkömmliches Pick-Up-System funktioniert nach dem Induktionsgesetz. In einem supraleitenden Pick-Up-System wird jedoch keine Spannung induziert, sondern man mißt bei der Bewegung der Probe durch das Pick-Up-System die entsprechende Flußänderung aufgrund des angeworfenen Abschirmstromes. Also erhält man nur dann ein Signal in einem Pick-Up-System, sei es ein supraleitendes oder herkömmliches, wenn das angelegte Feld zeitlich variiert wird, oder wenn die Probe räumlich bewegt wird. Das immer notwendige Kompensieren des angelegten Magnetfeldes wird am einfachsten durch zwei genau gegengleiche Pick-Up-Spulen erreicht, jedoch ist vor allem bei kleinen Magnetisierungen der Probe das resultierende Signal sehr klein und daher rauschanfällig. Daher werden in konventionelle Pick-Up-Systeme mit 500 bis 1000 Windungen je Spule gefertigt, das wiederum erschwert den Abgleich. Im verwendeten SQUID-Magnetometer wird das Problem dadurch umgangen, dass das verwendete Pick-Up-System aus supraleitenden Material gefertigt ist und aufgrund der höheren Auflösung lediglich aus 4 Windungen besteht.

Diese sind entsprechend als Gradiometerspulen zweiter Ordnung ausgeführt. Dadurch werden nur die zweiten Ableitungen des äußeren Feldes wirksam, um eine Flußänderung zu bewirken. Die Flußänderung wird dadurch bewirkt, dass die Probe entlang der Achse der Spulen bewegt wird.

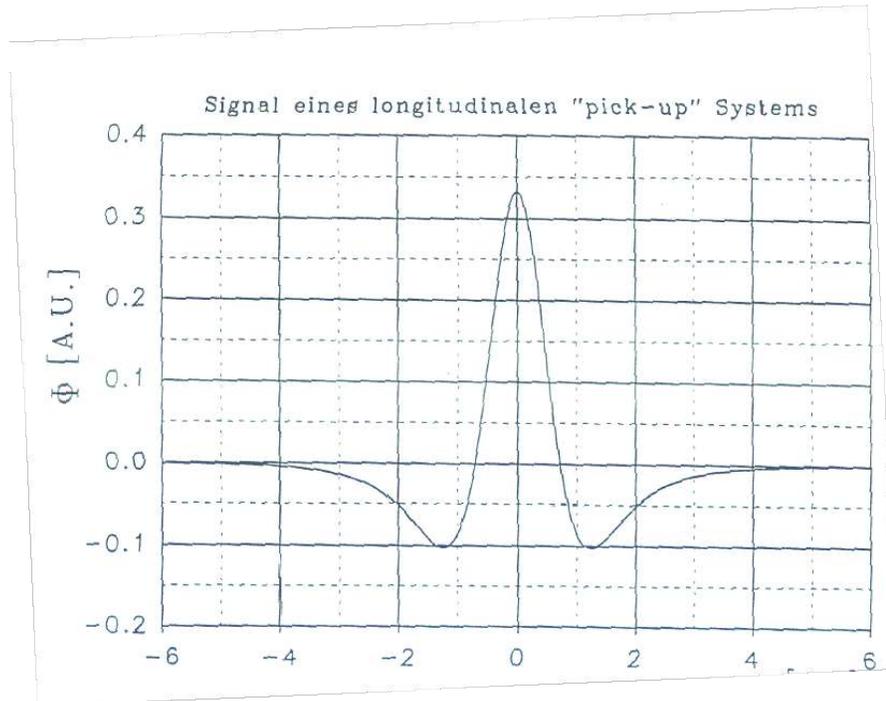


Figure 3.6: Signal eines idealen Dipols im longitudinalen Pick-Up-System.

Das entstehende Signal eines idealen Dipols ist in Abbildung 3.6 gezeigt.

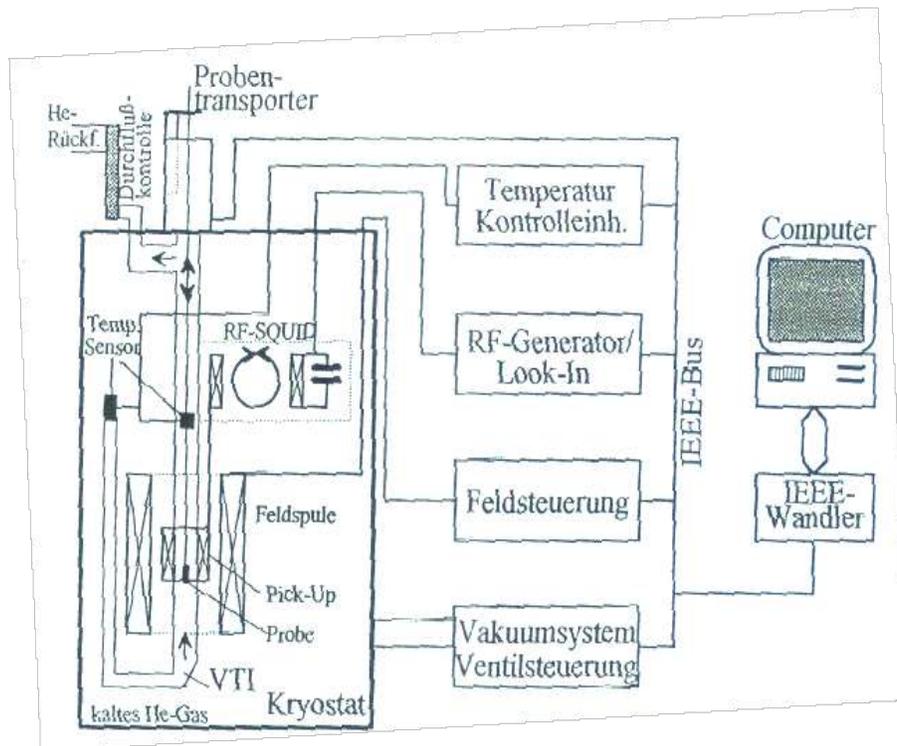


Figure 3.7: Blockschaltbild des RF-SQUID-Magnetometers.

Abbildung 3.7 stellt das Blockschaltbild des verwendeten RF-SQUID-Magnetometers dar. Es ist möglich die Magnetisierung sowohl in Abhängigkeit der Temperatur als auch des Feldes zu messen. Die Temperatur kann zwischen 2 und 300K variiert werden und das Feld zwischen 0 und 6T. Der gesamte Meßvorgang ist voll automatisiert und wird von einem Computer gesteuert. Die einzelnen Kontrolleinheiten werden von diesem Rechner aus mit einem IEEE-Bus angesprochen. Die Meßdaten werden auf der Festplatte dieses Rechners als ASCII-Dateien gespeichert. Die gewünschte Meßsequenz muss vor Beginn der Messung eingegeben werden. Die kühlung der Probe erfolgt durch einen Strom von gasförmigen kalten Helium. Aufgrund der Kleinheit der Probe wird sehr schnell das thermische Gleichgewicht erreicht und die Probe hat die Temperatur des sie umspülenden Gases. Um die Temperatur festzustellen wird sie vor und nach der Probe im Gasstrom gemessen. Die genaue Temperatur wird durch einen Heizer geregelt, der immer konstante Leistung zuführt.

Das Feld wird durch die Feldspulen erzeugt. Diese sind aus supraleitenden Material und stehen während der gesamten Messung in flüssigem

Helium. Soll ein neuer Feldwert eingestellt werden, so wird über die Stromversorgung der notwendige Strom in die Spulen eingespeist. Dazu muss der supraleitende Kurzschluß durch aufheizen kurzzeitig normalleitend gemacht werden. Hat sich der Strom in der Feldspule stabilisiert, so wird der Kurzschluß durch ausschalten des Heizers wieder supraleitend gemacht. Diese Betriebsart wird auch als "Persistant Mode" bezeichnet.

3.2 Messung der magnetischen Suszeptibilität

Für die Bestimmung der Wechselfeldsuszeptibilität steht ein Suszeptometer von Firma Lake Shore Cryogenics (Modell 7000 AC) [52] zur Verfügung. Es ist für Messungen im Temperaturbereich von 1.8 bis 300 K geeignet, die mithilfe eines stickstoffummantelten ^4He Badkryostaten erreicht werden. In dem Kryostaten befinden sich 3 Spulen, eine Primärspule und 2 gleiche gegenläufig gewickelte Sekundärspulen (Pick-up Spulen), siehe Abbildung 3.8. Die Sekundärspulen sind im Zentrum der Primärspule, untereinander liegend, angeordnet. Die gegenläufige Wicklung der Sekundärspulen verhindert ein Einkoppeln des Signals in den Messkreis.

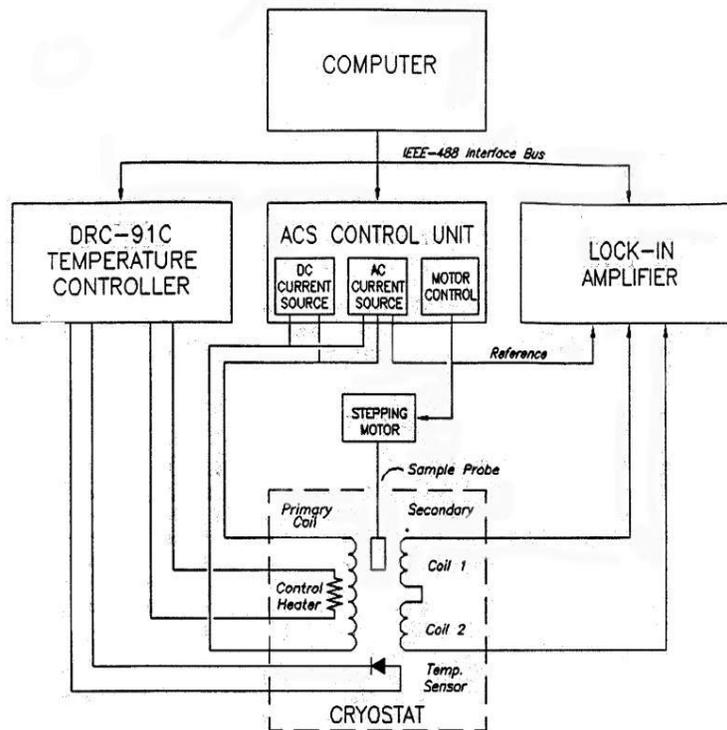


Figure 3.8: Blockdiagramm des AC Suszeptometers Modell 7000.

Die Probe befindet sich in eine Plastikkapsel am Ende des Probenstabes, und wird im Kryostaten so positioniert, dass sie sich zu Beginn der Messung in der Mitte der unteren Pick-up Spule befindet. Der Probenstab ist an einem Schrittmotor befestigt, der die Probe abwechselnd in die obere und untere Pick up Spule bewegt. Am oberen Ende des Spulensystems befindet sich die Heizeinheit. Der Proben temperatursensor befindet sich zwischen den beiden Pick-up Spulen, der Kontroll-Temperatursensor außerhalb.

Üblicherweise wird bei einer Frequenz von 80Hz und einer Feldstärke von 200A/m gemessen. Falls das zu messende Signal sehr schwach ist kann die Frequenz bis zu 1000Hz erhöht werden.

Die induzierte Spannung im Pick-up System lautet:

$$U_{ind} = -\frac{\partial}{\partial t} \phi. \quad (3.3)$$

Wir haben in unserem Fall 2 Pick-up Spulen lautet die Gleichung für die Induzierte Spannung:

$$U_{ind} = -\frac{\partial}{\partial t} \sum_i \phi_i. \quad (3.4)$$

mit $dV = dA dl$ und mit $\vec{B} = \vec{B}_1 + \vec{B}_2$ folgt:

$$U_{ind} = -\frac{N}{l} \frac{d}{dt} \int_{V_1} dV_1 \vec{B}_1 + \int_{V_2} dV_2 \vec{B}_2, \quad (3.5)$$

Mit $\vec{B}_1 = \mu_0(\vec{H}_{ext} + \vec{M})$ und $\vec{B}_2 = \mu_0(\vec{H}_{ext})$ folgt für die induzierte Spannung

$$U_{ind} = -\left(\frac{\mu_0 N}{l}\right) \int dV \frac{d\vec{M}}{dt} = -K \frac{d\vec{M}}{dt}. \quad (3.6)$$

Die differentielle Suszeptibilität ist definiert als

$$\chi = \frac{d\vec{M}}{d\vec{H}}, \quad (3.7)$$

mit dem Vorliegenden Suszeptometer mißt man stets χ_z (z -Achse $\parallel \vec{H}$) deswegen schreiben wir \vec{H} und \vec{M} als Skalare Größen. Die Feldspule des Suszeptometers erzeugt ein Wechselfeld der Frequenz ω :

$$H_{ac} = H_0 \cos(\omega t). \quad (3.8)$$

Daraus resultiert eine Magnetisierung in der Form:

$$\begin{aligned} M_{ac} &= M_0 \cos(\omega t - \phi) \\ &= M_0(\cos(\omega t) \cos(\phi) + \sin(\omega t) \sin(\phi)) \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$= \chi' H_0 \cos(\omega t) + \chi'' H_0 \sin(\omega t), \quad (3.10)$$

durch Koeffizientenvergleich von Gleichung (3.9) und (3.10) folgt für die Suszeptibilität:

$$\chi' = \frac{M_0}{H_0} \cos(\phi) \quad (3.11)$$

$$\chi'' = \frac{M_0}{H_0} \sin(\phi), \quad (3.12)$$

wobei χ' in Gleichung (3.11) den Anteil angibt in der M gleichphasig zu H und χ'' in Gleichung (3.12) den Anteil angibt in der M gegenphasig zu H ist. Wenn wir Suszeptibilität als komplexe Größe $\chi = \chi' - i\chi'' = \chi_0 e^{-i\phi}$ mit $\chi_0 = \frac{M_0}{H_0}$ schreiben, dann folgt für die induzierte Spannung

$$\begin{aligned}
U_{ind} &= -K \frac{dM}{dt} \\
&= -KM_0 \frac{d}{dt} \cos(\omega t - \phi) \\
&= KM_0 \omega \sin(\omega t - \phi) \\
&= K\chi_0 H_0 \omega \sin(\omega t - \phi) \\
&= U_0 \sin(\omega t - \phi)
\end{aligned} \tag{3.13}$$

DEMAGNETISIERUNGSFAKTOR

Das Magnetfeld im inneren der Probe ist gegeben durch das äußere Feld weniger dem Entmagnetisierungsfeld, das dem inneren Feld entgegenwirkt.

$$H_{int} = H_{ext} - NM, \tag{3.14}$$

wobei N der geometrieabhängige Entmagnetisierungsfaktor ist. Dadurch ist die interne Magnetisierung gegeben durch

$$M_{int} = \chi_{int} H_{int}, \tag{3.15}$$

und die gemessene Suszeptibilität durch

$$\chi_{gem} = \frac{M_{int}}{H_{ext}}, \tag{3.16}$$

somit folgt wir für die interne Suszeptibilität

$$\chi_{int} = \frac{\chi_{gem}}{1 - N\chi_{gem}}, \tag{3.17}$$

wodurch letztendlich für die gemessene Suszeptibilität

$$\begin{aligned}
\chi_{gem} &= \frac{\chi_{int}}{1 + N\chi_{int}} \\
&= \frac{1}{\frac{1}{\chi_{int}} + N}
\end{aligned} \tag{3.18}$$

folgt. Der Entmagnetisierungsfaktor $N = \frac{l}{d}$ (l ist die Länge und d ist die Dicke der Probe) hängt von der Form der Probe ab, für eine kugelförmige Probe ist $N = \frac{1}{3}$, für eine balkenförmige Probe, deren Längsachse parallel zum Feld liegt, ist $N \approx 0.15$ und für eine Balkenförmige Probe, deren Längsachse normal zum Feld liegt, ist $N \approx 0.85$, wenn das Verhältniss der Länge der Probe durch die Dicke der Probe 4 zu 1 ist.

3.3 Messung des elektrischen Widerstandes

Um störende Spannungsabfälle in den Messleitungen zu reduzieren, wird die sogenannte Vierpunktmethode angewandt. Gemessen wird dabei der Spannungsabfall U zwischen zwei Abgriffen im Abstand L (L ist eine charakteristische Größe der Probenhalterung), wobei der Strom I über zwei separat verdrahtete, weiter außen liegende Kontakte vorgegeben wird. Über das Ohm'sche Gesetz,

$$U = R_{Probe} I \quad , \quad (3.19)$$

lässt sich daraus der elektrische Widerstand berechnen. Gesucht ist jedoch der von den Probendimensionen unabhängige, spezifische Widerstand ρ mit der Dimension Ωcm , der sich aus der folgenden Beziehung bestimmen lässt:

$$R_{Probe} = \rho \frac{L}{A} \quad . \quad (3.20)$$

Umgeformt ergibt das für die gesuchte Größe ρ :

$$\rho = \frac{A U}{L I} \quad , \quad (3.21)$$

wobei L den Anstand der Spannungsabgriffe in cm und A die Querschnittsfläche der Probe in cm^2 bezeichnet. Der absolute Fehler des spezifischen Widerstandes wird primär durch den Fehler der Probendimension verursacht, und liegt bei maximal fünf Prozent. Dies stellt aber keine Einschränkung dar, da meistens das relative Verhalten von R bei Variation von T von Interesse ist.

Die etwa $10 \times 1 \times 1 mm^3$ großen balkenförmigen Proben werden auf eine höhenverstellbare, vergoldete Cu-Platte gelegt, und anschließend gegen 4 gefedert gelagerte, vergoldete Kontaktstifte gedrückt. Zur elektrischen Isolation wird ein Glimmplättchen zwischen Probe und Cu-Platte gelegt. Abbildung 3.9 zeigt den schematischen Aufbau sowie ein Foto der Apparatur.

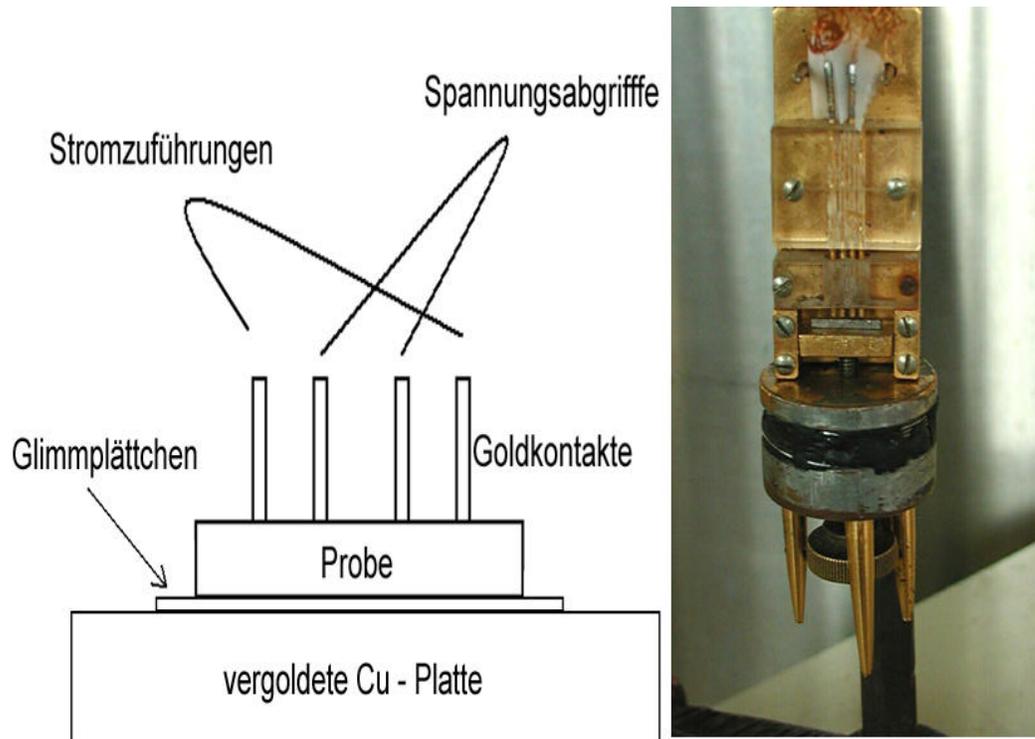


Figure 3.9: Links: Schematische Darstellung der Apparatur, Rechts: Foto vom unteren Teil des Probenstabs.

Die äußeren zwei Stifte dienen als Stromzufuhr und kontaktieren die Probe in einem Abstand von ca. 1cm , die inneren haben die Funktion von Spannungsabgriffen. Um die Querschnittsfläche A der Probe zu bestimmen, werden die dazu benötigten Dimensionen vor dem Einbau in den Kryostaten mit einer Schubleere bestimmt und dem Computerprogramm, das die Messdaten aufzeichnet, eingegeben. Am Probenstab befindet sich außerdem ein Gold-Chromel Thermoelement mit Eiswasser als Referenztemperatur. Die Messungen können in einem Temperaturbereich von 1.8K bis Raumtemperatur durchgeführt werden. Dazu steht ein ^4He Badkryostat mit Stickstoffmantel zur Verfügung. Gemessen wird sofort nach dem He Befüllen während der positiven Temperaturdrift. Um die Messung in die Nähe der Raumtemperatur zu beschleunigen, kann zusätzlich eine Heizung in Betrieb genommen werden.

3.4 Röntgendiffraktion

Für die Röntgenmessungen steht ein Pulverdiffraktometer mit Cu-Röhre vom Typ Siemens D 5000 bzw. D 500 mit Bragg-Brentano Geometrie zur Verfügung.

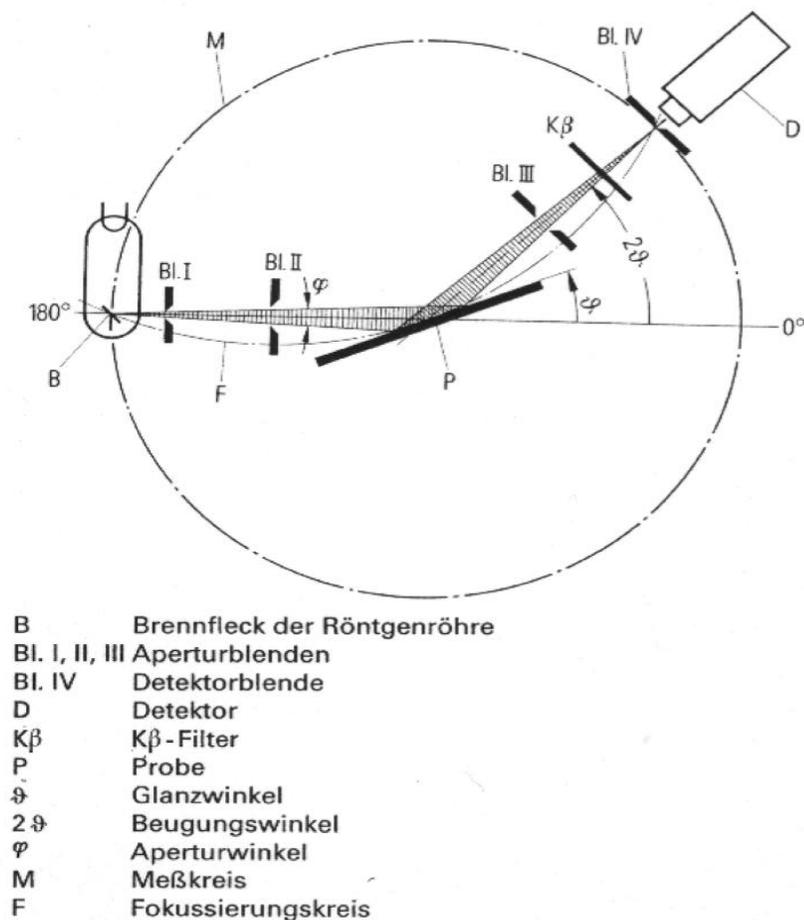


Figure 3.10: Bragg-Brentano Geometrie im Siemens D 500 [53].

Bei dem Diffraktometer sind Röntgenröhre und Detektor so angeordnet, dass sie sich entlang eines Kreises bewegen können, in dessen Mittelpunkt die Probe sitzt. Ein Getriebe koppelt die Komponenten so, dass die Reflexionsbedingung immer erfüllt ist und gleichzeitig eine Fokussierung erzielt wird: Der Röntgenstrahl trifft also im Winkel θ auf die Probe auf und wird von dort in den Detektor gestreut, der im Winkel 2θ positioniert ist. Als Strahlenquelle dient eine Co-Röhre, zur Unterdrückung der Co- K_β Strahlung kommt ein Sekundär-Monochromator zum Einsatz. Die Messungen wurden meistens in einem Winkelbereich von $2\theta = 20^\circ$ bis $2\theta = 100^\circ$ mit einer Schrittweite von 0.03° und einer Messzeit von 15s pro Winkel aufgenommen.

3.4.1 Profilanalyse mit Fullprof

Fullprof ist ein Programm für die Rietveld Analyse von Neutronen oder Röntgen Pulverdiffraktionsdaten, das am Laboratoire Leon Brillouin ausgehend von einem Programm von Wiles und Young entwickelt wurde. Das Programm kann auch zur Profilanpassung benutzt werden, ohne die Struktur zu kennen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde Fullprof verwendet um Gitterkonstanten aus Röntgen Pulverdiffraktionsdaten auszurechnen.

Input und Output von Fullprof

Fullprof benötigt mindestens zwei **Inputfiles (ASCII)**:

1. Ein Datenfile, das in verschiedenen Formaten vorliegen kann.

```
26.0  0.03  41.0
203.000000
192.000000
231.000000
188.000000
202.000000
199.000000
201.000000
.
.
.
```

Das Datenfile besteht aus einer Spalte von Intensitätswerten, die im gleichen Winkelabstand vom Anfangswinkel bis Endwinkel vorliegen. In der ersten Zeile muss der Anfangswinkel, Schrittweite und Endwinkel stehen. Dann jeweils ein Wert pro Zeile. Im obigen Beispiel

ist Anfangswinkel= 26, Schrittweite= 0.03 und Endwinkel= 41. Das Datenfile muss die Endung **.dat** haben.

2. Ein **.pcr** File in dem in einem speziellen Format alle Einstellungen für Fullprof angegeben werden. Dieses File muss entweder komplett neu geschrieben werden oder man passt ein bestehendes pcr-File seinen Bedürfnissen an.

Wenn die Brechnung erfolgreich beendet wird, werden folgende **Outputfiles** von Fullprof generiert:

1. **DATENFILE.OUT**: Das Haupt-Outputfile das alle Kontrollvariablen und Strukturparameter enthält.
2. **DATENFILE.PRF**: Gemessenes und berchnetes Profil. Diese Datei kann benutzt werden um eine graphische Darstellung zu erzeugen.
3. **DATENFILE.SUM**: Liste der Parameter nach dem letzten Rechen-durchgang, ihre Standartabweichungen und R-Werte. Außerdem enthält es eine Analyse der Qualität der Berechnung.
4. **DATENFILE.LOG**: Der Output, der von Fullprof geschrieben wird, während es rechnet. Kann zur Fehlersuche verwendet werden.

Beschreibung des PCR-Files Das folgende Listing ist ein Beispiel eines PCR-Files für das Programm Fullprof.

COMM SON 11 GdCo9Si4 300K

! Current global Chi2 (Bragg contrib.) = 11.09

! Files => DAT-file: son11_3, PCR-file: son11_3

!Job	Npr	Nph	Nba	Nex	Nsc	Nor	Dum	Iwg	Ilo	Ias	Res	Ste	Nre	Cry	Uni	Cor	Opt	Aut
0	5	1	0	0	0	1	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0

!

!Ipr	Ppl	Ioc	Mat	Pcr	LS1	LS2	LS3	NLI	Prf	Ins	Rpa	Sym	Hkl	Fou	Sho	Ana
0	0	1	0	1	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0	1

!

! lambda1	Lambda2	Ratio	Bkpos	Wdt	Cthm	muR	AsyLim	Rpolarz	->Pat
1.540560	1.544390	0.5000	85.000	7.0000	0.0000	0.0000	45.00	0.0000	

!

!NCY	Eps	R_at	R_an	R_pr	R_gl	Thmin	Step	Thmax	PSD	Sent0
50	0.30	0.85	0.85	0.35	0.85	26.0000	0.030000	41.0000	0.000	0.000

!

!

1 !Number of refined parameters

!

! Zero	Code	SyCos	Code	SySin	Code	Lambda	Code	MORE	->Patt#
0.20323	0.00	0.01102	0.00	0.00000	0.00	0.000000	0.00	0.00	1

! Background coefficients/codes for Pattern# 1

141.67	135.99	247.25	0.0000	0.0000	0.0000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

!

! Data for PHASE number: 1 ==> Current R_Bragg for Pattern# 1: 1.23

!

GdCo9Si4

!

!Nat	Dis	Ang	Pr1	Pr2	Pr3	Jbt	Irf	Isy	Str	Furth	ATZ	Nvk	Npr	More
0	0	0	0.0	1.0	0.0	2	2	0	0	0	1545.730	0	5	0

!

I 4/M C M <--Space group symbol

!-----> Profile Parameters for Pattern # 1

! Scale	Shape1	Bov	Str1	Str2	Str3	Strain-Model
1.0000	0.55228	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0
0.00000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	

!

! U	V	W	X	Y	GauSiz	LorSiz	Size-M
0.080138	-0.125054	0.050101	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	

!

! a	b	c	alpha	beta	gamma	#Cell Info
7.769961	7.769961	11.498289	90.000000	90.000000	90.000000	
11.00000	11.00000	21.00000	0.00000	0.00000	0.00000	

!	Pref1	Pref2	Asy1	Asy2	Asy3	Asy4
	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Im Prinzip besteht diese Datei aus Kommentarzeilen, die angeben, welche Parameter sich in der nächsten Zeile befinden, und die Parameterwerte stehen dann durch beliebig viele Leerzeichen getrennt in der nächsten Zeile. Kommentarzeilen werden mit einem "!" eingeleitet. Einige Parameter sind unbedingt notwendig, andere abhängig von vorhergehenden. Außerdem ist für einige Parameter ein zusätzlicher Wert vorgesehen, der bestimmt ob der Parameter angepasst werden soll, und in welcher Reihenfolge das geschieht. Diese "Codewords" sind meistens durch den Kommentar "Code" gekennzeichnet oder stehen in einer weiteren Zeile unter der Kommentar- und Parameterzeile.

In der ersten Zeile steht ein Kommentar beginnend mit "COMM".

```
COMM SON 11 GdCo9Si4 300K
```

Dieser Kommentar ist dann als Information auch in dem Plotfile.

Die nächsten Parameter sind für die Steuerung des Programs zuständig.

```
!Job Npr Nph Nba Nex Nsc Nor Dum Iwg Ilo Ias Res Ste Nre Cry Uni Cor Opt Aut
  0  5  2  0  0  0  1  1  0  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0
```

Das sind 19 natürliche Zahlen, die durch ein Leerzeichen getrennt sind. Job=0 heisst, dass das Program im Röntgenstrahlen-Modus ist. Nph=2 bedeutet, dass wir 2 Phasen zu analysieren haben.

Für die Erklärungen der anderen Parameter wird auf [13] verwiesen.

```
!Ipr Ppl Ioc Mat Pcr Ls1 Ls2 Ls3 NLI Prf Ins Rpa Sym Hkl Fou Sho Ana
  0  0  1  0  1  0  0  0  0  1  0  0  0  1  0  0  1
```

Das sind 17 natürliche Zahlen, die durch ein Leerzeichen getrennt sind. Pcr=1 bedeutet, dass das Pcr-File nach jedem Cyclus mit den aktuellen Parametern überschrieben wird. Der Wert von Prf bestimmt in welchem Format das plot-File (**CODFIL.prf**) geschrieben wird. Für Prf=1 ist **CODFIL.prf** in einem Format, das von Winplotr geplottet werden kann.

Für die Erklärungen der anderen Parameter wird auf [13] verwiesen.

```
! lambda1 Lambda2 Ratio Bkpos Wdt Cthm muR AsyLim Rpolarz ->Pat
  1.540560 1.544390 0.5000 85.000 7.0000 0.0000 0.0000 45.00 0.0000
```

Lambda1 und lambda2 sind die Wellenlängen der $K_{\alpha 1}$ - und $K_{\alpha 2}$ -Strahlung.

Für die Erklärungen der anderen Parameter wird auf [13] verwiesen.

```
!NCY Eps R_at R_an R_pr R_gl Thmin Step Thmax PSD Sent0
  50 0.30 0.85 0.85 0.35 0.85 26.0000 0.030000 41.0000 0.000 0.000
```

1. **NCY**: Anzahl der Cyclen, die das Program durchlaufen soll.
2. **Thmin**: Anfangswinkel.
3. **Step**: Schrittweite.
4. **Thmax**: Endwinkel.

Für die Erklärungen der anderen Parameter wird auf [13] verwiesen.

```
1    !Number of refined parameters
```

Anzahl Parameter die variiert werden Parameter, es werden natürlich nur die Parameter variiert, deren Code gesetzt ist.

```
!  Zero      Code   SyCos   Code   SySin   Code  Lambda      Code MORE ->Patt# 1
   0.20323   0.00   0.01102   0.00   0.00000   0.00 0.000000    0.00  0
```

Der Parameter Zero berücksichtigt einen Nullpunkts-Offset beim Goniometer. SyCos berücksichtigt z.b. die Verschiebung der Probenebene aus dem Goniometer-Mittelpunkt. Code sind jeweils die Codes für diese Parameter und geben an in welcher Reihenfolge die Parameter variiert werden sollen. Für die Erklärungen der anderen Parameter wird auf [13] verwiesen.

```
!  Background coefficients/codes for Pattern# 1
   141.67    135.99    247.25    0.0000    0.0000    0.0000
   0.000    0.000    0.000    0.000    0.000    0.000
```

Das sind die Koeffizienten, die für die Anpassung des Untergrundes variiert werden. Darunter stehen die jeweiligen Codes, die gesetzt werden müssen, wenn man sie variieren will.

```
!-----
!  Data for PHASE number:  1 ==> Current R_Bragg for Pattern#  1:    1.23
!-----
GdCo9Si4
!
!Nat Dis Ang Pr1 Pr2 Pr3 Jbt Irf Isy Str Furth      ATZ   Nvk Npr More
   0  0  0 0.0 1.0 0.0  2  2  0  0  0      1545.730  0  5  0
```

Jbt= 2 bedeutet, dass das Program im "Profile matching mode" ist. Irf bestimmt ob ein File erstellt werden soll, das die Information über die Reflexionen enthält oder nicht. Beim ersten durchlauf des Programs muß irf= 0 sein, dadurch wird ein File mit den Reflexionen erstellt. Danach kann irf= 2 sein denn dann wird dieses erstellte File verwendet.

Für die Erklärungen der anderen Parameter wird auf [13] verwiesen.

I 4/M C M <--Space group symbol

In dieser Zeile steht das Raumgruppensymbol für GdCo_9Si_4 .

!	Scale	Shape1	Bov	Str1	Str2	Str3	Strain-Model
	1.0000	0.55228	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0
	0.00000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	

Shape1 ist der Profilanpassungsparameter, darunter steht das Codeword.
Für die Erklärungen der anderen Parameter wird auf [13] verwiesen.

!	U	V	W	X	Y	GauSiz	LorSiz	Size-M
	0.080138	-0.125054	0.050101	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0
	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	

U,V und W sind die Parameter, die für die Anpassung der Halbwertsbreite, zuständig sind. Darunter stehen die jeweiligen Codewords.
Für die Erklärungen der anderen Parameter wird auf [13] verwiesen.

!	a	b	c	alpha	beta	gamma	#Cell Info
	7.769961	7.769961	11.498289	90.000000	90.000000	90.000000	
	11.00000	11.00000	21.00000	0.00000	0.00000	0.00000	

Das sind die Gitterkonstanten und die Winkel. Die Gitterkonstanten $a = b$ und c werden variiert, die Winkel nicht. Es ist günstig die Gitterkonstanten erst zum Schluß zu variieren, wenn die restlichen Parameter ungefähr passen und man sollte dann nur die Gitterkonstanten variieren während die anderen Parameter auf einen fixen Wert gehalten werden.

!	Pref1	Pref2	Asy1	Asy2	Asy3	Asy4
	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Für die Erklärungen dieser Parameter wird auf [13] verwiesen. Sind aber in unserem Fall alle Null.

Chapter 4

Intermetallische Verbindungen RCo_9Si_4

Die Verbindungen RCo_4Si_4 sind sehr interessant für die Grundlagenforschung z.B. wegen dem Auftreten von itinerantem Metamagnetismus in LaCo_4Si_4 [5], dem Auftreten von schwachem itineranten Ferromagnetismus in YCo_4Si_4 [6] oder des Ferrimagnetismus in GdCo_4Si_4 [11].

Die Struktur von RCo_9Si_4 ist eine tetragonale (Raumgruppe $I4/mcm$, [5, 54, 55]) Variante der kubischen NaZn_{13} Struktur. Bei einer tetragonalen Struktur gilt: $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

Ziel dieser Arbeit ist eine weitere Untersuchung der magnetischen Eigenschaften von GdCo_4Si_4 bzw. der Mischkristallreihe $\text{GdCo}_{13-x}\text{Si}_x$. Eine vorangehende Untersuchungen (Ref. [11]) ist an polykristallinen Proben von $\text{GdCo}_{13-x}\text{Si}_x$ ($x = 2, 2.5, 2.8, 3, 3.5, 3.6, 3.8, 4, 4.1, 4.2$ und 4.5) durchgeführt worden. Daraus geht hervor, dass die stöchiometrische Verbindung mit der Raumgruppe $I4/mcm$ nur zwischen $x = 3.8$ und $x = 4.2$ in $\text{GdCo}_{13-x}\text{Si}_x$ existiert. In dieser Arbeit wird dieser interessante Bereich näher untersucht. In der Serie $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$ wurden deswegen fünf Proben für x zwischen 0 und 0.2 hergestellt und auf ihre magnetischen Eigenschaften untersucht. Aus der Phasenanalyse in Ref. [11] geht hervor, dass in $\text{GdCo}_{13-x}\text{Si}_x$ für x zwischen 3.8 und 4.2 immer auch eine Fremdphase enthalten war und zwar $\text{Co}_{0.9}\text{Si}_{0.1}$, das durch Si verunreinigtem elementarem Co mit *hcp* (hexagonal close-packed) Struktur entspricht. Die Phase $\text{Co}_{0.9}\text{Si}_{0.1}$ ist in etwa 1 bis 2 % in den Proben in Ref. [11] enthalten und auch in den für diese Arbeit hergestellten Proben. Diese Phase ist magnetisch und erschwert somit die Analyse der magnetischen Messungen.

Wie man in der Abbildung 4.1 sieht, haben wir Ebenen, die nur aus Cobalt Atomen bestehen, zwischen solchen mit Silizium, Cobalt und Selten Erd Atomen, die diese tetragonale Struktur aufbauen. Aus C_p -Messungen

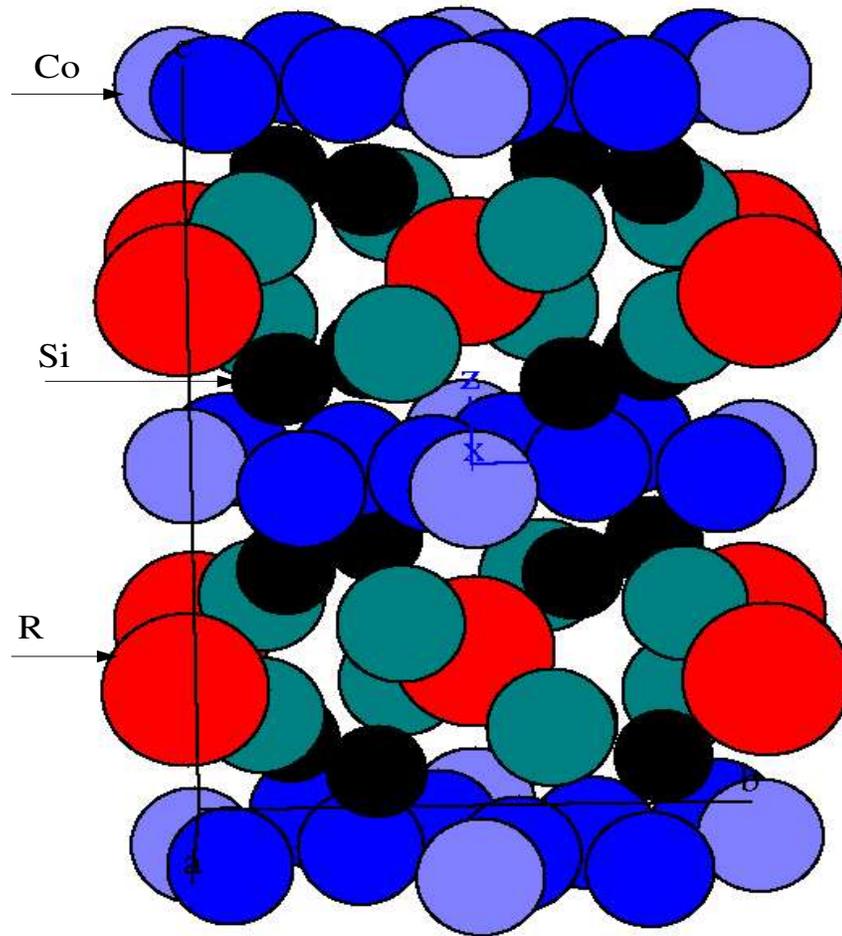


Figure 4.1: Kristallstruktur von RCO_9Si_4 ($R=La, Y, Pr, Nd, \dots$)

und Bandstrukturrechnungen können wir schließen, dass zum Magnetismus hauptsächlich die Cobalt Momente beitragen siehe in Ref. [6, 11, 56]. Die magnetischen Momente der Selten Erd Atome tragen eher passiv zum Magnetismus dieser Verbindung bei.

Chapter 5

Probenherstellung und Charakterisierung

5.1 Herstellung von $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$

Die beteiligten Elemente Gd (99.9 % "Stream chemicals"), Co (99.999 % "Unicore Lichtenstein") und Si (99.9999 % "Alfa Aesar") wurden dem stöchiometrischen Verhältnis entsprechend eingewogen. Anschließend wurden die Elemente mittels eines Hochfrequenzgenerators unter Argonatmosphäre eingeschmolzen, wobei dieser Vorgang mehrmals wiederholt wurde, um eine möglichst homogene Probe zu erreichen. Danach wurden die Proben unter Vakuum in Quarzglas eingebracht und 1 Woche bei einer Temperatur von $1050\text{ }^{\circ}\text{C}$ wärmebehandelt um ein thermodynamisches Gleichgewicht zu erreichen und Gitterfehlstellen zu heilen. Zuletzt wurden die Quarzampullen in kaltem Wasser abgecheckt. Die für die hier gezeigten Messungen ausgewählten Proben sind:

1. GdCo_9Si_4 : SON 5
2. $\text{GdCo}_{8.97}\text{Si}_{4.03}$: SON 7
3. $\text{GdCo}_{8.94}\text{Si}_{4.06}$: SON 8
4. $\text{GdCo}_{8.8}\text{Si}_{4.2}$: SON 9
5. GdCo_9Si_4 : SON 11

Die Probe SON 5 wurde mit Co von der Firma "Alfa Aesar" (99.995 % Reinheit) hergestellt, in diesem Co war vermutlich gelöster Sauerstoff. Die anderen 4 Proben SON 7 bis 9 und SON 11 wurden mit Co von der Firma "Unicore Lichtenstein" hergestellt, das für industrielle Dünnschichtanwendungen hergestellt wurde und auch bezüglich nicht metallischen Verunreinigungen z.B. Sauerstoff charakterisiert ist, d.h. 99.999 % ist im Gegensatz zum

Produkt von "Alfa Aesar" eine absolute Reinheit. Das hat sich durch eine verbesserte Phasenreinheit bemerkbar gemacht.

5.2 Meßergebnisse

5.2.1 Strukturanalyse mittels Röntgendiffraktion

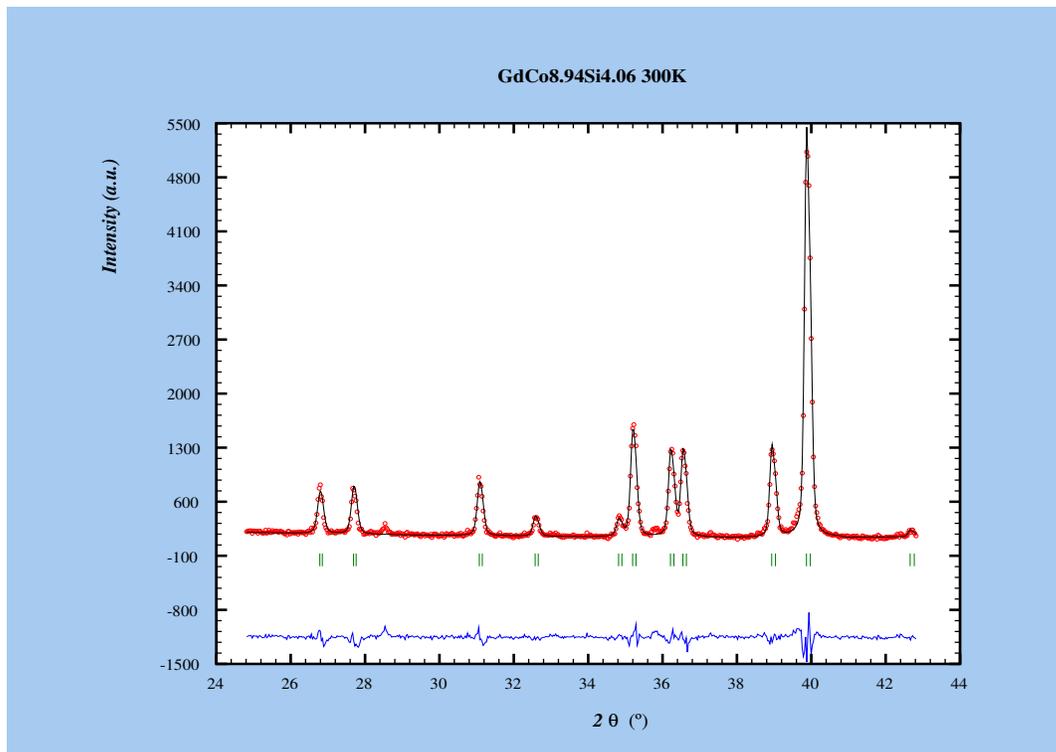


Figure 5.1: Der Fit der Röntgenmessung von $\text{GdCo}_{8.94}\text{Si}_{4.06}$, mit Fullprof. Die durchgezogene Linie ist die Rechnung und die Punkte sind die Messdaten, von D 500 mit einer Kupferröhre. Ein Fremdreﬂex ist z.B. bei $2\theta = 28.6^\circ$ zu beobachten.

Die Beugungsbilder wurden mit der im Kapitel Experimentelles beschriebenen Methode aufgenommen. Die Auswertung der Röntgendiffraktionsdaten erfolgte mit dem Programm Fullprof [13]. Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurde Fullprof verwendet um Gitterkonstanten aus Röntgen Pulverdiffraktionsdaten auszurechnen.

In Abbildung 5.1 ist der Fit der Röntgenmessung von $\text{GdCo}_{8.94}\text{Si}_{4.06}$ zu sehen, obwohl die Messung in einem größeren Bereich durchgeführt wurde ist der Fit nur in einem kleineren Bereich gemacht worden, weil Fremdphasen wie z.B. $\text{Co}_{0.9}\text{Si}_{0.1}$ stören.

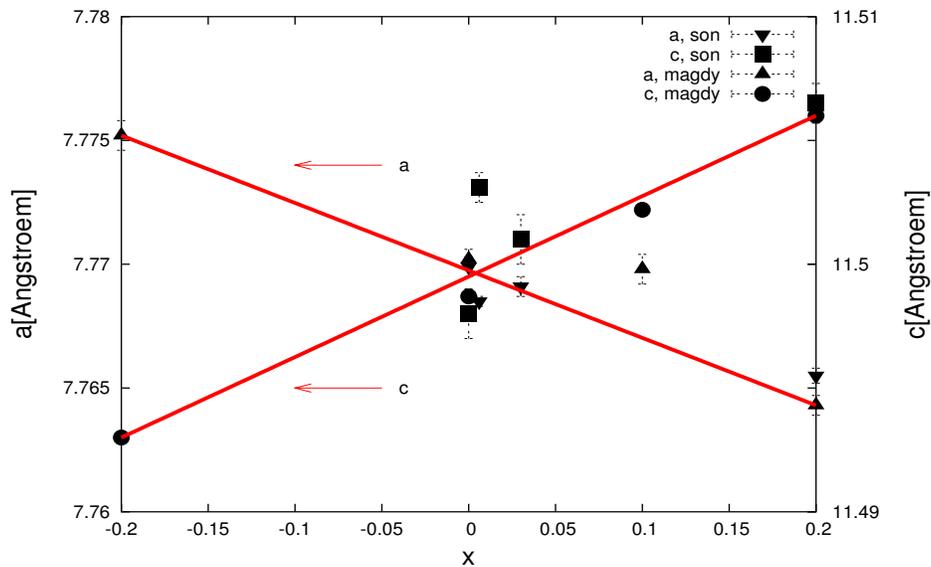


Figure 5.2: Die Variation der der Gitterkonstanten (a und c) als Funktion der Si und Co Konzentration in $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$.

Table 5.1: Gitterkonstanten der Serie $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$.

	$\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$	a [Å]	c [Å]
[11]	$\text{GdCo}_{11}\text{Si}_2$	9.751(05)	6.288(04)
[11]	$\text{GdCo}_{10.5}\text{Si}_{2.5}$	9.745(18)	6.282(13)
[11]	$\text{GdCo}_{10.2}\text{Si}_{2.8}$	9.740(23)	6.278(2)
[11]	$\text{GdCo}_{9.5}\text{Si}_{3.5}$	7.7787(08)	11.4860(51)
[11]	$\text{GdCo}_{9.4}\text{Si}_{3.6}$	7.7765(34)	11.4884(51)
[11]	$\text{GdCo}_{9.2}\text{Si}_{3.8}$	7.7752(06)	11.4930(09)
[11]	GdCo_9Si_4	7.7702(04)	11.4987(06)
SON 5	GdCo_9Si_4	7.7681(7)	11.500(1)
SON 11	GdCo_9Si_4	7.7699(4)	11.498(1)
SON 7	$\text{GdCo}_{8.97}\text{Si}_{4.03}$	7.7691(4)	11.501(1)
SON 8	$\text{GdCo}_{8.94}\text{Si}_{4.06}$	7.7685(2)	11.5031(6)
[11]	$\text{GdCo}_{8.9}\text{Si}_{4.1}$	7.7698(06)	11.5022(11)
SON 9	$\text{GdCo}_{8.8}\text{Si}_{4.2}$	7.7655(3)	11.5065(8)
[11]	$\text{GdCo}_{8.8}\text{Si}_{4.2}$	7.7643(04)	11.5060(06)
[11]	$\text{GdCo}_{8.5}\text{Si}_{4.5}$	7.7610(59)	11.5121(30)

In Tabelle 5.1 sind die auf diese Weise mit Fullprof ausgerechneten Gitterkonstanten diese stimmen gut mit den Werten aus [6] überein was auf gute Proben schliessen lässt.

5.2.2 Widerstandsmessungen der Serie $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$

In der Abbildung 5.3 sieht man die Widerstandsmessungen der Serie $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$. Man kann der Abbildung 5.3 entnehmen, dass die Kurvenverläufe oberhalb Temperatur T_C annähernd linear verlaufen und bei T_C sich der Kurvenlauf ändert. Diese Änderung des Kurvenverlaufs wird als magnetischer Phasenübergang identifiziert und kann durch Analyse der Ableitung $\frac{d\rho}{dT}$ auf ein bis zwei Kelvin genau bestimmt werden.

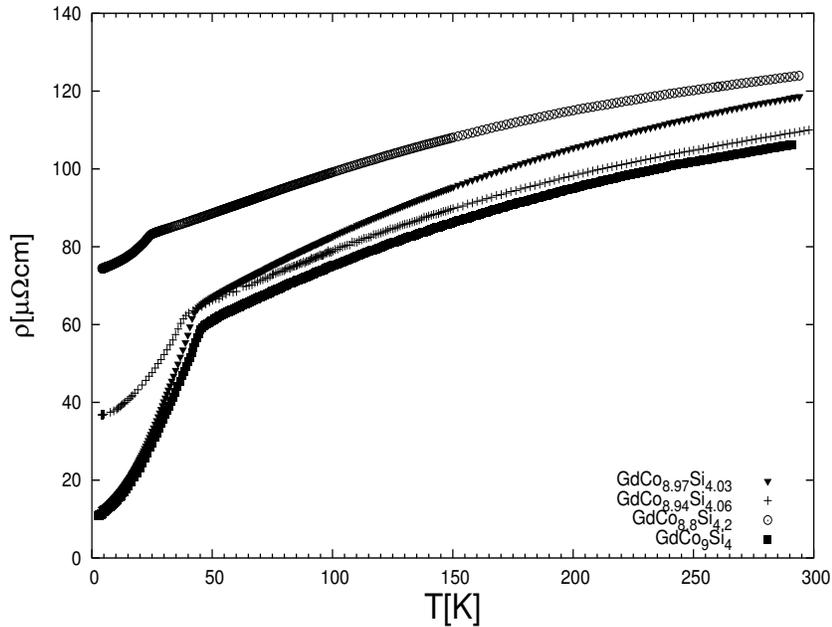


Figure 5.3: Die Widerstandsmessungen der Serie $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$

Die so bestimmten Werte für T_C sind in Tabelle 5.2 zusammengefaßt. Im magnetischen Zustand ($T < T_C$) kann der temperaturabhängige elektrische Widerstand $\rho(T)$ mit einem Potenzgesetz $\rho(T) = \rho_0 + AT^\alpha$ beschrieben werden. Dabei ist ρ_0 der sogenannte Restwiderstand mit der Dimension $\mu\Omega\text{cm}$ und A hat die Dimension $\mu\Omega\text{cmK}^{-\alpha}$. In der Abbildung 5.4 sieht man die Fits der Widerstandsmessungen für $T < 20\text{K}$, die zugehörigen Koeffizienten, die durch diese Anpassung bestimmt wurden sind in Tabelle 5.2 zusammengestellt.

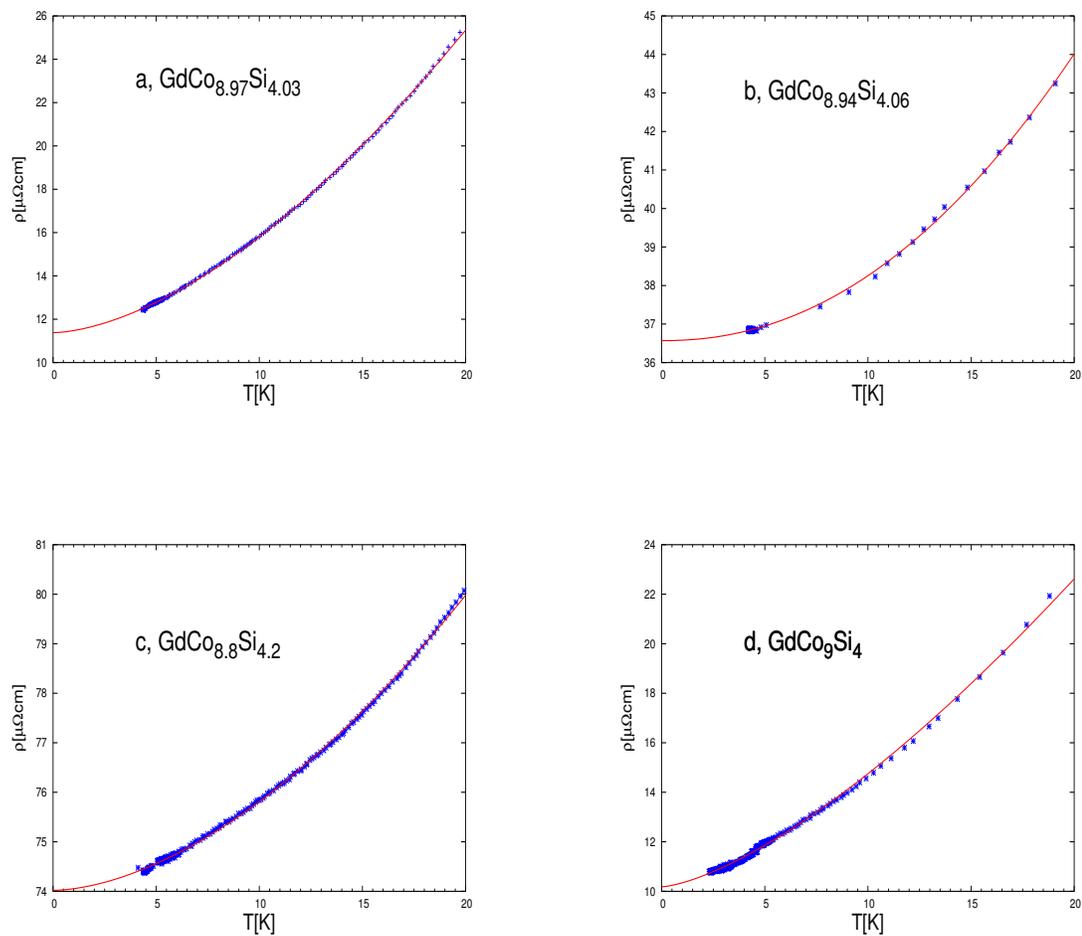


Figure 5.4: Fits von den Widerstandsmessungen der $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$ für $T < 20\text{K}$, was ungefähr $\frac{T_C}{2}$ ist; Unregelmäßigkeiten der Meßdaten bei $4\text{-}5\text{K}$ sind Artefakte.

Table 5.2: Die Koeffizienten der Fits für $\rho(T) = \rho_0 + AT^\alpha$ und die Übergangstemperaturen der Serie $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$.

	$\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$	T_C [K]	ρ_0 [$\mu\Omega\text{cm}$]	A [$\frac{\mu\Omega\text{cm}}{\text{K}^\alpha}$]	α
SON 11	GdCo_9Si_4	44	10.2(1)	0.16382	1.4
SON 7	$\text{GdCo}_{8.97}\text{Si}_{4.03}$	40	11.4(1)	0.0977	1.7
SON 8	$\text{GdCo}_{8.94}\text{Si}_{4.06}$	37	36.6(1)	0.0121	2.1
SON 9	$\text{GdCo}_{8.8}\text{Si}_{4.2}$	22	74.1(1)	0.0332	1.7

Den Ergebnissen dieser Anpassung in Tabelle 5.2 kann man entnehmen, dass die stochiometrische GdCo_9Si_4 Probe mit $10.2(1)\mu\Omega\text{cm}$ den geringsten Restwiderstand ρ_0 hat. Den höchsten Restwiderstand ρ_0 hat $\text{GdCo}_{8.8}\text{Si}_{4.2}$ mit $74.1(1)\mu\Omega\text{cm}$, daraus kann man folgern, dass der erhöhte Siliziumgehalt in $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$ den Restwiderstand erhöht. Auffällig ist auch, dass bei maximaler "off-Stoichiometrie" $\text{GdCo}_{8.8}\text{Si}_{4.2}$ den höchsten Restwiderstand und das niedrigste T_C mit 22K hat.

5.2.3 Messungen der magnetischen Suszeptibilität

Die Wechselfeldsuszeptibilität bietet eine schnelle und einfache Möglichkeit, die Übergangstemperatur T_C sowie die Übergangsbreite in den magnetisch geordneten Zustand, die ein ungefähres Maß für die Probenqualität darstellt zu bestimmen. Bei der Auswertung der Daten wurde T_C dem Maximum im Imaginärteil χ' gleichgesetzt.

Die temperaturabhängige Wechselfeldsuszeptibilität $\chi(T)$ für die Serie $\text{GdCo}_{13-x}\text{Si}_x$ ist in Abbildung 5.5a und 5.5b zu sehen. Die Legierung mit $x = 2.5$, siehe Abbildung 5.5a, weist eine magnetische Phase mit einer Übergangstemperatur T_C über Raumtemperatur auf, welches offensichtlich zur GdCo_9Si_2 Phase gehört, weil Suszeptibilitätsanomalie bei $T = 260\text{K}$ übereinstimmt mit dem Übergang der Spin Reorientierung in Ref. [57] für GdCo_9Si_2 . Wobei GdCo_9Si_2 als ferrimagnetisch mit einer Übergangstemperatur von $T_C = 483\text{K}$ charakterisiert wurde. Das Auftauchen dieser Anomalie bei $T = 260\text{K}$ im Konzentrationsbereich zwischen $2.5 \leq x \leq 3.6$ in $\text{GdCo}_{13-x}\text{Si}_x$ ist ein klares Indiz für das Auftreten der Phase von GdCo_9Si_2 . Bei Erhöhung der Si Konzentration in $\text{GdCo}_{13-x}\text{Si}_x$ bis zu $x = 3.8$ verschwindet der Spin Reorientierungsübergang und die magnetischen Anomalien, die bei oder unter $T = 60\text{K}$ auftreten werden der Phase $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$ für $-0.2 \leq x \leq 0.2$ zugeordnet. Innerhalb dieser Phasen kann man eine monotone Abnahme der Übergangstemperatur T_C von $T_C \approx 60\text{K}$ (abgeschätzt vom starken Anstieg der Wechselfeldsuszeptibilität in Abbildung 5.5a) für $x = -0.2$ bis $T_C \approx 28\text{K}$ für $x = 0.2$ beobachten.

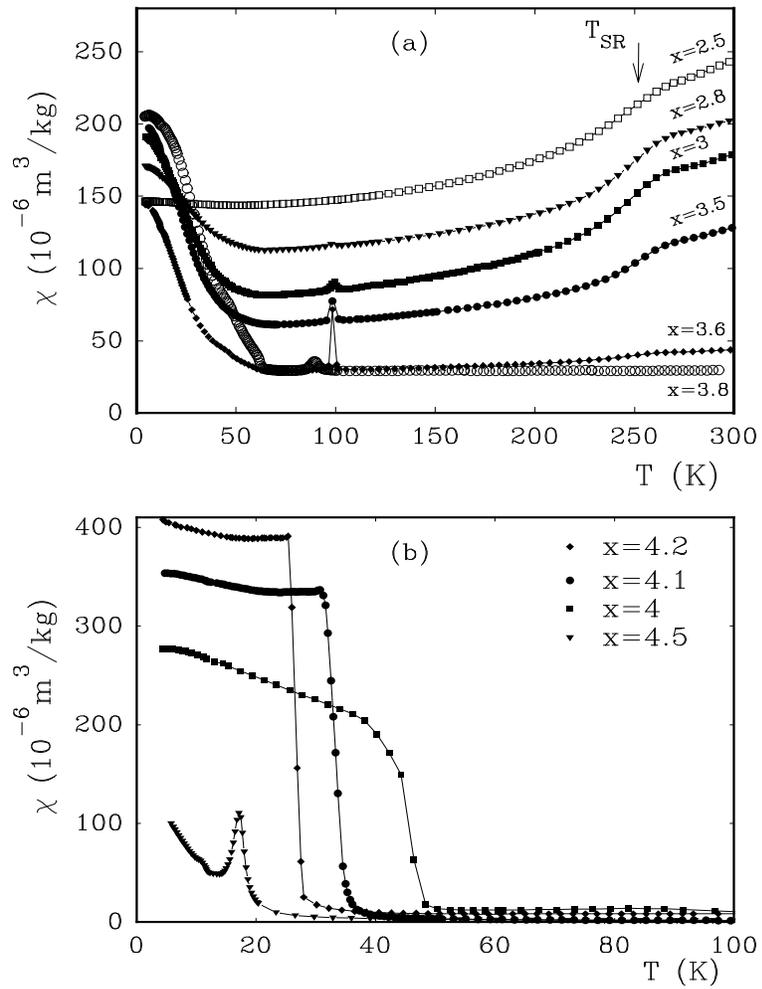


Figure 5.5: Die temperaturabhängige Wechselfeldsuszeptibilität $\chi(T)$ für die Serie $\text{GdCo}_{13-x}\text{Si}_x$ mit $2.5 \leq x \leq 3.6$.

5.2.4 Magnetisierungsmessungen

Es wurden verschiedene Magnetisierungsmessungen in Abhängigkeit der Temperatur und in Abhängigkeit des Feldes durchgeführt. Bei den temperaturabhängigen Magnetisierungsmessungen wurde bei allen Proben unterhalb einer bestimmten Temperatur ein Anstieg der Magnetisierung beobachtet, diese kritische Temperatur wird als Übergangstemperatur zum magnetisch geordneten Bereich identifiziert.

In der Abbildung 5.6 ist die temperaturabhängige Magnetisierung (oberes Bild) und die inverse temperaturabhängige Suszeptibilität (unteres Bild) zu sehen. Im Graphen der Magnetisierung über der Temperatur sieht man, dass $\text{GdCo}_{8,8}\text{Si}_{4,2}$ die niedrigste Übergangstemperatur mit $T_C \approx 25$ K hat. GdCo_9Si_4 hat mit $T_C \approx 47$ K die höchste Übergangstemperatur, was auch gut mit Ref. [11] übereinstimmt. Die Proben $\text{GdCo}_{8,97}\text{Si}_{4,03}$ und $\text{GdCo}_{8,94}\text{Si}_{4,06}$ haben fast die gleiche Übergangstemperatur wie GdCo_9Si_4 .

Die in Abbildung 5.6 (unteres Bild) ersichtlichen Differenzen der inversen Suszeptibilität im paramagnetischen Bereich zwischen $\text{GdCo}_{8,97}\text{Si}_{4,03}$ und GdCo_9Si_4 , $\text{GdCo}_{8,94}\text{Si}_{4,06}$ und $\text{GdCo}_{8,8}\text{Si}_{4,2}$ lassen auf magnetische Verunreinigungen schließen. Entsprechend der Phasenanalyse mittels Röntgendiffraktion ist es die weiter oben besprochene Fremdphase $\text{Co}_{0,9}\text{Si}_{0,1}$, welche durch den hohen Co gehalt magnetisch ist. Magnetische Verunreinigungen verfälschen natürlich die Messergebnisse, was besonders bei der zum Vergleich gezeigten Probe GdCo_9Si_4 (SON 5) sichtbar wird. Die starke Abnahme in der inversen Suszeptibilität in Abbildung 5.6 (unteres Bild) ist durch die ferromagnetische Komponente bedingt, die $\text{Co}_{0,9}\text{Si}_{0,1}$ mit $T_C \sim 1000$ K als annähernd temperaturunabhängigen Beitrag (zumindest für $T < 300$ K) verursacht. Da der Beitrag in $M(H)$ von $\text{Co}_{0,9}\text{Si}_{0,1}$ relativ schnell sättigt, skalieren die Messungen der inversen Suszeptibilität in $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$ umso schlechter je größer der $\text{Co}_{0,9}\text{Si}_{0,1}$ Fremdphase-Anteil ist. Das ist sehr gut in Abbildung 5.7 zu sehen, wo die inverse Suszeptibilität von GdCo_9Si_4 (SON 5) für verschiedene Felder aufgetragen ist und eine hohe Feldabhängigkeit zeigt. Im Gegensatz zu den $\text{GdCo}_{8,97}\text{Si}_{4,03}$, $\text{GdCo}_{8,94}\text{Si}_{4,06}$, $\text{GdCo}_{8,8}\text{Si}_{4,2}$ und GdCo_9Si_4 , dessen Messungen im Anhang angegeben sind und deren Suszeptibilitäten für verschiedene Felder skalieren.

Die $\text{GdCo}_{8,8}\text{Si}_{4,2}$ hat mit $40[\frac{emu}{g}]$ ($\sim 5.7\mu_B/\text{f.u.}$) die größte Sättigungsmagnetisierung bei 3 K wie man in Abbildung 5.8 sieht, die Sättigungsmagnetisierung von der GdCo_9Si_4 ist mit $35[\frac{emu}{g}]$ ($\sim 5\mu_B/\text{f.u.}$) deutlich darunter, das liegt wie unten gezeigt wird an der höheren Konzentration von Co.

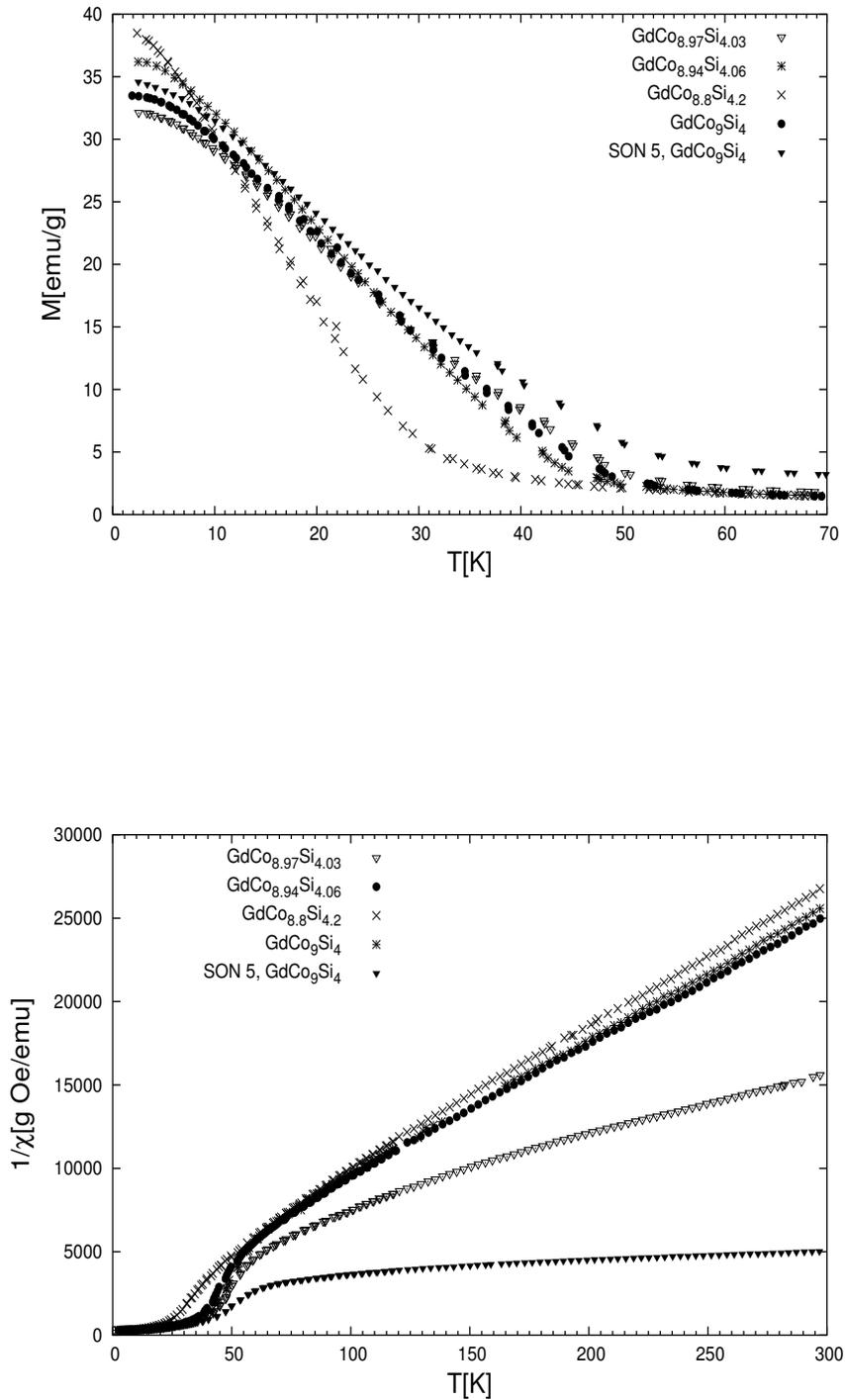


Figure 5.6: Die Magnetisierung bei 1 T in Abhängigkeit der Temperatur (oberes Bild) und die inverse Suszeptibilität bei 1 T in Abhängigkeit der Temperatur (unteres Bild) von den Proben GdCo_9Si_4 , $\text{GdCo}_{8.97}\text{Si}_{4.03}$, $\text{GdCo}_{8.94}\text{Si}_{4.06}$ und $\text{GdCo}_{8.8}\text{Si}_{4.2}$.

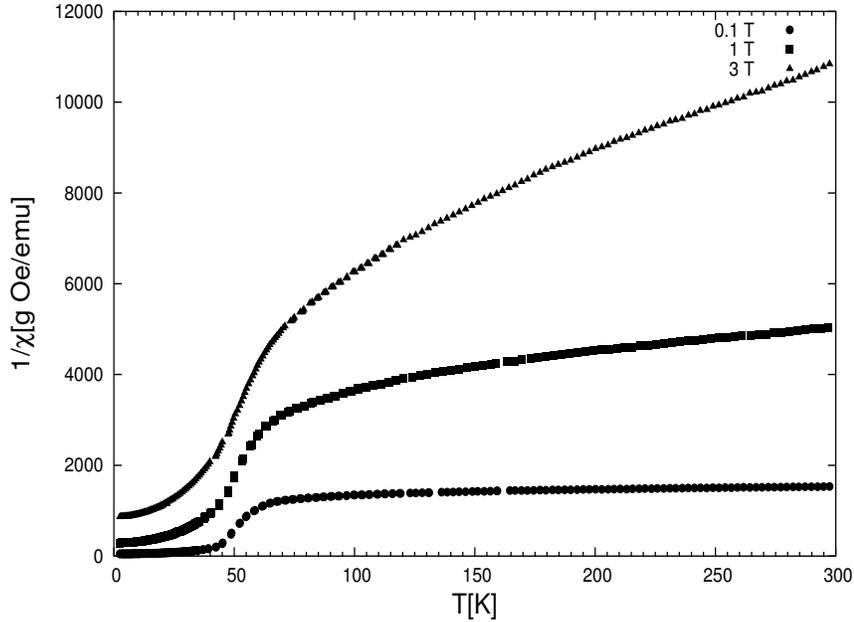


Figure 5.7: Die inverse Suszeptibilität bei in Abhängigkeit der Temperatur der Probe GdCo_9Si_4 (SON 5).

Die Magnetisierung von $35[\frac{\text{emu}}{\text{g}}]$ ($\sim 5\mu_B/\text{f.u.}$) von GdCo_9Si_4 und auch die der anderen Proben $\text{GdCo}_{8.97}\text{Si}_{4.03}$ mit $34[\frac{\text{emu}}{\text{g}}]$ ($\sim 4.86\mu_B/\text{f.u.}$), $\text{GdCo}_{8.94}\text{Si}_{4.06}$ mit einem Wert von $37[\frac{\text{emu}}{\text{g}}]$ ($\sim 5.3\mu_B/\text{f.u.}$) und $\text{GdCo}_{8.8}\text{Si}_{4.2}$ mit dem Wert $40[\frac{\text{emu}}{\text{g}}]$ ($\sim 5.7\mu_B/\text{f.u.}$) liegen alle weit unter dem Wert von $50[\frac{\text{emu}}{\text{g}}]$ ($\sim 7.2 - 7.5\mu_B/\text{f.u.}$, siehe Ref. [58]) für ein komplett polarisiertes Gd Untergitter.

Ein Vergleich der Magnetisierung von GdCo_9Si_4 bei 3 K mit der Magnetisierung von dem schwach itinerantem ferromagnetischen YCo_9Si_4 bei 2 K mit einer Sättigungsmagnetisierung von $M_{\text{sat}} \sim 15[\frac{\text{emu}}{\text{g}}]$ (die Daten von YCo_9Si_4 sind aus Ref. [6]) läßt auf eine ferrimagnetische Kopplung zwischen dem Gd- und Co-Untergitter schließen. Das macht die sukzessive Zunahme der Sättigungsmagnetisierung der Proben mit abnehmenden Co Gehalt plausibel. Es sei hier noch erwähnt, dass die Sättigungsmagnetisierung von GdCo_9Si_4 bei 3K mit der in Ref. [9] angegebenen Sättigungsmagnetisierung gut übereinstimmt.

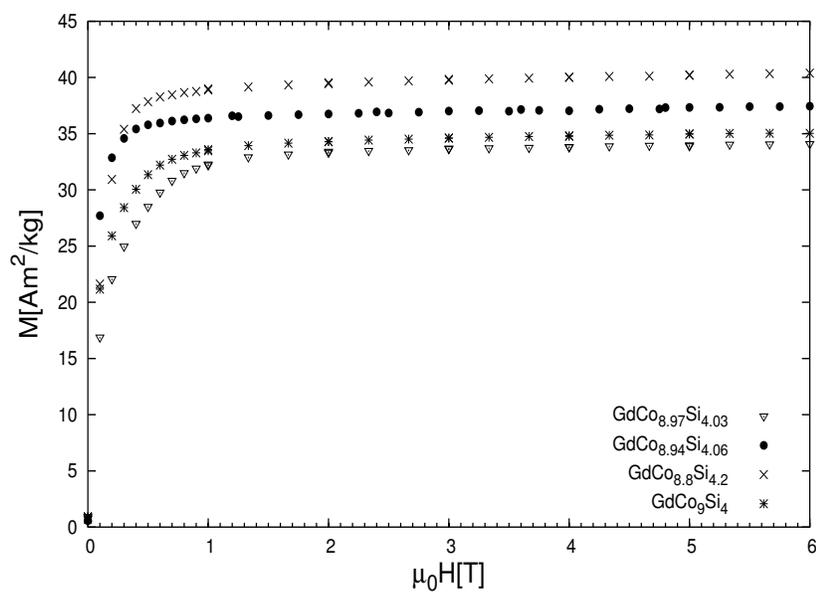


Figure 5.8: Die Magnetisierung bei 3K in Abhängigkeit des Feldes von den Proben GdCo_9Si_4 , $\text{GdCo}_{8.97}\text{Si}_{4.03}$, $\text{GdCo}_{8.94}\text{Si}_{4.06}$ und $\text{GdCo}_{8.8}\text{Si}_{4.2}$ (unteres Bild).

Chapter 6

Anwendung der Néeltheorie

Aus den auf Seite 58 diskutierten Messungen geht hervor, dass die Gd-Momente mit den itineranten $3d$ -Momenten vom Co-Untergitter antiparallele koppeln. Es ist daher naheliegend, die magnetischen Eigenschaften, nach der Néel'schen Molekularfeldtheorie durch eine antiparallele Kopplung von 2 magnetischen Untergittern zu beschreiben, wobei ein Untergitter von Gd-Atomen, das andere von Co- $3d$ -Atomen besetzt wird. Dabei geht man von einer lokalisierten Betrachtungsweise der magnetischen Momente aus. Diese Annahme ist für die, mit den Gd-Atomen verbundenen magnetischen $4f$ -Momente zulässig (siehe Seite 5), wird aber für die magnetischen Momente der Co- $3d$ problematisch. Hier wird auf die Frage, in welchem Ausmaß das magnetische Moment von Co als lokalisiert betrachtet werden kann, nicht näher eingegangen, sondern Brillouinfunktion herangezogen, um die Änderung der Magnetisierung und somit auch die Änderung der magnetischen Suszeptibilität mit der Temperatur für beide Untergitter zu beschreiben.

Es wird angenommen, dass sich die Suszeptibilität aus einem temperaturunabhängigen Teil χ_0 und aus dem Néel Modell für Ferrimagnetismus zusammensetzt.

$$\chi(T) = \chi_0 + \chi_N(T), \quad (6.1)$$

Dabei soll χ_0 als "Stonersuszeptibilität" den itineranten Charakter des Co Untergitters in erster Näherung beschreiben. Somit lautet die inverse Suszeptibilität:

$$\frac{1}{\chi}(T) = \frac{1}{\chi_0 + \chi_N(T)}, \quad (6.2)$$

mit

$$\chi_N(T) = \left(\frac{T - \theta}{C_{ges}} - \frac{\eta}{T - \theta'} \right)^{-1}. \quad (6.3)$$

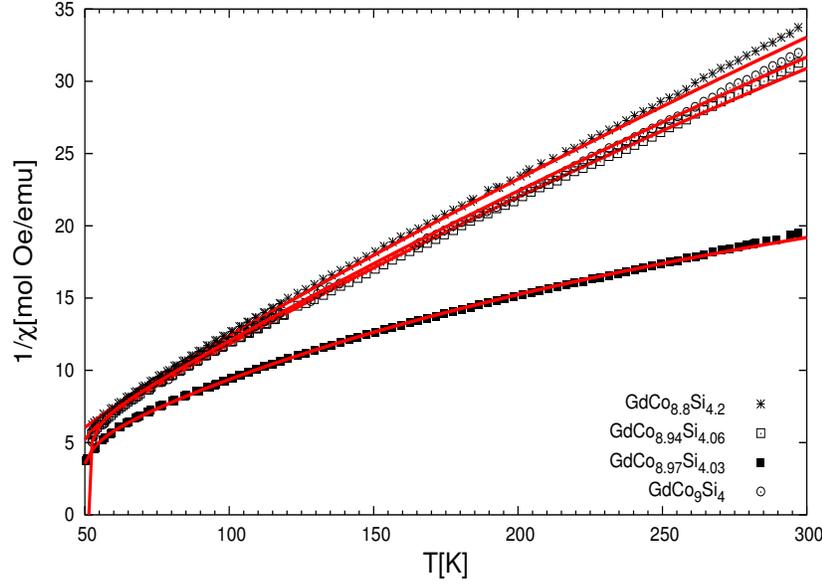


Figure 6.1: Die Néel-Fits der inversen Suszeptibilitäten der Proben GdCo_9Si_4 , $\text{GdCo}_{8.97}\text{Si}_{4.03}$, $\text{GdCo}_{8.94}\text{Si}_{4.06}$ und $\text{GdCo}_{8.8}\text{Si}_{4.2}$. Diese Messungen sind bei $1T$ durchgeführt worden.

Die Funktion 6.2 wird für ein vorgegebenes χ_0 gefittet siehe Abbildung 6.1, wobei χ_0 aus den Messdaten mit einem einfachen Curie-Weiss-Fit bestimmt wird. Der Néel-Fit wird mit Hilfe eines "Least square" Verfahrens (siehe Programmbeschreibung) durchgeführt und damit werden die Parameter der Néelhyperbel (C , θ , θ' und η) nach Gleichung (6.2) bestimmt.

Mit diesen Parametern können die Molekularfeldkoeffizienten γ_{ij} nach den Gleichungen (2.54) bis (2.56) berechnet werden.

Die gesamte Sättigungsmagnetisierung ist aus den Messungen (M_{ges} bei $T = 3$ K) bekannt. Der relative Beitrag der beiden Untergitter zu dieser Sättigungsmagnetisierung ergibt sich aus dem Kenntnis des Gd-Moments ($M_{Gd} = 7\mu_B$ oder $M_{Gd} = 50[\frac{emu}{g}]$) bei $T = 3$ K). Daraus wurde dann der Beitrag des Co-Untergitters zu der Gesamtsättigungsmagnetisierung mit der Beziehung

Table 6.1: Die Koeffizienten der Néelhyperbel der Serie $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$.

$\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$	$\chi_0[\frac{\text{emu}}{\text{mol}}]$	$C[\frac{\text{emu K mol}}{\text{Oe}}]$	$\theta[\text{K}]$	$\theta'[\text{K}]$	$\eta[\frac{\text{Oe K}}{\text{emu mol}}]$
$\text{GdCo}_{8.8}\text{Si}_{4.2}$	0.004	8.056	-7.5	23.86	24.98
$\text{GdCo}_{8.94}\text{Si}_{4.06}$	0.0058	8.05	-3.43	43.2	8.61
$\text{GdCo}_{8.97}\text{Si}_{4.03}$	0.0251	8.12	-1.01	45.59	10.61
GdCo_9Si_4	0.0049	8.12	-4.67	49.57	5.53

$$M_{\text{Co}}(3\text{K}) = M_{\text{ges}}(3\text{K}) - M_{\text{Gd}}(3\text{K}), \quad (6.4)$$

ausgerechnet. Ebenso wurde bei der Bestimmung der Untergittercuriekonstanten vorgegangen, die Curiekonstante von Gd ist bekannt ($C_{\text{Gd}} = 7.88[\frac{\text{emu K mol}}{\text{Oe}}]$) ebenso ist die Gesamtcuriekonstante ist aus den Messdaten bekannt; damit ergibt sich C_{Co} :

$$C_{\text{Co}}(3\text{K}) = C_{\text{ges}}(3\text{K}) - C_{\text{Gd}}(3\text{K}). \quad (6.5)$$

Der Spin von Gd $S_{\text{Gd}} = \frac{7}{2}$ ist mit dem Landefaktor $g_{\text{Gd}} = 2$ auch bekannt für den Spin vom Co-Untergitter wurde $S_{\text{Co}} = \frac{1}{2}$ angenommen und dann aus

$$n \frac{1}{2} g_{\text{Co}} = M_{\text{Co}}(3\text{K}) \quad (6.6)$$

woraus für g_{Co}

$$g_{\text{Co}} = 2 \frac{M_{\text{Co}}(3\text{K})}{n} \quad (6.7)$$

folgt, mit n der Anzahl der Co-Atome.

Für GdCo_9Si_4 ergibt sich damit ein fiktiver g -Faktor von 0.4. Die anderen g -Faktoren sind in Tabelle 6.3 aufgelistet. Nachdem nun γ_{ij} bzw. S_i gefunden wurden, wird M_{Gd} nach Gleichung (2.26), M_{Co} nach Gleichung (2.27) und M_{ges} nach Gleichung (2.57) in Abhängigkeit der Temperatur über ein rekursives Verfahren (siehe Programmbeschreibung) zurückgerechnet und mit den Meßdaten verglichen. Wie aus den Abbildungen 6.2 und 6.3 ersichtlich ist, kann unter Zugrundelegung des genannten einfachen Modells eine weitgehende Beschreibung des magnetisch geordneten Zustandes der Verbindungen $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$ erzielt werden.

Die in Tabelle 6.2 angegebenen Molekularfeldkoeffizienten γ_{ij} zeigen, dass die $3d$ - $3d$ -Wechselwirkung beschreibende Molekularfeldkonstante γ_{bb} dominiert und den 100 bis rund 200-fachen Wert der schwächsten Wechselwirkung, nämlich der $4f$ - $4f$ -Wechselwirkung (γ_{aa}), aufweist. Die Molekularfeldkonstante γ_{bb} hat auch den 50 bis rund 100-fachen Wert der $3d$ - $4f$ -Wechselwirkung (γ_{ab}). Die Gesamtmagnetisierung hängt fast nicht von

Table 6.2: Die Molekularfeldkoeffizienten γ_{ij} der Serie $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$.

$\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$	$\gamma_{ab}[\frac{\text{Oe mol}}{\text{emu}}]$	$\gamma_{aa}[\frac{\text{Oe mol}}{\text{emu}}]$	$\gamma_{bb}[\frac{\text{Oe mol}}{\text{emu}}]$	$T_C^{\text{mess}}[K]$
$\text{GdCo}_{8.8}\text{Si}_{4.2}$	15.43	0.34	108	22
$\text{GdCo}_{8.94}\text{Si}_{4.06}$	12.59	0.000748	228	39
$\text{GdCo}_{8.97}\text{Si}_{4.03}$	12.082	0.45	170	41
GdCo_9Si_4	11.25	0.01	190	46

der $4f$ - $4f$ -Wechselwirkung (γ_{aa}) ab sondern hauptsächlich von der $3d$ - $3d$ -Wechselwirkung (γ_{bb}).

In der Abbildung 6.2 ist der Vergleich Messung und Rechnung für die Proben $\text{GdCo}_{8.97}\text{Si}_{4.03}$ (oberes Bild) und $\text{GdCo}_{8.94}\text{Si}_{4.06}$ (unteres Bild) dargestellt. Es sind jeweils die gerechneten Untergittermagnetisierungen von den 2 Untergittern und die gerechnete Gesamtmagnetisierung mit der Messung der Magnetisierung bei $1T$ gezeichnet. Man sieht, dass die Gesamtmagnetisierung für die $\text{GdCo}_{8.97}\text{Si}_{4.03}$ nicht so gut wie die $\text{GdCo}_{8.94}\text{Si}_{4.06}$ mit der Messung übereinstimmt. Dies ist damit zu erklären, dass $\text{GdCo}_{8.97}\text{Si}_{4.03}$ eine stärkere Feldabhängigkeit der Suszeptibilität aufweist, die durch ein relativ großes χ_0 doch noch gut beschrieben wird. Man sieht in der Abbildung 6.2 auch, dass die Übergangstemperaturen sehr gut mit der Messung zusammen passen. Die Rechnungen für verschiedene Felder sind dem Anhang zu entnehmen.

Die gerechneten Übergangstemperaturen kann man der Tabelle 6.3 entnehmen. Diese Übergangstemperaturen wurden mit der folgenden Gleichung ausgerechnet:

$$T_C = \frac{1}{2}C_{ges} \left[\lambda\gamma_{aa} + \mu\gamma_{bb} + \gamma_{ab} \sqrt{\left(\lambda \frac{\gamma_{aa}}{\gamma_{ab}} - \mu \frac{\gamma_{bb}}{\gamma_{ab}} \right)^2 + 4\mu \frac{\gamma_{aa}}{\gamma_{ab}}} \right], \quad (6.8)$$

mit

$$\lambda = \frac{C_{ges}}{C_{Gd}} \quad \mu = \frac{C_{ges}}{C_{Co}}. \quad (6.9)$$

In der Abbildung 6.3 sieht man den Vergleich Messung und Rechnung für die Proben $\text{GdCo}_{8.8}\text{Si}_{4.2}$ (oberes Bild) und GdCo_9Si_4 (unteres Bild). Es sind jeweils die gerechneten Untergittermagnetisierungen von den 2 Untergittern und die gerechnete Gesamtmagnetisierung mit der Messung der Magnetisierung bei $1T$ gezeichnet. Man sieht, dass die Gesamtmagnetisierung sowohl für $\text{GdCo}_{8.97}\text{Si}_{4.03}$ als auch für GdCo_9Si_4 mit der Messung gut übereinstimmt. Man sieht in der Abbildung 6.3 auch, dass die Übergangstemperaturen sehr

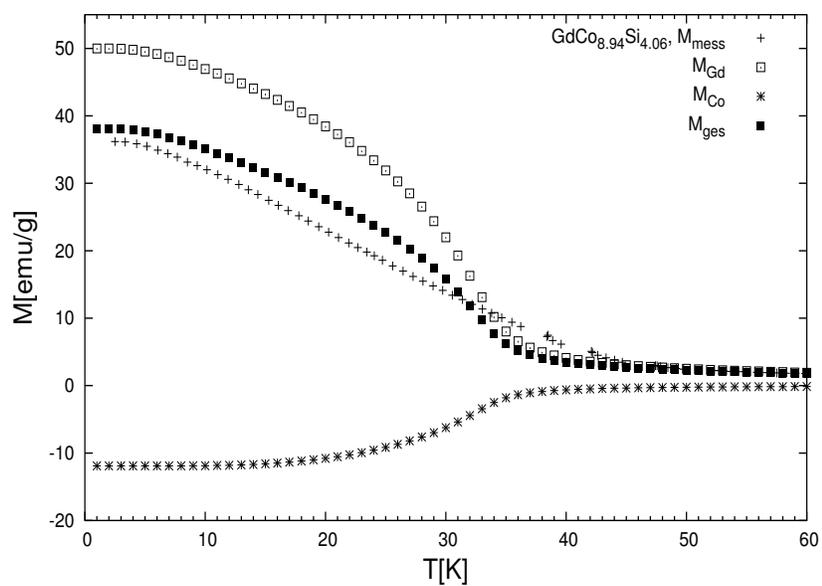
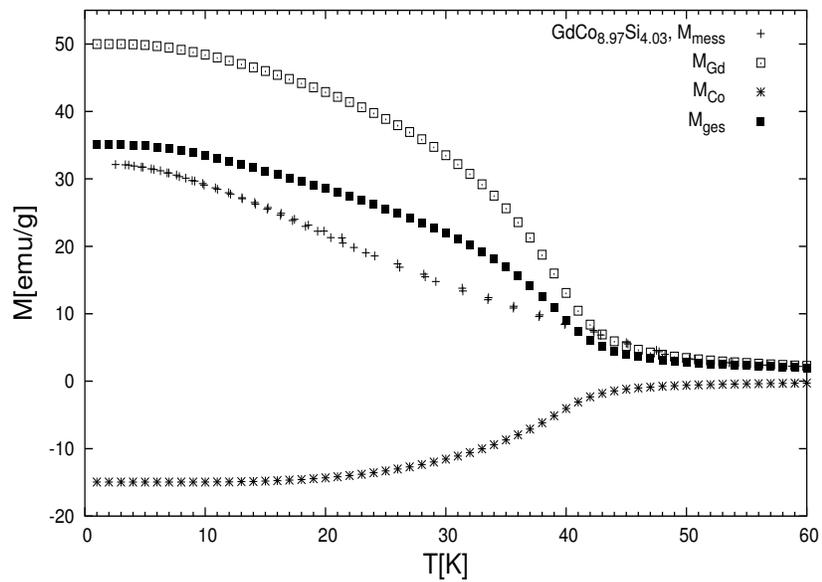


Figure 6.2: Der Vergleich der Rechnungen der Magnetisierungen mit den Messungen von den Proben $\text{GdCo}_{8.97}\text{Si}_{4.03}$ (SON 7 oberes Bild) und $\text{GdCo}_{8.94}\text{Si}_{4.06}$ (SON 8 unteres Bild). Diese Messungen sind bei 1 T durchgeführt worden.

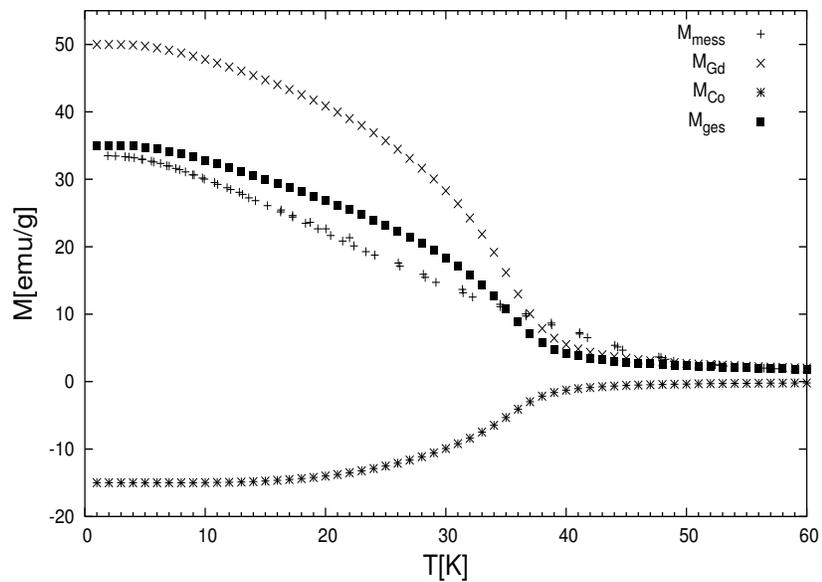
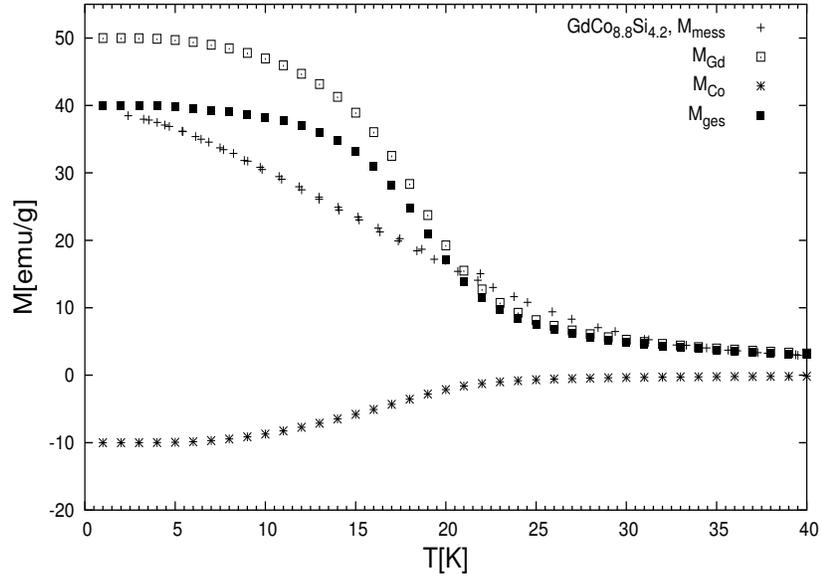


Figure 6.3: Der Vergleich der Rechnungen der Magnetisierungen mit den Messungen von den Proben $\text{GdCo}_{8.8}\text{Si}_{4.2}$ (SON 9 oberes Bild) und GdCo_9Si_4 (SON 11 unteres Bild). Diese Messungen sind bei 1 T durchgeführt worden.

gut mit der Messung übereinstimmen. Die Rechnungen für verschiedene Felder sind dem Anhang zu entnehmen.

Table 6.3: Die Gesamtsättigungsmagnetisierungen bei $T = 3$ K, Co-Untergittersättigungsmagnetisierungen $T = 3$ K und die Landefaktoren des Co-Untergitters der Serie $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$.

$\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$	$M_{ges}(3K) [\frac{emu}{g}]$	$M_{Co}(3K) [\frac{emu}{g}]$	$\mu_{eff} [\mu_B]$	g_{Co}	$T_C^{mess} [K]$	$T_C^{rech} [K]$
$\text{GdCo}_{8.8}\text{Si}_{4.2}$	40	10	8.03	0.3	22	19
$\text{GdCo}_{8.94}\text{Si}_{4.06}$	37	11.9	8	0.38	37	39
$\text{GdCo}_{8.97}\text{Si}_{4.03}$	34	14.96	8.1	0.48	40	41
GdCo_9Si_4	35	15	8.1	0.4	44	46

Die effektiven Momente, die gerechneten Übergangstemperaturen und die "fiktiven" g -Faktoren kann man der Tabelle 6.3 entnehmen, man sieht, dass der "fiktive" g -Faktor g_{Co} von Co kleiner als 1 ist. Für lokalisierte Momente muss g zwischen 1 und 2 liegen [18, 19, 20]. Aber für $3d$ -Momente sollte der g -Faktor ungefähr 2 sein, da das Bahnmoment aufgrund des Einflusses des Kristallfeldes nahezu ausgelöscht ist. Der "fiktive" g -Faktor weist darauf hin, dass eine rein lokale Beschreibung des Co-Untergitters nur ein Näherung ist.

Die Temperaturabhängigkeit des Co-Untergitters im geordneten Zustand ist ebenfalls nur als Näherung mit der Molekularfeldtheorie beschreibbar, eine bessere Beschreibung würde man im Rahmen eines Bandmodells für $3d$ -Momente erhalten.

Chapter 7

Zusammenfassung

Zu Beginn dieser Arbeit werden die experimentiellen Methoden vorgestellt, die für die Untersuchung der magnetischen Eigenschaften von $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$ eingesetzt wurden. Anschließend werden die experimentiellen Ergebnisse, diese sind Röntgendiffraktionmessungen für die Phasenanalyse, Widerstandsmessungen, Suszeptibilitätsmessungen und Magnetisierungsmessungen an $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$ präsentiert.

Es zeigt sich, dass die Verbindungen $\text{GdCo}_{9-x}\text{Si}_{4+x}$ einen ferrimagnetischen Phasenübergang mit Übergangstemperaturen T_C zwischen 20 und 50 K aufweisen. Die Wechselwirkung zwischen den lokalen $4f$ -Momenten, und den itineranten $3d$ -Momenten verursacht eine antiparallele Kopplung der magnetischen Untergitter von Gd und Co. Dieser Ferrimagnetismus wurde mit Magnetisierungsmessungen verifiziert und anschließend mittels einer Molekularfeldtheorie für Ferrimagnetismus der Néeltheorie beschrieben. Dazu wurde ein Computerprogramm in der Programmiersprache C entwickelt, in welchem die Néeltheorie implementiert wurde. Mit diesem Programm wurde die inverse Suszeptibilität als Funktion der Temperatur im paramagnetischen Bereich mit einem "Least Square" Verfahren angepasst und daraus die Molekularfeldkoeffizienten γ_{aa} , γ_{ab} und γ_{bb} ausgerechnet. Mit diesen Molekularfeldkoeffizienten für die beiden magnetischen Untergitter und der Wechselwirkung zwischen den Untergittern, wurde die Magnetisierung als Funktion der Temperatur und die Magnetisierung als Funktion des Feldes berechnet und mit den experimentiellen Ergebnissen verglichen.

Die im Zuge dieser Arbeit gewonnen Ergebnisse lassen folgern, dass die itineranten Co- $3d$ Momente nur in erster Näherung mit der Molekularfeldtheorie für lokale Momente beschreibbar sind. Eine bessere Beschreibung würde man im Rahmen des Bandmodells für $3d$ -Momente erhalten, die mit der

lokalisierten Beschreibung des Gd-Untergitters verknüpft werden müßte.

Die Analyse der Magnetisierungsdaten im Rahmen der Néeltheorie zeigte, dass die stärkste Kopplung innerhalb des Co-Untergitters auftritt. Der Molekularfeldkoeffizient γ_{bb} des Co-Untergitters von GdCo_9Si_4 ist mit dem Wert von $190[\frac{\text{Oe mol}}{\text{emu}}]$ um vier Größenordnungen größer als die Kopplung im Gd-Untergitter. Die Zwischengitterkopplung γ_{ab} mit dem Wert von $11.25[\frac{\text{Oe mol}}{\text{emu}}]$ für GdCo_9Si_4 ist für den Ferrimagnetismus und für die Polarisation des Gd-Untergitters maßgeblich. Die Temperatur- und Feldabhängigkeit der Magnetisierung werden mit dem Modell und den genannten Parametern gut beschrieben.

Bibliography

- [1] Rao G. H., Liang J. K., Zhang Y. L., Cheng X. R. and Tang W. H., *Appl. Phys. Lett* 64 p. 1650 (1994).
- [2] Hu F. X., Shen B. G., Sun J. R., Cheng Z. H. and Zhang X. X., *J. Phys.: Condens. Matter* 12 p. 691 (2000).
- [3] Fujieda F., Fujita A., Fukamichi K., Yamazaki Y. and Lijima Y., *Appl. Phys. Lett.* 79 p. 653 (2001).
- [4] Fujita A., Akamatsu Y. and Fukamichi K., *J. Appl. Phys.* 85 p. 4756 (1999).
- [5] H. Michor, M. El-Hagary, M. Della Mea, M.W. Pieper, M. Reissner, G. Hilscher, *Itinerant electron metamagnetism in LaCo₉Si₄*, *Physical Review B* 69 (2004) 081404.
- [6] H. Michor, M. El-Hagary, S. Özcan, A. Horyn, E. Bauer, G. Hilscher, S. Khmelevskiy, P. Mohn, G. Schneider, G. Giester and P. Rogl, *Weak itinerant ferromagnetism in YCo₉Si₄*, *Physica B* in print.
- [7] M. El-Hagary, H. Michor, E. Bauer, R. Grössinger, P. Kersch, D. Eckert, K. H. Müller, P. Rogl, G. Giester and G. Hilscher, *Physica B* in print; cond-mat/0406551.
- [8] M. El-Hagary, H. Michor, M. Wind, E. Bauer, G. Hilscher and P. Rogl, *J. Alloys Comp.*, 367 p. (239), 2004.
- [9] M. Q. Huang, W. Wallace, R. T. Obermyer, S. Simizu, M. Mc Henry and S. G. Sakar, *J. Appl. Phys.*, 79 p. (5949), 1996.
- [10] M. El-Hagary, H. Michor, E. Bauer, M. Della Mea, K. Hense and G. Hilscher, *J. Magn. Magn. Mater* 272 e445.
- [11] M. El-Hagary, H. Michor, A. Matar, M. Giovanni, Z. Heiba, S. Özcan, D. Triyono, R. Grössinger, E. Bauer and G. Hilscher, *Phase formation of GdCo_{13-x}Si_x and ferri-magnetism in GdCo₉Si₄*, in print
- [12] M. El-Hagary, *Egypt. J. Sol.* submitted 2004.

- [13] Juan Rodrigez-Carvajal, *An Introduction to the Program Fullprof, Physica B* Vol. 192, p. 55 (1993).
- [14] J. H. van Leeuwen, *Dissertation*, Leiden (1919) and *J. de Physique* 2 361 (1921).
- [15] W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 7 Vielteilchentheorie*, Springer-Verlag, 5. Auflage (2002)
- [16] C. Zener, *Interaction Between the d Shells in Transition Metals*, *Phys. Rev.* 81 440 (1951).
- [17] P. Mohn *Magnetism in the Solid State An Introduction*, Springer-Verlag, 1. Auflage.
- [18] Ch. Kittel *Einführung in die Festkörperphysik*, Oldenbourg-Verlag, 13. Auflage.
- [19] H. Ibach und H. Lüth *Festkörperphysik*, Springer-Verlag, 6. Auflage.
- [20] L.D. Landau und E. M. Lifschitz *Elektrodynamik der Kontinua, Band 8*, Verlag Harri Dautsch, 5. Auflage.
- [21] M. A. Rudermann and C. Kittel, *Phys. Rev.*, 96 99 (1954).
- [22] T. Kasuya, *Progr. Theor. Phys. (Japan)*, 16 45 (1965).
- [23] K. Yoshida, *Phys. Rev.*, 106 893 (1957).
- [24] P. Weiss, *J. Phys. Radium*, 4 661 (1907).
- [25] W. Heitler and F. London, *Zeitsch. f. Physik*, 44 455 (1927).
- [26] W. Pauli, *Zeitsch. f. Physik*, 2 201 (1920).
- [27] P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.*, 117A 610 (1928), *ibid.* 118A 351 (1928).
- [28] P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.*, 112A 661 (1926),
- [29] W. Heisenberg, *Zeitsch. f. Physik*, 38 201 (1926).
- [30] L. Neèl, *Ann. Phys. (Paris)*, 17 5 (1932).
- [31] L. Neèl, *Ann. Phys. (Paris)*, 3 137 (1948).
- [32] S. Smart, *Effective Field Theories of Magnetism*, Saunders Copm. Philadelphia + London (1966).
- [33] Heribert Rais, Diplomarbeit, TU-Wien (1973).

- [34] Heribert Rais, Dissertation, TU-Wien (1977).
- [35] E. C. Stoner, *Proc. Roy. Soc. A*, 154 656 (1936), *ibid.* 165 372 (1938).
- [36] E. P. Wohlfarth, *Rev. Mod. Phys.*, 25 211 (1953), *ibid.* 165 372 (1938).
- [37] K. Schwarz and P. Mohn , *J. Phys. F: Met. Phys.*, 14 L128 (1984),
- [38] K. Ishikawa, M. Yamaguchi, I. Yamamoto, S. Mizusaki, F. Ishikawa and T. Goto , *J. Alloys Comp.*, 356 227 (2003),
- [39] E. Burzo, R. Tetean, Zs. Sarkozi, L. Chioncel, M. Neumann , *J. Alloys Comp.*, 323 490 (2001),
- [40] H. Nowotny, *Theoretische Festkörperphysik 2*, Skriptum, TU-Wien 1999,
- [41] E. Grüneisen, *Handbuch Physik*, Vol. 13 p. 1 (1928),
- [42] E. Grüneisen, *Zeitschrift Physik*, Vol. 44 p. 615 (1927).
- [43] G. Grinvald *The Elecron-Phononinteraction in Metals*, North Holland Amsterdam.
- [44] G. T. Meaden, *Conduction Electron Scattering and Resistance of the Magnetic Elements*, *Contemp. Phys.*, Vol. 12 313 (1971).
- [45] C. Pfleiderer, S. R. Julian, G. G. Lonzarich, *Non-Fermi-liquid nature of the normal state of itinerant-electron ferromagnets*, *Nature*, Vol. 414 (1971).
- [46] M. E. Fisher, J. S. Langer, *Resistive Anomalies At Magnetic Critical Points*, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 20 (1968).
- [47] T. G. Richard, D. J. W. Geldart *Resistive Anomalies at the Critical Point of Isotropic Ferromagnets*, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 30 (1973).
- [48] E. Bauer and R. Hauser *Highly Correlated Electron Systems*, Skriptum, TU-Wien 2003
- [49] Thomas Holubar, Dissertation *3-Achsen SQUID-Magnetometrie*, TU-Wien (1995).
- [50] Werner Buckel *Supraleitung*, VCH 5. Auflage 1994.
- [51] C. Enss und S. Hunklinger *Tieftemperaturphysik*, Springer-Verlag 1. Auflage 2000.

- [52] M. Nikolo *A Guide to alternating current susceptibility measurments and alternating current susceptometer design*, American Association of Physics Teachers 1995.
- [53] *Handbuch des Siemens D 500*, Siemens Aktiengesellschaft (1977).
- [54] W. Tang, J. Liang, Y. Zhao, Y. Guo, G, Rao, F. Yang, *J. Appl. Phys*, 226 p. (139), 1995.
- [55] Z. Lingmin, S. Zhihui, H. Wei, Z. Yinghong, *J. Appl. Phys*, 366 p. (187), 2004.
- [56] M. El-Hagary, H. Michor, M. Wind, E. Bauer, G. Hilscher, P. Rogl *Mmagnetic behavior of $LaCo_{13-x}Si_x$ in the vicinity of the critical concentration $x = 4$* , *J. Alloys Comp.* 367 p. 263 (2003) .
- [57] F. Pouparian, S. K. Malik, E. B. Boltich, S. G. Sankar and W. E. Wallace, *IEEE Trans. Magn* 25 (1989) .
- [58] H. E. Nigh, S. Legvold und F. H. Spedding, *Phys. Rev.*, 132 p. 1092 (1963)

Appendix A

Programmbeschreibung

Das Program besteht aus einer Hauptfunktion der sogenannten "main", aus dieser "main" werden alle Funktionen aufgerufen mit denen die speziellen Berechnungen durchgeführt werden. Die Daten, die an die Funktionen übergeben werden, werden als Zeiger auf die Struktur "rparams" übergeben. In der Struktur "rparams" sind sowohl die Parameter der Néelhyperbel als auch die Molekularfeldkoeffizienten deklariert und auch die anderen Parameter wie die Untergittersättigungsmagnetisierungen und die Spins der Untergitter.

Bevor man das Program in der Kommandozeile aufruft muss man die Parameter

1. MG_{ges} : Gesamtmolekulargewicht der Verbindung
2. Ma_0 : Untergittermagnetisierung von Untergitter a
3. Mb_0 : Untergittermagnetisierung von Untergitter b
4. S_a : Spin vom Untergitter a
5. S_b : Spin vom Untergitter b
6. g_a : Landefaktor vom Untergitter a
7. g_b : Landefaktor vom Untergitter b

händisch setzen.

Beim aufrufen des Programs muss man 8 Kommandozeilenargumente angeben:

1. $argv[0]$: Executable des Programs selbst

2. `argv[1]` : Die Datei in der die Messung der Magnetisierung über der Temperatur steht.
3. `argv[2]` : Die Datei in der die Messung der Magnetisierung über dem Feld steht.
4. `argv[3]` : Eine Datei in der die Rechnung der Magnetisierung über der Temperatur geschrieben werden soll.
5. `argv[4]` : Eine Datei in der die Rechnung der Magnetisierung über dem Feld geschrieben werden soll.
6. `argv[5]` : Die Temperatur ab welcher der Fit durchgeführt werden soll.
7. `argv[6]` : Das Feld bei der die Messung der Magnetisierung über der Temperatur gemacht wurde.
8. `argv[7]` : Die Temperatur bei die Messung der Magnetisierung über dem Feld gemacht wurde.

Das Hauptprogram ruft dann die Funktion "FitGnuplot2" auf, in dieser Funktion wird der "Least square" Fit durchgeführt. Danach werden in der Funktion "gammaSmart" die Molekularfeldkoeffizienten bestimmt.

Das Lösen der transzendenten Gleichungen für die Untergittermagnetisierungen wird mit der Funktion "berech" für die Berechnung der Magnetisierung über Temperatur durchgeführt, dies geschieht in einer Schleife wo für 300 verschiedene Temperaturwerte die Gleichungen (2.23) und (2.24) numerisch mittels eines rekursiven Verfahrens gelöst.

```

j=0;
for(i=1.0;i<=300.0;i=i+1.0)
{
  Params.TT=i;
  berech(&Params);
  Ma[j]=Params.Ma;
  Mb[j]=Params.Mb;
  j++;
}

```

Das gleiche wird in einer zweiten Schleife für verschiedene Felder gemacht um auch die Magnetisierung als Funktion des Feldes zu berechnen. Dies wird mit der Funktion "berech2" durchgeführt.

```

j=0;
for(i=0.0;i<=300000.0;i=i+1000.0)
{
    Params.H_0_cgs=i;
    berech2(&Params);
    Ma2[j]=Params.Ma2;
    Mb2[j]=Params.Mb2;
    j++;
}

```

Das folgende ist ein komplettes Codelisting des Programs.

```

#include <stdlib.h>
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <gsl/gsl_const_num.h>
#include <gsl/gsl_const_cgsm.h>
#include <gsl/gsl_const_mkxa.h>
#include <gsl/gsl_fit.h>
#include <gsl/gsl_vector.h>
#include <gsl/gsl_multiroots.h>

#define mu_B_cgs 9.27408e-21
#define k_b_cgs 1.38066e-16

struct rparams
{
    double H_0_cgs;
    double TT;
    double G_aa;
    double G_ab;
    double G_bb;
    double G_aa2;
    double G_ab2;
    double G_bb2;
    double S_a;
    double S_b;
    double Ma;
    double Mb;
    double Ma2;
    double Mb2;
    double Ma_0;
    double Mb_0;
    double Mges_0;
}

```

```
double g_a;
double g_b;
double lambda;
double mu;
double theta1;
double theta2;
double eta;
double C_ges;
double chi0;
double sig;
double MG;
};
```

```
struct NeelHypPar
{
double O;
double C;
double S;
double D;
double O_Err;
double C_Err;
double S_Err;
double D_Err;
};
```

```
int print_state2(size_t iter,gsl_multirout_fsolver *s);
```

```
int transcend_f(const gsl_vector *x,struct rparams *Params,gsl_vector *f);
void berech(struct rparams *Params);
```

```
void berech2(struct rparams *Params);
```

```
void Vergleich(struct rparams *Params,double *Ma,double *Mb,
double G_ab,double G_aa,double G_bb,
char *Filename,char *BerechDat);
```

```
void Vergleich2(struct rparams *Params,double *Ma,double *Mb,
double G_ab,double G_aa,double G_bb,char *Filename,
char *BerechDat);
```

```
void Vergleich3(struct rparams *Params,char *);
```

```

int transcend_f3(const gsl_vector *x,struct rparams *Params,gsl_vector *f);

int print_state3(size_t iter,gsl_multiroot_fsolver *s);

void berechGammas(struct rparams *Params,double x,double y,double z);

void berechParams(struct rparams *Params);

double coth(double x);

double Brill(double J,double x);

void FitGnuplot2(struct rparams *Params,char *,double );
void gammaSmart(struct rparams *Params);

/*****
*****/
int transcend_f3(const gsl_vector *x,struct rparams *Params,gsl_vector *f)
{

    /*
    Die Unbekannten sind
    G_aa=x0
    G_bb=x1
    G_ab=x2
    */

    double x0=gsl_vector_get(x,0);
    double x1=gsl_vector_get(x,1);
    double x2=gsl_vector_get(x,2);

    double y0=Params->theta1+2.0*Params->C_ges*Params->lambda*Params->mu*x2-
        Params->C_ges*Params->lambda*Params->lambda*x0-
        Params->C_ges*Params->mu*Params->mu*x1;

    double y1=Params->theta2-2.0*Params->C_ges*Params->lambda*Params->mu*x2-
        Params->C_ges*Params->lambda*Params->mu*x0-
        Params->C_ges*Params->lambda*Params->mu*x1;

    double y2=Params->sig*sqrt(Params->eta/(Params->C_ges*Params->lambda*Params->mu))+

```

```

        x2*(Params->lambda-Params->mu)+
        Params->lambda*x0-Params->mu*x1;

    gsl_vector_set(f,0,y0);
    gsl_vector_set(f,1,y1);
    gsl_vector_set(f,2,y2);

    return GSL_SUCCESS;

}
/*****/

/*****

*****/
int print_state3(size_t iter,gsl_multiroot_fsolver *s)
{
    printf("iter=%i x=%.6f %.6f %.6f f(x)= %.4e %.4e %.4e\n",iter,
    gsl_vector_get(s->x,0),
    gsl_vector_get(s->x,1),
    gsl_vector_get(s->x,2),
    gsl_vector_get(s->f,0),
    gsl_vector_get(s->f,1),
    gsl_vector_get(s->f,2));
}
/*****/

/*****

*****/
void berechGammas(struct rparams *Params,double x,double y,double z)
{

    double a,b;
    const gsl_multiroot_fsolver_type *T;
    gsl_multiroot_fsolver *s;

    int status;

```

```
size_t i,iter=0;

const size_t n=3;

gsl_multiroot_function f={&transcend_f3,n,Params};

double x_init[3]={x,y,z};
gsl_vector *x=gsl_vector_alloc(n);

gsl_vector_set(x,0,x_init[0]);
gsl_vector_set(x,1,x_init[1]);
gsl_vector_set(x,2,x_init[2]);

T=gsl_multiroot_fsolver_hybrids;
s=gsl_multiroot_fsolver_alloc(T,3);
gsl_multiroot_fsolver_set(s,&f,x);

print_state3(iter,s);

do
{
    iter++;
    status=gsl_multiroot_fsolver_iterate(s);

    print_state3(iter,s);

    if(status) break;

    status=gsl_multiroot_test_residual(s->f,1e-7);

}while(status == GSL_CONTINUE && iter<1000);

//printf("status= %s\n",gsl_strerror(status));

Params->G_aa=gsl_vector_get(s->x,0);
Params->G_bb=gsl_vector_get(s->x,1);
Params->G_ab=gsl_vector_get(s->x,2);

gsl_multiroot_fsolver_free(s);
gsl_vector_free(x);

}
```

```

/*****/

/*****
*****/
void berechParams(struct rparams *Params)
{

    /*
    Die unbekanntes sind so angeordnet, dass jetzt
    theta1=x0
    theta2=x1
    eta=x2
    */

    Params->theta1=-2.0*Params->C_ges*Params->G_ab*Params->lambda*Params->mu+
        Params->C_ges*Params->lambda*Params->lambda*Params->G_aa+
    Params->C_ges*Params->mu*Params->mu*Params->G_bb;

    Params->theta2=2.0*Params->C_ges*Params->G_ab*Params->lambda*Params->mu+
        Params->C_ges*Params->lambda*Params->mu*Params->G_aa+
    Params->C_ges*Params->lambda*Params->mu*Params->G_bb;

    Params->eta=Params->C_ges*Params->G_ab*Params->G_ab*Params->lambda*Params->mu*
        (Params->lambda*(1.0+Params->G_aa/Params->G_ab)-Params->mu*(1.0+Params->
        (Params->lambda*(1.0+Params->G_aa/Params->G_ab)-Params->mu*(1.0+Params->G_bb/Par

}

/*****
*****/
int transcend_f(const gsl_vector *x,struct rparams *Params,gsl_vector *f)
{

    double x0=gsl_vector_get(x,0);
    double x1=gsl_vector_get(x,1);

    double F1,F2;

```

```

F1=(Params->g_a*Params->S_a*mu_B_cgs)/(k_b_cgs*Params->TT);
F2=(Params->g_b*Params->S_b*mu_B_cgs)/(k_b_cgs*Params->TT);

double y0=x0-Params->Ma_0*Brill(Params->S_a,
    (F1*(Params->H_0_cgs+Params->G_aa*x0+Params->G_ab*x1)));
double y1=x1-Params->Mb_0*Brill(Params->S_b,
    (F2*(Params->H_0_cgs+Params->G_ab*x0+Params->G_bb*x1)));

gsl_vector_set(f,0,y0);
gsl_vector_set(f,1,y1);

return GSL_SUCCESS;

}
/*****/

/*****

*****/
int print_state2(size_t iter,gsl_multiroot_fsolver *s)
{
    printf("iter=%i x=%.10f %.10f f(x)= %.4e %.4e\n",iter,
gsl_vector_get(s->x,0),
gsl_vector_get(s->x,1),
gsl_vector_get(s->f,0),
gsl_vector_get(s->f,1));
}

/*****/

/*****

*****/
void berech(struct rparams *Params)
{
    double a,b;
    const gsl_multiroot_fsolver_type *T;

```

```
gsl_multiroot_fsolver *s;

int status;
size_t i, iter=0;

const size_t n=2;

gsl_multiroot_function f={&transcend_f,n,Params};

double x_init[2]={100.0,100.0};
gsl_vector *x=gsl_vector_alloc(n);

gsl_vector_set(x,0,x_init[0]);
gsl_vector_set(x,1,x_init[1]);

T=gsl_multiroot_fsolver_hybrids;
s=gsl_multiroot_fsolver_alloc(T,2);
gsl_multiroot_fsolver_set(s,&f,x);

//print_state2(iter,s);

do
{
    iter++;
    status=gsl_multiroot_fsolver_iterate(s);

    //print_state2(iter,s);

    if(status) break;

    status=gsl_multiroot_test_residual(s->f,1e-5);

}while(status == GSL_CONTINUE && iter<100);

//printf("status= %s\n",gsl_strerror(status));

Params->Ma=gsl_vector_get(s->x,0);
Params->Mb=gsl_vector_get(s->x,1);

gsl_multiroot_fsolver_free(s);
gsl_vector_free(x);
```

```

}
/*****/

/*****

*****/
void berech2(struct rparams *Params)
{

double a,b;
const gsl_multiroot_fsolver_type *T;
gsl_multiroot_fsolver *s;

int status;
size_t i,iter=0;

const size_t n=2;

gsl_multiroot_function f={&transcend_f,n,Params};

double x_init[2]={100.0,100.0};
gsl_vector *x=gsl_vector_alloc(n);

gsl_vector_set(x,0,x_init[0]);
gsl_vector_set(x,1,x_init[1]);

T=gsl_multiroot_fsolver_hybrids;
s=gsl_multiroot_fsolver_alloc(T,2);
gsl_multiroot_fsolver_set(s,&f,x);

//print_state2(iter,s);

do
{
iter++;
status=gsl_multiroot_fsolver_iterate(s);

//print_state2(iter,s);

if(status) break;

status=gsl_multiroot_test_residual(s->f,1e-5);

```

```

    }while(status == GSL_CONTINUE && iter<100);

    //printf("status= %s\n",gsl_strerror(status));

    Params->Ma2=gsl_vector_get(s->x,0);
    Params->Mb2=gsl_vector_get(s->x,1);

    gsl_multiroot_fsolver_free(s);
    gsl_vector_free(x);

}
/*****/

/*****

*****/
void Vergleich2(struct rparams *Params,double *Ma,double *Mb,
               double G_ab,double G_aa,double G_bb,char *Filename,
               char *BerechDat)
{
    FILE *fid,*fid2;
    double F1,F2;
    double fa,fb,fges,SUS,ISUS;
    double i;
    int j;

    F1=(Params->S_a*Params->g_a*mu_B_cgs);
    F2=(Params->S_b*Params->g_b*mu_B_cgs);

    fid=fopen(BerechDat,"w");
    if(fid==NULL)
    {
        printf("Fehler beim oeffnen der Datei! \n");
        exit(0);
    }

    j=0;
    for(i=1.0;i<=300.0;i=i+1.0)
    {

```

```

    fa=Params->Ma_0*Brill(Params->S_a,
                          (F1/(k_b_cgs*i))*
(Params->H_0_cgs+(G_aa*Ma[j]+G_ab*Mb[j])));

    fb=-Params->Mb_0*Brill(Params->S_b,
                          (F2/(k_b_cgs*i))*
(Params->H_0_cgs+(G_ab*Ma[j]+G_bb*Mb[j])));

    fges=fa+fb;
    SUS=fges/Params->H_0_cgs;
    ISUS=1.0/SUS;
    fprintf(fid,"%f %.10e %.10e %.10e %f %.10e %.10e\n",
           i,fa,fb,fges,Params->H_0_cgs,SUS,ISUS);
    j++;
}

fclose(fid);

fid2=popen("/usr/bin/gnuplot -persist","w");
if(!fid2)
{
    fprintf(stderr,"Cannot open pipe to gnuplot");
    exit(EXIT_FAILURE);
}

fprintf(fid2,"plot [0:300]\\"%s\\"
        "using 1:2 title \"Ma\" with points,"
        "\\"%s\\" using 1:3 title \"Mb\"with points,"
        "\\"%s\\" using 1:4 title \"Mges\"with points,"
        "\\"%s\\" using 1:2 title \"Mexp\"with points"
        ,BerechDat,BerechDat,BerechDat,Filename);

fclose(fid2);

}

/*****
*****/

```

```

void Vergleich(struct rparams *Params,double *Ma,double *Mb,
              double G_ab,double G_aa,double G_bb,
              char *Filename,char *BerechDat)
{
FILE *fid,*fid2;
double F1,F2;
double fa,fb,fges;
int j;
double i;
double mu_0=1.24663706e-6;

F1=(Params->S_a*Params->g_a*mu_B_cgs)/(k_b_cgs*Params->TT);
F2=(Params->S_b*Params->g_b*mu_B_cgs)/(k_b_cgs*Params->TT);

fid=fopen(BerechDat,"w");
if(fid==NULL)
{
printf("Fehler beim oeffnen der Datei! \n");
exit(0);
}

j=0;
for(i=0.0;i<300000.0;i=i+1000.0)
{

fa=Params->Ma_0*Brill(Params->S_a,F1*(i+(G_aa*Ma[j]+G_ab*Mb[j])));

fb=Params->Mb_0*Brill(Params->S_b,F2*(i+(G_ab*Ma[j]+G_bb*Mb[j])));

fges=fa-fb;

fprintf(fid,"%f %.10e %.10e %.10e %f\n",i,fa,fb,fges,Params->TT);
j++;
}

fclose(fid);

fid2=popen("/usr/bin/gnuplot -persist","w");
if(!fid2)
{
fprintf(stderr,"Cannot open pipe to gnuplot");
exit(EXIT_FAILURE);
}
}

```

```

    }

    fprintf(fid2,"plot [0:300000]"
"\%s\" using 1:4 title \"Mges\","
"\%s\" using 1:2 title \"M_Gd\","
"\%s\" using 1:3 title \"M_Co\","

"\%s\" index 0 using 1:2 title \"Mexp\""
,BerechDat,BerechDat,BerechDat,Filename);

    fclose(fid2);
}

/*****
Berechnet nur den cotangenshyporbolicus
*****/
double coth(double x)
{
    double y;
    y=1.0/tanh(x);
    return y;
}
/*****/

/*****
Berechnung der Brillouinfunktion
*****/
double Brill(double J,double x)
{
    double y;
    double F=(2.0*J+1.0)/(2.0*J);
    double F2=1.0/(2.0*J);
    y=F*coth(F*x)-F2*coth(F2*x);

    return y;
}
/*****/

```

```

/*****
*****/
void FitGnuplot2(struct rparams *Params,char *FileName,double T_C)
{
    FILE *f;

    printf("Bin in der Funktion FitGnuplot2!\n");

    printf("C_ges=%f theta1=%f theta2=%f eta=%f\n",
           Params->C_ges,Params->theta1,Params->theta2,Params->eta);

    f=popen("/usr/bin/gnuplot -persist","w");
    if(!f)
    {
        fprintf(stderr,"Cannot open pipe to gnuplot");
        exit(EXIT_FAILURE);
    }

    fprintf(f,"set ylabel \"M [emu/mol]\"; set xlabel \"T [K]\";"
            "plot [0:300]\"%s\" using 1:2;"
            ,FileName);

    fclose(f);

    f=popen("/usr/bin/gnuplot -persist","w");

    if(!f)
    {
        fprintf(stderr,"Cannot open pipe to gnuplot");
        exit(EXIT_FAILURE);
    }

    fprintf(f,"f(x)=1/(chi0+1/((x-theta1)/C_ges-eta/(x-theta2)));");
    // "f(x)=(x-theta1)/C_ges-eta/(x-theta2)";
    fprintf(f,"C_ges=%f;theta1=%f;",Params->C_ges,Params->theta1);
    fprintf(f,"eta=%f;theta2=%f;",Params->eta,Params->theta2);
    fprintf(f,"chi0=%f;",Params->chi0);

    // fprintf(f,"f(x)=(x-theta1)/C_ges-(eta/(x-theta2)));");

```

```

//
// fprintf(f,"C_ges=%f;theta1=%f;",Params->C_ges,Params->theta1);
// fprintf(f,"eta=%f;theta2=%f;",Params->eta,Params->theta2);

fprintf(f,"fit [%f:300]f(x) \\"%s\\" using 1:($4/799.964)"
        " via C_ges,theta1,eta,theta2;"
        ,T_C,FileName);
fprintf(f,"set ylabel \"1/chi [0e mol/emu]\"; set xlabel \"T [K]\";"
        "plot [0:300]f(x),\\"%s\\" using 1:($4/%f);"
        ,FileName,Params->MG);
fclose(f);

printf("Verlasse die Funktion FitGnuplot2!\n");

}
/*****/

void gammaSmart(struct rparams *Params)
{
    double k1,k2;
    double l,m;
    double e,t1,t2,C;

    l=Params->lambd;
    m=Params->mu;
    e=Params->eta;
    t1=Params->theta1;
    t2=Params->theta2;
    C=Params->C_ges;
    k1=sqrt(e/C);
    k2=1.0/(1.0-(2.0*l/(1-m))+(2.0*l*k1/(m*(1-m))));

    Params->G_bb=k2*((t1/(C*m*m))-(2.0*l*k1)/(m*(1-m))+(4.0*l*k1/((1-m)*(1+m)))+
        (2.0*l*t2/(m*m*C*(1+m))));

    Params->G_aa=Params->G_bb-(2.0*k1/(1+m))-(t2*(1-m)/(C*l*m*(1+m)));

    Params->G_ab=(k2+l*Params->G_aa-m*Params->G_bb)/(1-m);
}

```

```

/*****

*****/
void Vergleich3(struct rparams *Params,char *FileName)
{
    FILE *f;

    f=popen("/usr/bin/gnuplot -persist","w");
    if(!f)
    {
        fprintf(stderr,"Cannot open pipe to gnuplot");
        exit(EXIT_FAILURE);
    }

    fprintf(f,"f(x)=1/(chi0+1/((x-theta1)/C_ges-eta/(x-theta2)));");
    //"f(x)=(x-theta1)/C_ges-eta/(x-theta2)");
    fprintf(f,"C_ges=%f;theta1=%f;",Params->C_ges,Params->theta1);
    fprintf(f,"eta=%f;theta2=%f;",Params->eta,Params->theta2);
    fprintf(f,"chi0=%f;",Params->chi0);

    fprintf(f,"set ylabel \"M [emu/mol]\"; set xlabel \"T [K]\";"
            "plot [0:300]\"%s\" using 1:($4/%f),f(x)"
            ,FileName,Params->MG);

    fclose(f);
}
/*****

/*****
Das ist die Hauptfunktion
*****/
int main(int argc,char *argv[])
{
    int j;
    double i;
    double C_a,C_b;
    double T_C;
    double MG_Co,MG_Gd;

```

```

double Ma[400],Mb[400];
double Ma2[1000],Mb2[1000];
double lambda,mu;
double alpha,beta;
double Tmess,H_0;

struct NeelHypPar NeelP;
struct rparams Params;

Params.MG=799.964;
MG_Gd=157.25;
MG_Co=530.37;

// Params.Ma_0=50.0*MG_ges;
// Params.Mb_0=15.0*MG_ges;
Params.Ma_0=50.0;
Params.Mb_0=15.0;

Params.S_a=3.5;
Params.S_b=0.5;
Params.g_a=2.0;
Params.g_b=0.4;

if(argc < 9)
{
printf("\n Fehler:  Usage %s Datei(M(T))"
      "Datei(M(H) Datei(Berech_M_T)"
      " Datei(Berech_M_H)  T_C H_0_cgs T_Mess chi0\n\n",
      argv[0]);
exit(0);
}

T_C=atof(argv[5]);
Params.H_0_cgs=atof(argv[6]);
Params.TT=atof(argv[7]);
Params.chi0=atof(argv[8]);
/* Fuer T> 50K sind C_ges=7.88155
           theta1=0.65037

           theta2=43.8
           eta=6.6
gute Startwerte

```

```

    Fuer T > 150K sind _ges=11.8
                        theta1=-45.3

        theta2=146.9
        eta=1.4
gute Startwerte */
    Params.C_ges=8.120;
    Params.theta1=-4.67;
    Params.theta2=49.57;
    Params.eta=5.53;

// FitGnuplot2(&Params,argv[1],T_C);
//
// printf("Bitte C_ges eingeben!\n");
// do{scanf("%lf",&Params.C_ges);}while(getchar()!='\n');
//
// printf("Bitte theta1 eingeben!\n");
// do{scanf("%lf",&Params.theta1);}while(getchar()!='\n');
//
// printf("Bitte eta eingeben!\n");
// do{scanf("%lf",&Params.eta);}while(getchar()!='\n');
//
// printf("Bitte theta2 eingeben!\n");
// do{scanf("%lf",&Params.theta2);}while(getchar()!='\n');

C_a=7.88;
C_b=Params.C_ges-C_a;
Params.lambda=C_a/Params.C_ges;
Params.mu=C_b/Params.C_ges;

/*sig ist das Vorzeichen der Wurzel!*/
Params.sig=-1.0;
berechGammas(&Params,0.02,10.0,-1.0);
if(Params.G_ab<0)Params.G_ab=-Params.G_ab;
if(Params.G_aa<0)Params.G_aa=-Params.G_aa;

alpha= Params.G_aa/Params.G_ab;
beta= Params.G_bb/Params.G_ab;

T_C=0.5*Params.C_ges*Params.G_ab*(Params.lambda*alpha+Params.mu*beta+
    sqrt((Params.lambda*alpha-Params.mu*beta)*

```

```

        (Params.lambda*alpha-Params.mu*beta)+4.0*alpha*Params.mu));

// gammaSmart(&Params);
// printf("*****\n");
// printf("Die Gammas lauten:\n");
// printf("\n\tG_ab=%f [0e mol/emu]\n"
//       "\tG_aa=%f [0e mol/emu]\n"
//       "\tG_bb=%f [0e mol/emu]\n",
//       Params.G_ab,Params.G_aa,Params.G_bb);
// printf("*****\n");

/*
Fuer die Werte
Params.G_aa=0.20;
Params.G_ab=-8.0;
Params.G_bb=240.0;
passt die mvst-Kurve ganz gut mit dem Experiment!!!*/

// Params.G_aa=0.20;
// Params.G_ab=-8.0;
// Params.G_bb=240.0;

printf("Die Gammas lauten:\n");
printf("\n\tG_ab=%f [0e mol/emu]\n"
       "\tG_aa=%f [0e mol/emu]\n"
       "\tG_bb=%f [0e mol/emu]\n",
       Params.G_ab,Params.G_aa,Params.G_bb);

/*
Jetzt werden die Parameter der Neelhyperbel zurueck gerechnet
*/

/* berechParams(&Params);*/
printf("*****\n");
printf("C=%f\n"
       "theta1=%f\n"
       "theta2=%f\n"
       "eta=%f\n"
       "chi0=%f\n",

```

```

Params.C_ges,Params.theta1,Params.theta2,Params.eta,Params.chi0);
printf("*****\n");
printf("(gerechnet)T_C=%f\n",T_C);
printf("*****\n");

// alpha=Params.G_aa/Params.G_ab;
// beta=Params.G_bb/Params.G_ab;
//

/*Jetzt werden die transcendenten Gleichungen
 fuer die Ma und Mb s geloest!*/

Params.G_ab=Params.G_ab*Params.MG;
Params.G_aa=Params.G_aa*Params.MG;
Params.G_bb=Params.G_bb*Params.MG;

printf("*****\n");
printf("Die Gammas lauten:\n");
printf("\n\tG_ab=%f [0e g/emu]\n"
       "\tG_aa=%f [0e g/emu]\n"
       "\tG_bb=%f [0e g/emu]\n",

       Params.G_ab,Params.G_aa,Params.G_bb);
printf("*****\n");
printf("*****\n");
printf("alpha=%f beta=%f\n",alpha,beta);
printf("*****\n");

printf("H_0=%f\n",Params.H_0_cgs);
j=0;
for(i=1.0;i<=300.0;i=i+1.0)
{
  Params.TT=i;
  berech(&Params);
  Ma[j]=Params.Ma;
  Mb[j]=Params.Mb;
  j++;
}

```

```

//printf("Ma(3)=%f Mb(3)=%f\n",Ma[2],Mb[2]);

Params.H_0_cgs=atof(argv[6]);
Params.TT=atof(argv[7]);

j=0;
for(i=0.0;i<=300000.0;i=i+1000.0)
{
    Params.H_0_cgs=i;
    berech2(&Params);
    Ma2[j]=Params.Ma2;
    Mb2[j]=Params.Mb2;
//    printf("Ma[%i]=%.10e [emu/g] Mb[%i]=%.10e [emu/g] H_0=%f Gauss\n",
//           j,Ma[j],j,Mb[j],i);
    j++;
}

//printf("Ma2(3)=%f Mb2(3)=%f\n",Ma2[10],Mb2[10]);

// for(j=0;j<100;j++) printf("Ma[%i]=%.10e [emu/g] Mb[%i]=%.10e [emu/g] \n",
//                            j,Ma[j],j,Mb[j]);

Params.H_0_cgs=atof(argv[6]);
Params.TT=atof(argv[7]);

Vergleich(&Params, Ma2, Mb2, Params.G_ab, Params.G_aa,
          Params.G_bb, argv[2], argv[4]);

Vergleich2(&Params, Ma, Mb, Params.G_ab, Params.G_aa,
          Params.G_bb, argv[1], argv[3]);

Vergleich3(&Params, argv[1]);

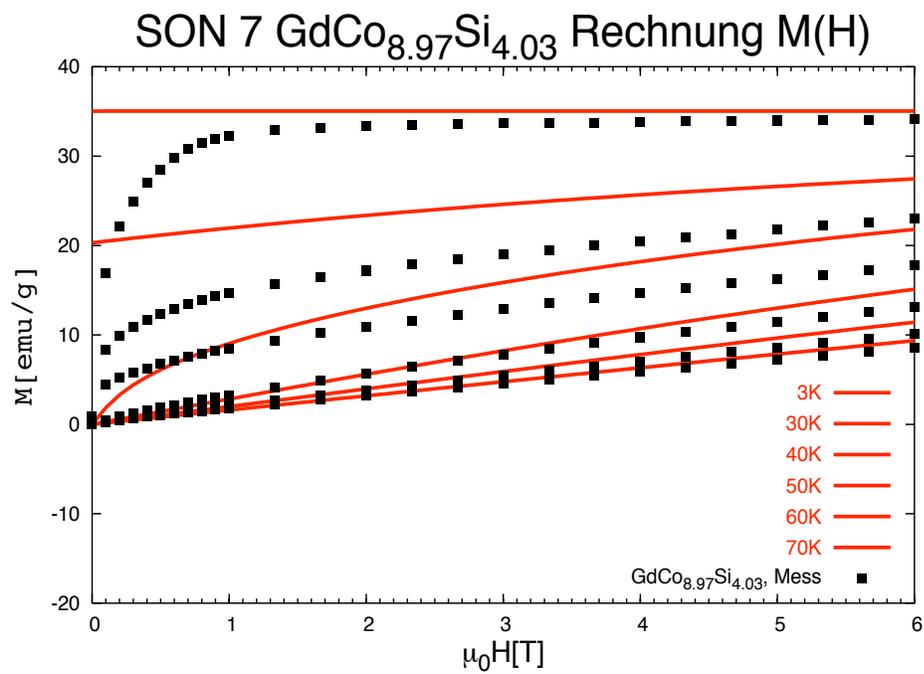
return 0;
}
/*****/

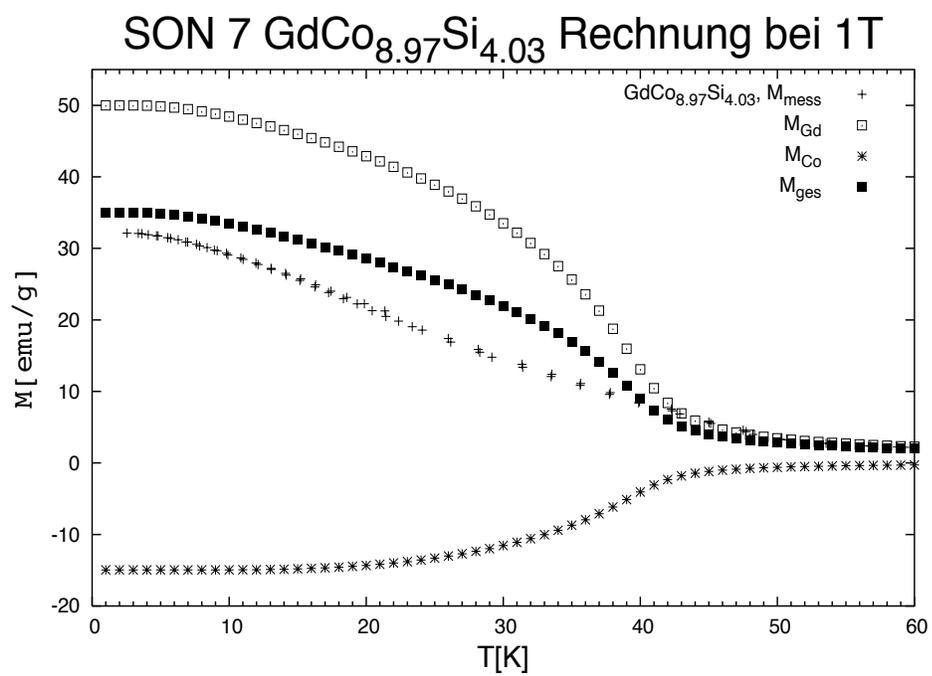
```

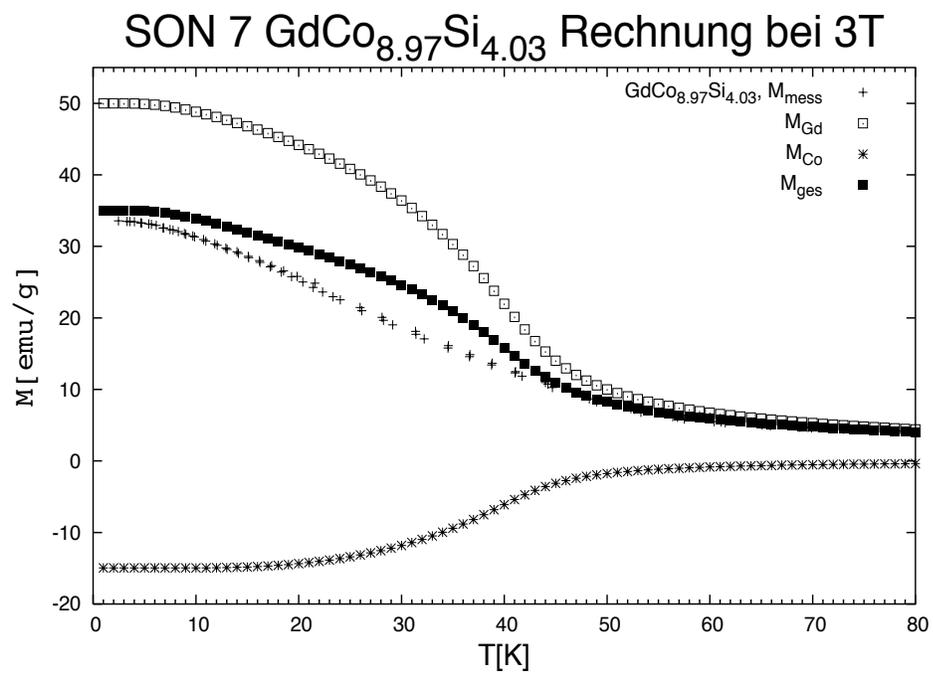

Appendix B

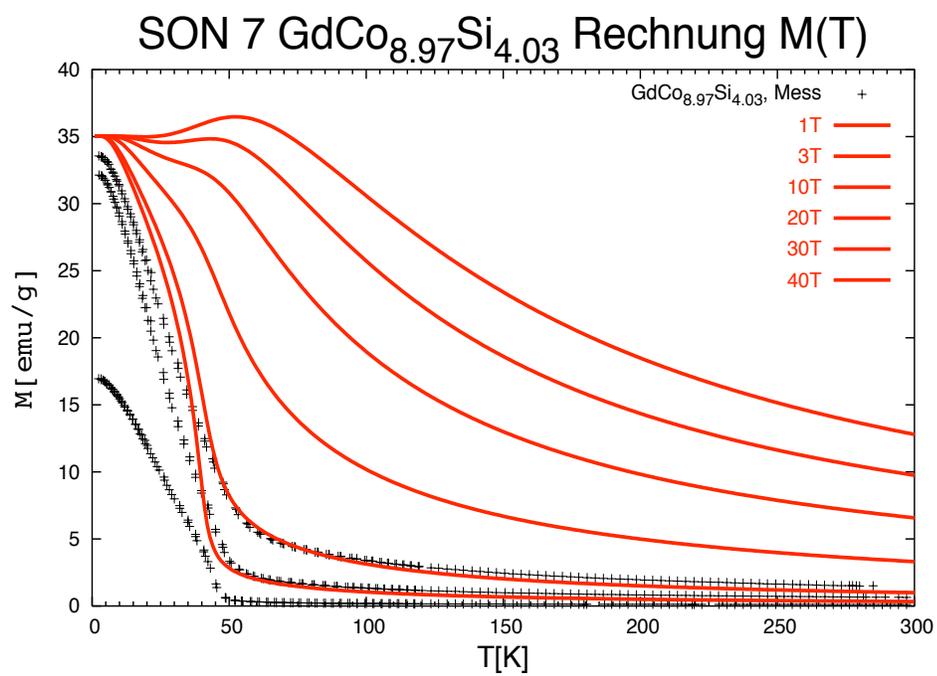
Zusätzliche Rechnungen

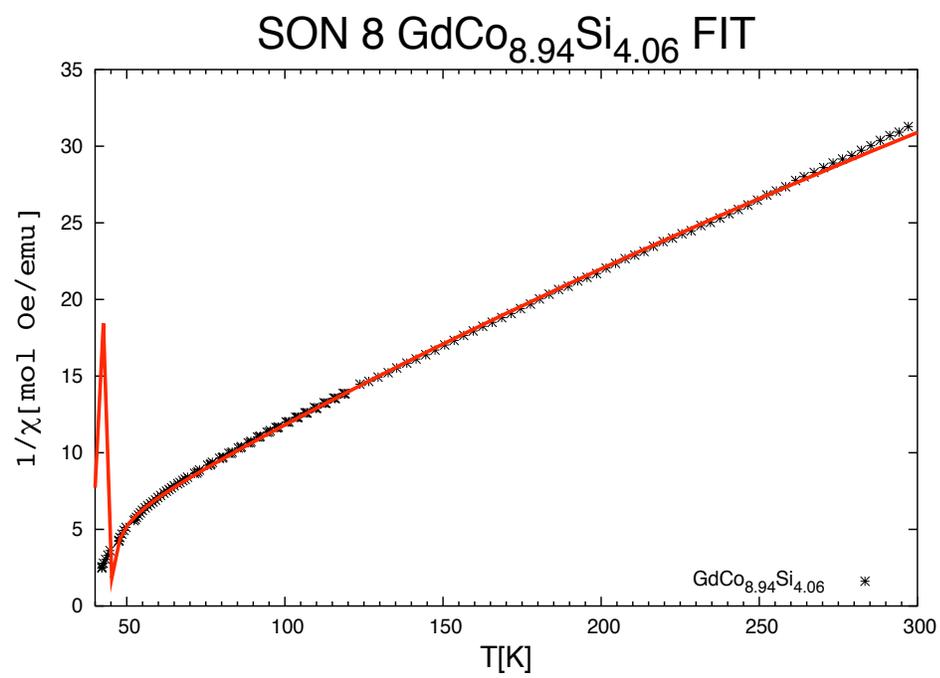
Im Anhang sind die Plots von allen Messungen und Rechnungen, die durchgeführt wurden.

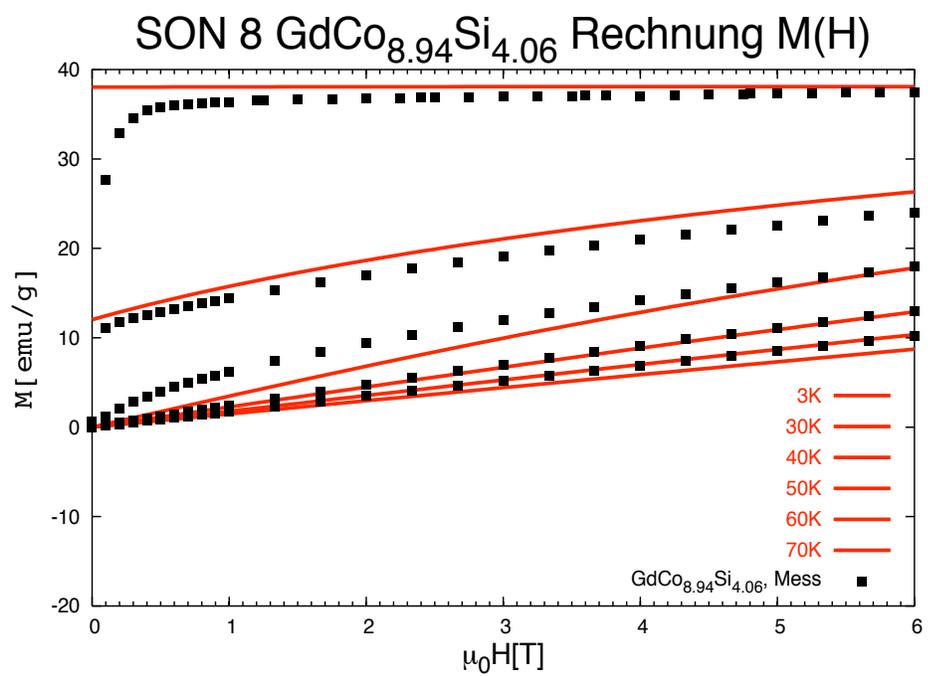


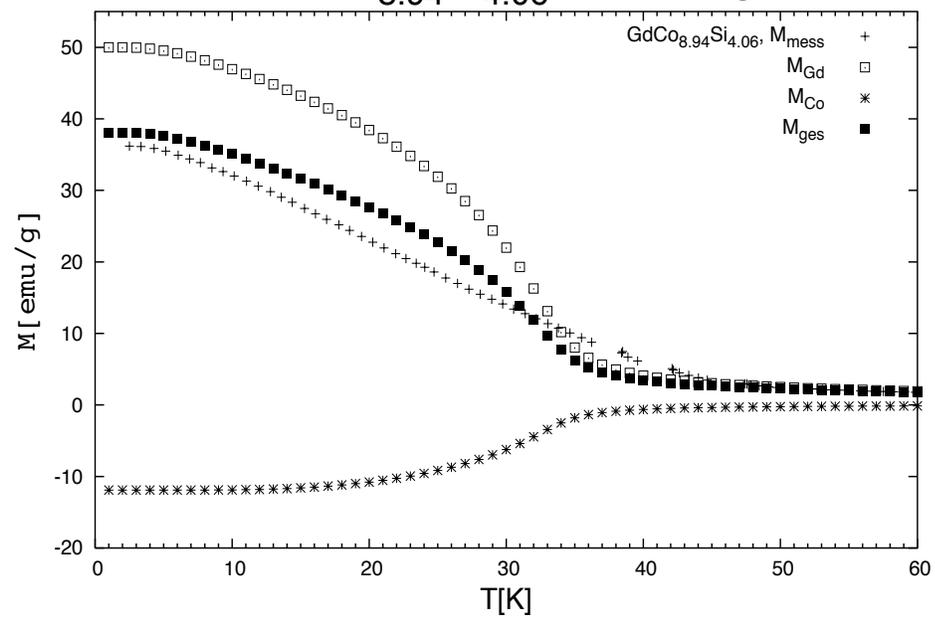


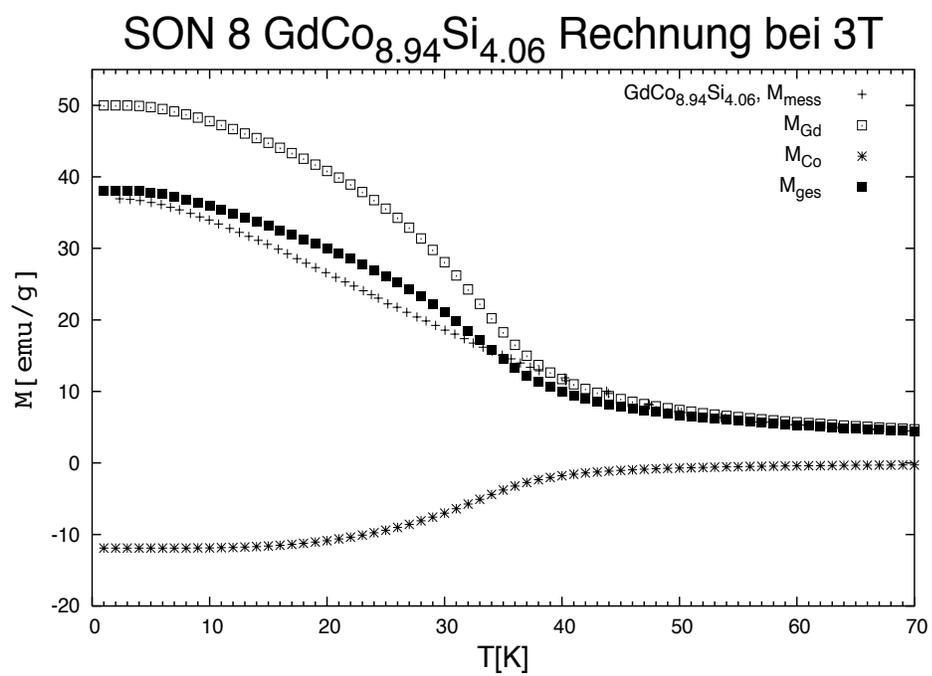


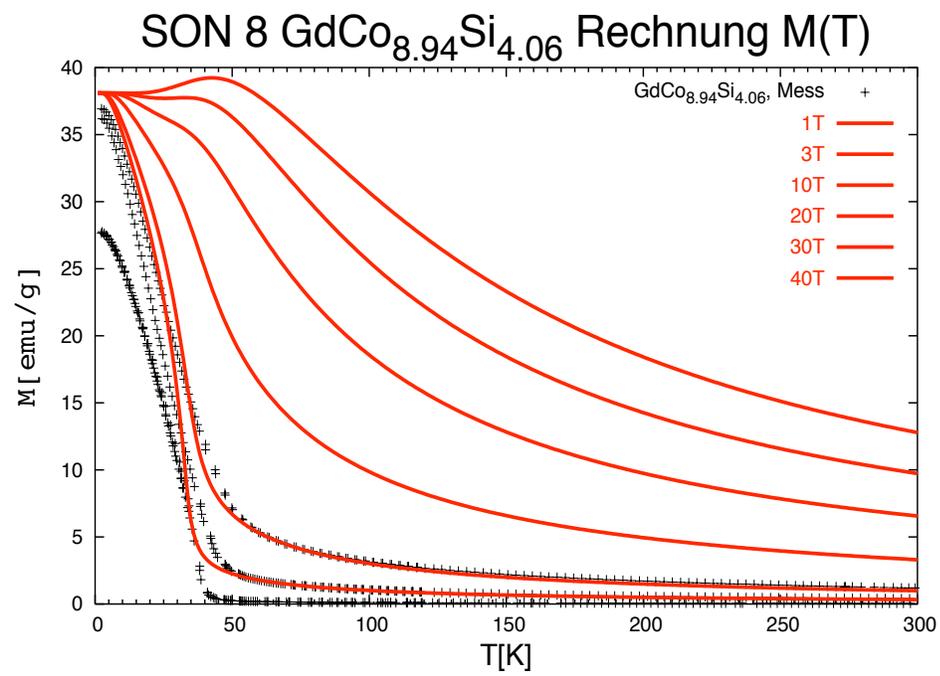


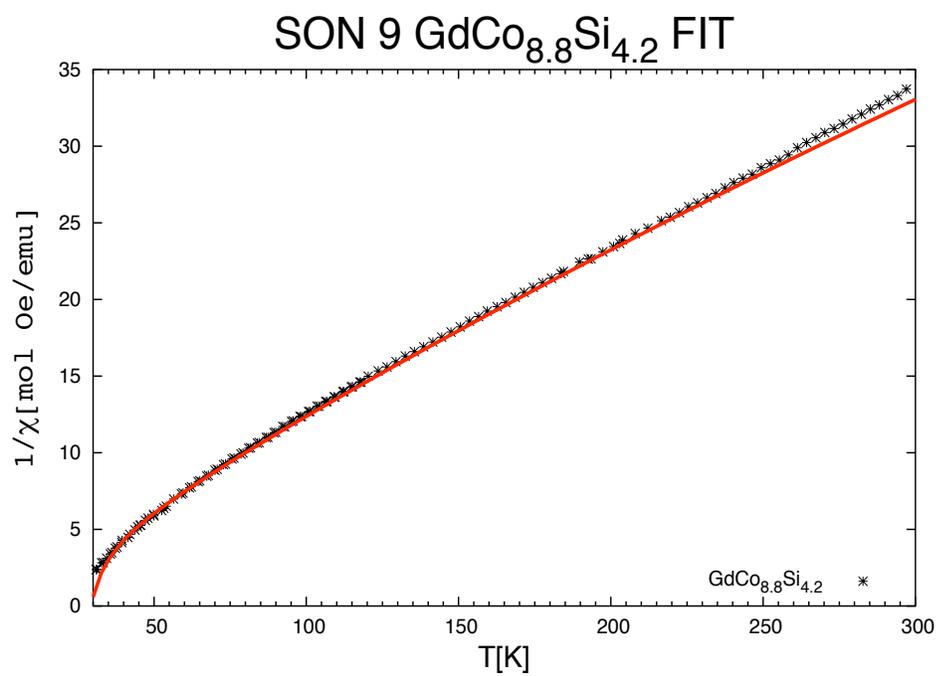


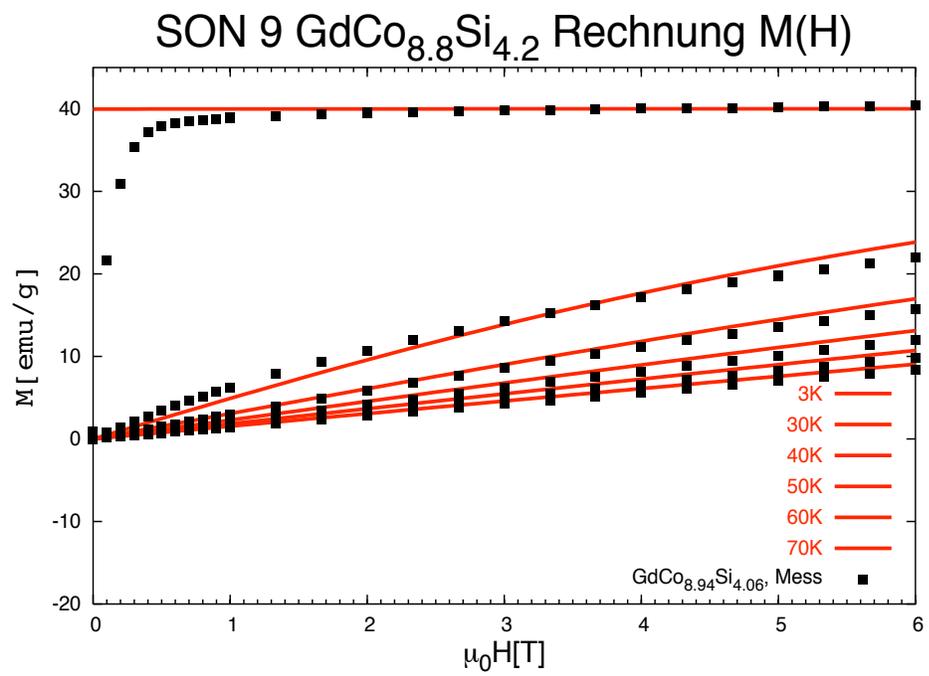


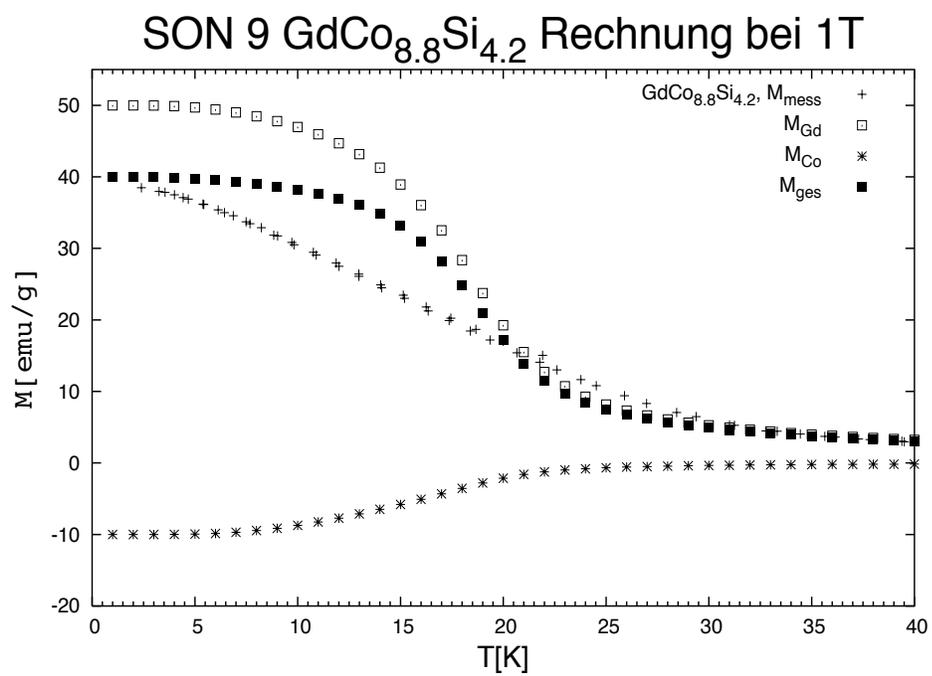
SON 8 $\text{GdCo}_{8.94}\text{Si}_{4.06}$ Rechnung bei 1T

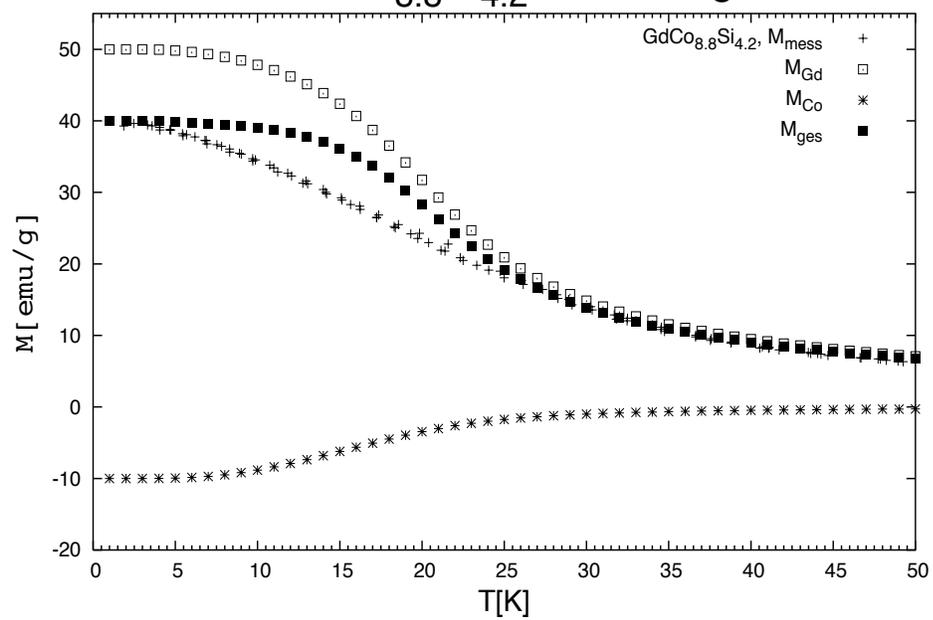


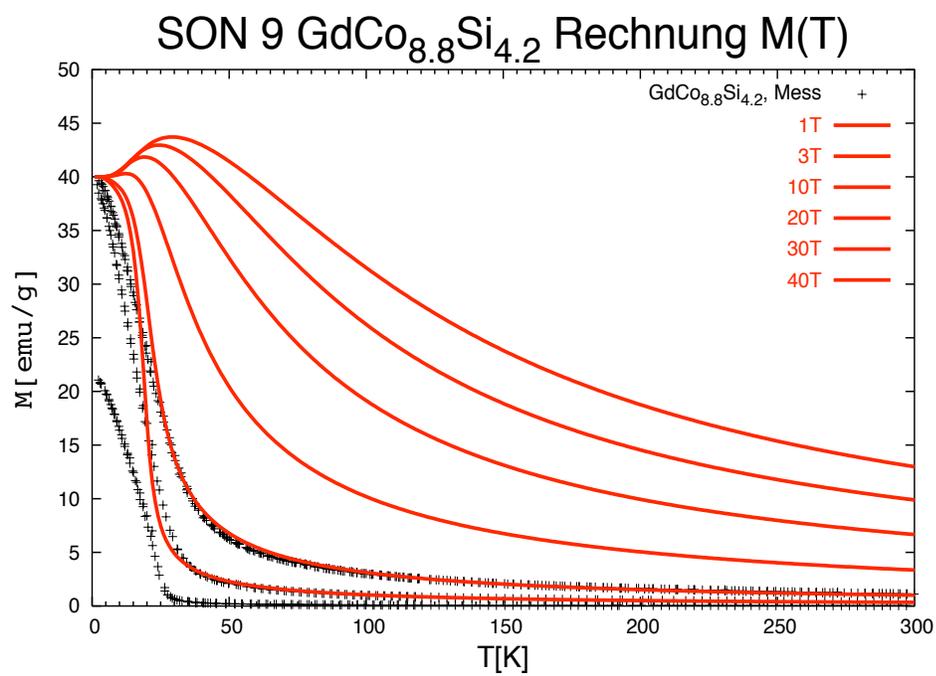


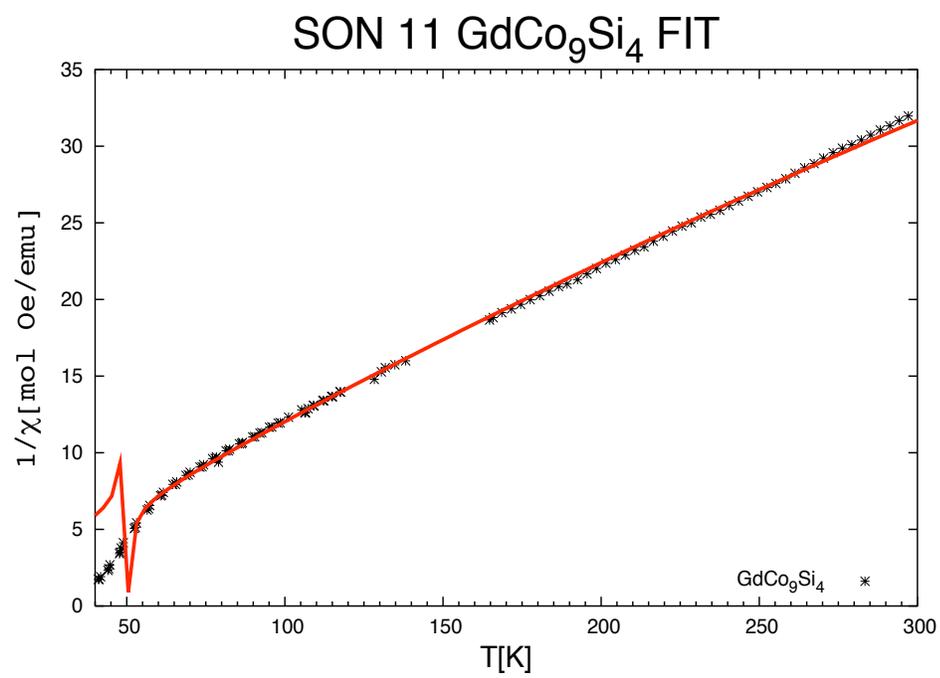


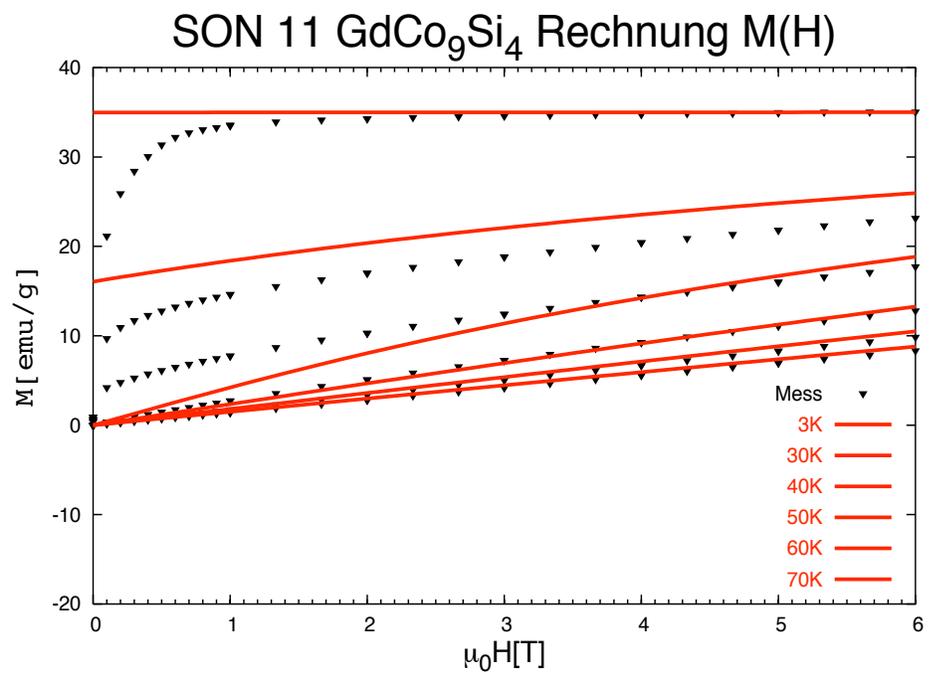




SON 9 $\text{GdCo}_{8.8}\text{Si}_{4.2}$ Rechnung bei 3T







SON 11 GdCo_9Si_4 Rechnung bei 1T