Methoden moderner Röntgenphysik: Streuung und Abbildung

G. Grübel, O. Seeck, A. Kobs, V. Markmann, F. Lehmkühler, S. Marotzke

RÖNTGENDICHROISMUS (XMCD) VON KOBALT

1. Berechnen Sie die Übergangsmatrixelemente (Dipolnäherung: $\Delta m_l = \pm 1$) für links und rechts zirkular polarisiertes Licht für die Übergänge $2p_{1/2} \rightarrow 3d$ (L_2-Kante) und $2p_{3/2} \rightarrow 3d$ (L_3-Kante) für die beiden Fälle, dass der Ferromagnet vollständig parallel bzw. antiparallel zur Helizität des Lichts magnetisiert ist.
   Für die d-Zustände können die atomaren Eigenzustände verwendet werden. Um die Spin-Bahn-aufgespaltenen p-Zustände in der atomaren Basis zu beschreiben, nutzen Sie dabei die in der Vorlesung angegebenen Beziehungen zwischen den Basissystemen $|l, s, j, m_j\rangle$ und $|l, m_l, s, m_s\rangle$ aus (Glebsch-Gordon Koeffizienten, siehe Tabelle unten links). Zur Berechnung der Übergangsmatrixelemente nutzen Sie bitte unten angegebene Tabelle 9.1.
2. Berechnen Sie das Verhältnis der Absorption an der L_3- und der L_2-Kante aus, für den Fall, dass der Ferromagnet vollständig parallel zur Helizität des Lichts magnetisiert ist. Nehmen Sie zudem an, dass nur Minoritätselektronen angeregt werden können, wie es für die „starken" Ferromagneten wie Ni oder Co der Fall ist, da dort das $3d$-Majoritätsband vollständig gefüllt ist.
3. Berechnen Sie für den Fall eines starken Ferromagneten das relative Verhältnis der Stärke des XMCD-Effekts an der L_3-Kante und der L_2-Kante.

Koordinaten-Transformation

$$|l, s, j, m_j\rangle = \sum_{m_l, m_s} C_{m_l, m_s; j, m_j} \, |l, s, m_l, m_s\rangle$$

$\|l,s,j,m_j\rangle$ basis		$\|l,m_l,s,m_s\rangle$ basis
j	m_j	$Y_{l,m_l}\chi^{\pm}$
$\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(-Y_{1,0}\,\alpha + \sqrt{2}\,Y_{1,+1}\,\beta)$
	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(-\sqrt{2}\,Y_{1,-1}\,\alpha + Y_{1,0}\,\beta)$
$\frac{3}{2}$	$+\frac{3}{2}$	$Y_{1,+1}\,\alpha$
	$+\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(\sqrt{2}\,Y_{1,0}\,\alpha + Y_{1,+1}\,\beta)$
	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(Y_{1,-1}\,\alpha + \sqrt{2}\,Y_{1,0}\,\beta)$
	$-\frac{3}{2}$	$Y_{1,-1}\,\beta$

Übergangsmatrixelemente

Table 9.1. Nonvanishing angular momentum dipole matrix elements $\langle L, M|C_q^{(1)}|l, m\rangle$. The matrix elements are real, so that $\langle L, M|C_q^{(1)}|l, m\rangle^* = \langle L, M|C_q^{(1)}|l, m\rangle = (-1)^q \langle l, m|C_{-q}^{(1)}|L, M\rangle$. Nonlisted matrix elements are zero.[a]

$$\langle l+1, m|\, C_0^{(1)}\, |l, m\rangle = \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+3)(2l+1)}}$$

$$\langle l-1, m|\, C_0^{(1)}\, |l, m\rangle = \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l-1)(2l+1)}}$$

$$\langle l+1, m+1|\, C_1^{(1)}\, |l, m\rangle = \sqrt{\frac{(l+m+2)(l+m+1)}{2(2l+3)(2l+1)}}$$

$$\langle l-1, m+1|\, C_1^{(1)}\, |l, m\rangle = -\sqrt{\frac{(l-m)(l-m-1)}{2(2l-1)(2l+1)}}$$

$$\langle l+1, m-1|\, C_{-1}^{(1)}\, |l, m\rangle = \sqrt{\frac{(l-m+2)(l-m+1)}{2(2l+3)(2l+1)}}$$

$$\langle l-1, m-1|\, C_{-1}^{(1)}\, |l, m\rangle = -\sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{2(2l-1)(2l+1)}}$$

Quelle: „Magnetism – From Fundamentals to Nanoscale Applications", J. Stöhr and H.C. Siegmann

Methoden moderner Röntgenphysik: Streuung und Abbildung

G. Grübel, O. Seeck, A. Kobs, V. Markmann, F. Lehmkühler, S. Marotzke

X-RAY DICHROISM (XMCD) OF COBALT

1. Calculate the transition matrix elements of the transitions $2p_{1/2} \rightarrow 3d$ (L_2-edge) and $2p_{3/2} \rightarrow 3d$ (L_3-edge) in the dipole approximation ($\Delta m_l = \pm 1$) with left- and right-circularly polarized light for the following two cases: The ferromagnet is magnetized entirely parallel or antiparallel to the helicity of the light.
   The atomic eigenstates can be used for the d-states. In order to describe the spin-orbit split p-states in the atomic basis, exploit the relations for the change of basis from $|l, s, j, m_j\rangle$ to $|l, m_l, s, m_s\rangle$ as given in the lecture (Glebsch-Gordon coefficients, see table below). To calculate the transition matrix elements, all nonvanishing elements are given in Table 9.1
2. Calculate the ratio of absorption at the L_3- and the L_2-edge for the case that the ferromagnet is magnetized fully parallel to the helicity of the light. Assume that only the minority electrons can be excited, as is the case for 'strong' ferromagnets such as Ni or Co due to the fully occupied $3d$-majority band.
3. Compute the relative ratio of the strength of the XMCD effects at the L_3-edge and the L_2-edge for the case of a strong ferromagnet.

Transformation of basis

$$|l, s, j, m_j\rangle = \sum_{m_l, m_s} C_{m_l, m_s; j, m_j} |l, s, m_l, m_s\rangle$$

$\lvert l, s, j, m_j\rangle$ basis		$\lvert l, m_l, s, m_s\rangle$ basis
j	m_j	$Y_{l,m_l}\chi^{\pm}$
$\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(-Y_{1,0}\,\alpha + \sqrt{2}\,Y_{1,+1}\,\beta)$
	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(-\sqrt{2}\,Y_{1,-1}\,\alpha + Y_{1,0}\,\beta)$
$\frac{3}{2}$	$+\frac{3}{2}$	$Y_{1,+1}\,\alpha$
	$+\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(\sqrt{2}\,Y_{1,0}\,\alpha + Y_{1,+1}\,\beta)$
	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(Y_{1,-1}\,\alpha + \sqrt{2}\,Y_{1,0}\,\beta)$
	$-\frac{3}{2}$	$Y_{1,-1}\,\beta$

Transition matrix elements

Table 9.1. Nonvanishing angular momentum dipole matrix elements $\langle L, M | C_q^{(1)} | l, m\rangle$. The matrix elements are real, so that $\langle L, M | C_q^{(1)} | l, m\rangle^* = \langle L, M | C_q^{(1)} | l, m\rangle = (-1)^q \langle l, m | C_{-q}^{(1)} | L, M\rangle$. Nonlisted matrix elements are zero.[a]

$$\langle l+1, m | C_0^{(1)} | l, m\rangle = \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+3)(2l+1)}}$$
$$\langle l-1, m | C_0^{(1)} | l, m\rangle = \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l-1)(2l+1)}}$$
$$\langle l+1, m+1 | C_1^{(1)} | l, m\rangle = \sqrt{\frac{(l+m+2)(l+m+1)}{2(2l+3)(2l+1)}}$$
$$\langle l-1, m+1 | C_1^{(1)} | l, m\rangle = -\sqrt{\frac{(l-m)(l-m-1)}{2(2l-1)(2l+1)}}$$
$$\langle l+1, m-1 | C_{-1}^{(1)} | l, m\rangle = \sqrt{\frac{(l-m+2)(l-m+1)}{2(2l+3)(2l+1)}}$$
$$\langle l-1, m-1 | C_{-1}^{(1)} | l, m\rangle = -\sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{2(2l-1)(2l+1)}}$$

4.

Source: „Magnetism – From Fundamentals to Nanoscale Applications", J. Stöhr and H.C. Siegmann