

Theoretische Physik und Molekularer Magnetismus

Jürgen Schnack
Fachbereich Physik - Universität Osnabrück

Osnabrück 02/27/2002

Gruppen

Theoretische Physik

- Theoretische Festkörperphysik (Borstel, Eglitis)
- Theoretische Optik (Hertel, Ringhofer, Schürmann)
- Makroskopische Systeme und Quantentheorie (Bärwinkel, Schmidt, Schnack)
- Magnetismus (Blügel)
- Wellenphänomene im angewandten Elektromagnetismus, Emmy-Noether-Nachwuchsgruppe (Shamonina, ab 2003, derzeit Oxford)

Molekularer Magnetismus

- Dichtefunktionaltheorie (Blügel)
- Effektive Modelle (Bärwinkel, Schmidt, Schnack)
- Photoelektronenspektroskopie (Neumann)
- Magnetische Moleküle auf Oberflächen, AFM (Schleberger)

Kohärente Materialforschung

Promotionsprogramm

- *Synthesis and Characterisation of Surfaces and Interfaces assembled from Clusters and Molecules*
- interdisziplinär mit Biologie und Chemie
- 10 Lichtenberg-Doktorandenstipendien + Sachmittel
- etwa 225.000,- Euro/Jahr

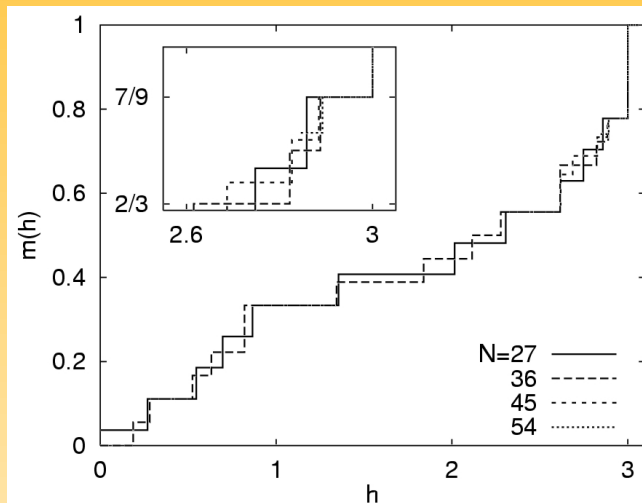
DFG-SPP 1137

- *Molecular Magnetism*
- Osnabrück trägt mit 3 von etwa 30 geförderten Projekten bei
- First-Principles Density-Functional Calculations (Blügel, Schnack)
- Molecule-based magnetic solids by X-ray spectroscopy (Neumann)
- Magnetic molecules on surfaces (Schleberger)

Herausragende Forschungsergebnisse

- Magnetisierungssprünge (und Plateaus) als makroskopische Quanteneffekte
- Praktische Theorie gigantischer magnetischer Moleküle
- *Ab-initio*-Modellierung von Oberflächenstrukturen für SrTiO₃ Perovskit-Kristalle
- Metamaterialien für Mikrowellenoptik

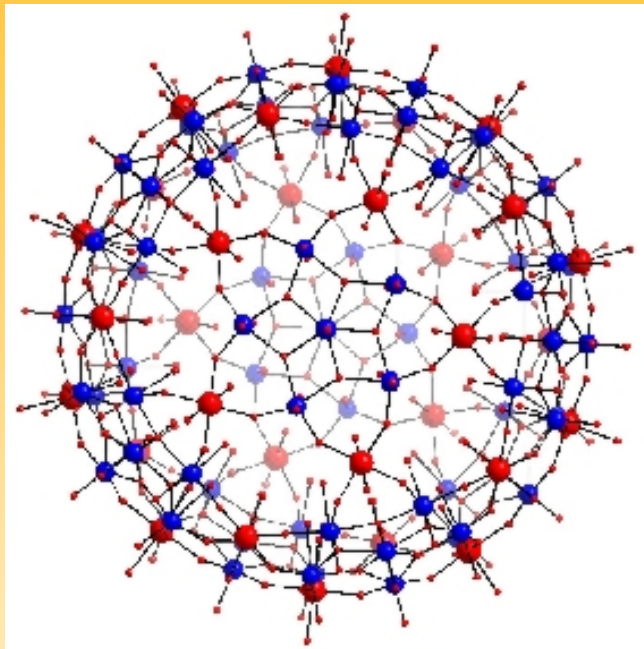
Makroskopische Magnetisierungssprünge



- Ein- und zweidimensionale magnetische Strukturen zeigen ungewöhnliche Sprünge zur Sättigungsmagnetisierung;
- Beispiel **kagomé-Gitter**: Magnetisierungssprung ist makroskopischer Quanteneffekt;
- Erklärungs des Effekts im Bild lokalisierter unabhängiger Magnonen;
- mathematischer Beweis zur n -Magnonen-Grundzustandsenergie;
- Vorhersage solcher Sprünge für andere Spintopologien.

J. Schnack *et al.*, *Independent magnon states on magnetic polytopes*, Eur. Phys. J. B **24** (2001) 475;
 J. Schulenburg *et al.*, *Macroscopic magnetization jumps due to independent magnons in frustrated quantum spin lattices*, Phys. Rev. Lett., submitted

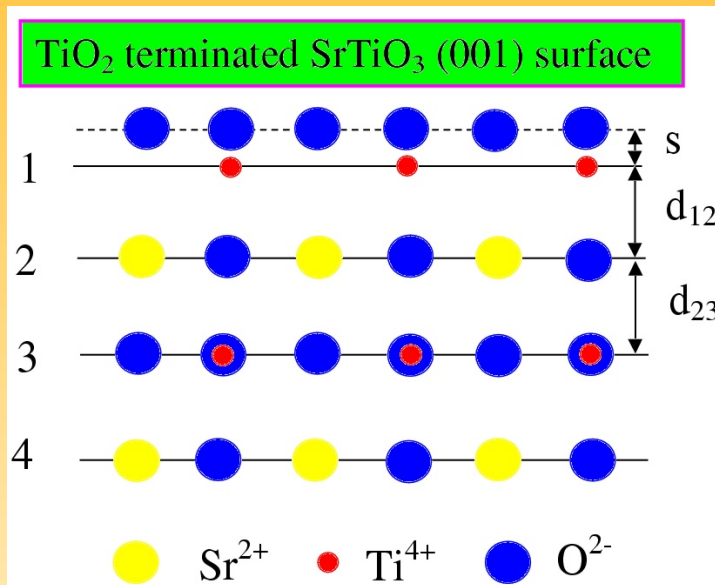
Praktische Theorie gigantischer magnetischer Moleküle



- Magnetische Moleküle - neue, hochinteressante Stoffklasse;
- Beschreibung im Heisenberg-Modell;
- Problem hohe Dimension:
 $\{\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}\} \Rightarrow (2s + 1)^N \approx 10^{23}$;
- Entwicklung und erfolgreiche Anwendung eines Näherungshamiltonoperators, der auf Rotationsbändern beruht;
- Näherung ist inzwischen Standard bei der Beschreibung des Tieftemperaturverhaltens.

J. Schnack *et al.*, *Quantum rotational band model for the Heisenberg molecular magnet $\{\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}\}$* , Europhys. Lett. **56** (2001) 863

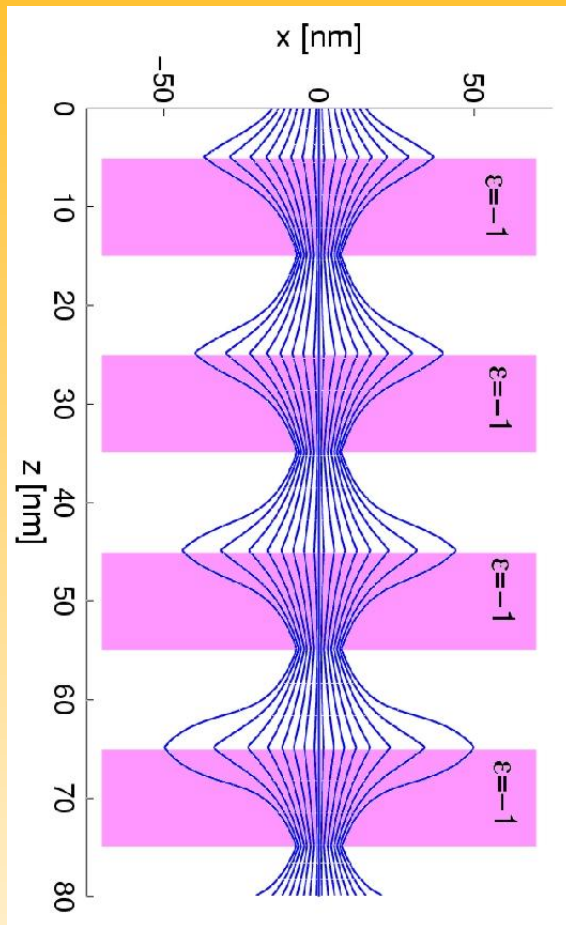
Oberflächenstrukturen von Perovskit-Kristallen



- Problem: Bindungs- und Ladungsstruktur an der Oberfläche, Rolle von Oberflächendefekten, Absorption und Diffusion von Atomen und Molekülen;
- vier verschiedene Elektronendiffraktionsexperimente mit teilweise sich widersprechenden Ergebnissen bzgl. der Oberflächenstruktur;
- *ab-initio*-Rechnung ergibt, dass die Kovalenz der Ti-O Bindung an der Oberfläche erhöht ist;
- zusätzlich signifikante Unterschiede für TiO₂ und SrO Terminierung ⇒ Erklärung für unterschiedliche Experimente;

E. Heifets *et al.*, *Ab initio modeling of surface structure for SrTiO₃ perovskite crystals*, Phys. Rev. B **64** (2001) 235417

Metamaterialien für Mikrowellenoptik



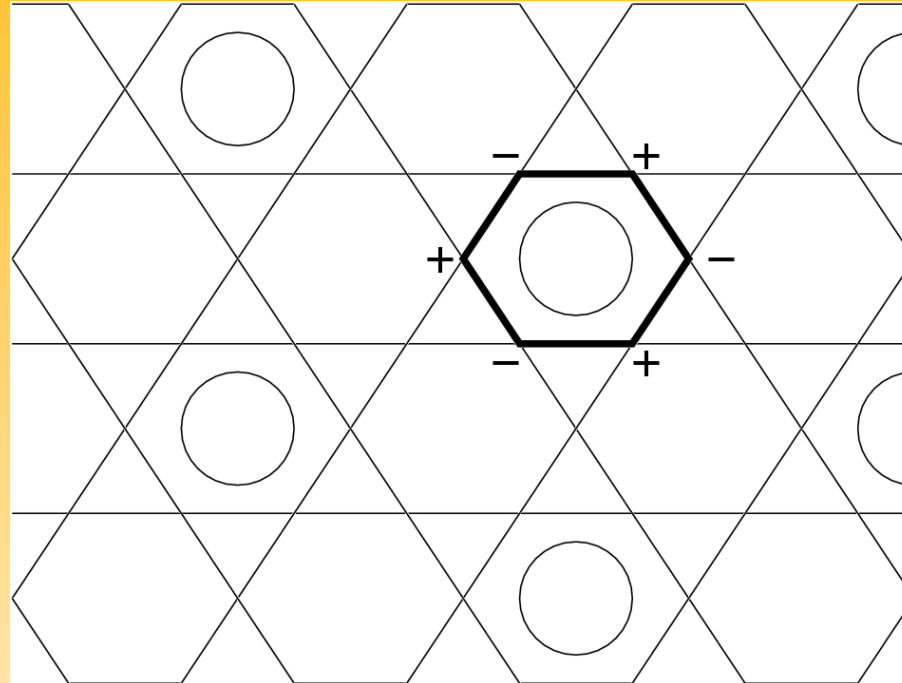
- neue synthetische Materialklasse aus geordneten Einheitskomponenten, z.B. Kupfer-Ringe, -Drähte, -Zylinder oder -**Spiralen**; Größe: nm für optische, μm für Mikrowellenanwendungen;
- hervorragende elektromagnetische Eigenschaften, die in „natürlichen“ Materialien nicht auftreten;
- „linkshändige“ Materialien mit $\varepsilon < 0$ und $\mu < 0$;
- perfekte Linse - Abbildung von Objekten viel kleiner als Wellenlänge; Nanolithographie;
- künstlicher Magnetismus, idealer Diamagnet ($\mu = 0$), magnetoinduktiver Wellenleiter für Kernspintomographie.

E. Shamonina et al., *Imaging, compression and Poynting vector streamlines for negative permittivity materials*, Electronics Letters 37 (2001) 1243

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit.

Jürgen Schnack

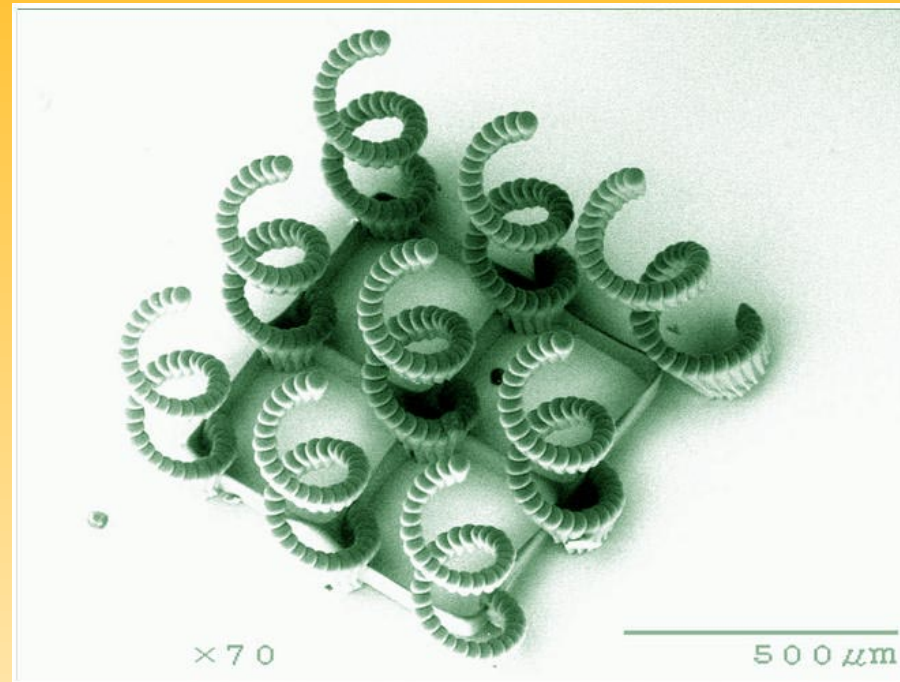
kagomé-Gitter



J. Schulenburg *et al.*, *Macroscopic magnetization jumps due to independent magnons in frustrated quantum spin lattices*, Phys. Rev. Lett., submitted



Kupferspiralen



Professor Xiang Zhang, University of California Los Angeles , USA,
<http://microlab.seas.ucla.edu>

