

Zur Spinpräzession in einer schwingenden Bloch-Wand bei kleinen Amplituden

Von ILSE LUCAS *

Aus dem Zentrallaboratorium der Firma Siemens & Halske AG

(Z. Naturforsch. 9a, 373—376 [1954]; eingegangen am 8. März 1954)

Die Eigenfrequenz einer schwingenden Bloch-Wand wird aus einem Wandmodell hergeleitet, bei dem die Wandbindungskräfte in Form eines äquivalenten inneren Magnetfeldes berücksichtigt sind. Aus den Gleichungen für die Spinpräzession in diesem äquivalenten Magnetfeld ergibt sich eine Formel für die Eigenfrequenz einer 180°-Wand. Die Formel ist bis auf den Faktor $\sqrt{2}$ identisch mit der Formel, die sich mit dem Begriff der Wandmasse von Döring für die Eigenfrequenz einer 90°-Wand ergibt.

Döring¹ und Becker² betrachteten die Spinpräzession in einer gleichmäßig sich bewegenden Bloch-Wand und zeigten, daß bei der Bewegung der Wand ein magnetisches Polarisationsfeld in der Wand entsteht, in dem die Elektronenspins bei den einzelnen Atomen präzedieren, während die Wand über sie hinweg läuft. Die Feldenergie dieses Polarisationsfeldes ergibt einen quadratisch mit der Geschwindigkeit anwachsenden Zusatzterm im Ausdruck für die Gesamtenergie der Wand. Diesen Zusatzterm setzte Döring einer scheinbaren kinetischen Energie gleich und bestimmte daraus eine träge Masse der Wand je Flächeneinheit.

Die periodische Bewegung der Wand unter dem Einfluß eines magnetischen Wechselfeldes wurde von Döring als Schwingung dieser Wandmasse in einem parabolischen Potential behandelt, dessen Steilheit durch den Betrag der reversiblen Permeabilität gegeben ist. Aus der Rechnung ergibt sich eine Eigenfrequenz, oberhalb derer die Wand nicht mehr mitschwingt.

Rado³ erweiterte den Ansatz von Döring¹ und Becker² für die Spinpräzession in einer gleichmäßig sich bewegenden Bloch-Wand auf periodische Wandbewegungen, indem er zu den von Becker und Döring berücksichtigten Kräften der Anisotropieenergie, der Austauschenergie und des inneren entmagnetisierenden Feldes die von einem periodischen äußeren Magnetfeld ausgeübten Kräfte hinzufügte. Ebenso wie bei Döring und Becker sind bei ihm im Ansatz für die Spinpräzession keine Rückstellkräfte enthalten. Aus seinen periodischen Bewegungsgleichungen bestimmte er den periodischen Anteil des Energieinhaltes der Wand und erhielt eine scheinbare träge Masse, die mit der von Döring

bestimmten übereinstimmt. Durch die Periodizität der Bewegung treten bei Rado geringe Abweichungen der Wandform verglichen mit derjenigen bei gleichmäßiger Bewegung auf.

Die Spinpräzession in einer schwingenden Bloch-Wand bei kleinen Amplituden steht unter dem Einfluß der Wandbindungskräfte und unterscheidet sich daher von der Spinpräzession in einer gleichmäßig bewegten Bloch-Wand. Im allgemeinen ist im Gebiet reversibler Magnetisierung die Schwingungsamplitude klein verglichen mit der Wanddicke. Z. B. gilt bei Eisen für die mittlere Wandverschiebung Δx in einem statischen Magnetfeld $h = 10^{-3}$ Oe:

$$\Delta x = \frac{l \kappa_0 h}{I} \approx 10^{-8} \text{ cm} \quad (1)$$

mit: Sättigungsmagnetisierung $I = 1700$ G, statische Suszeptibilität $\kappa_0 = 80$, mittlere Bezirksdicke $l = 2 \cdot 10^{-4}$ cm.

Die Wandverschiebung Δx ist also klein im Vergleich zur Wanddicke die rd. $4 \cdot 10^{-6}$ cm beträgt. Während einer Periode der Wandschwingung mit der Amplitude Δx läuft der einzelne Spin in der Wand einmal auf einem Kegel um, dessen Öffnungswinkel klein gegen 90° ist. Die an einem Spin angreifenden Wandbindungskräfte sind groß verglichen mit den vom äußeren Magnetfeld ausgeübten Kräften.

Das von Döring eingeführte parabolische Potential kann man sich durch eine Summation über alle an den einzelnen Spins angreifenden Kräfte entstanden denken. Diese Kräfte sollen hier für ein spezielles Modell in dem Ansatz für die Spinpräzession in der Wand berücksichtigt werden. Die Verteilung der rücktreibenden Kräfte auf die einzelnen

* München, Ettalstraße 4.

¹ W. Döring, Z. Naturforsch. 3a, 373 [1948].

² R. Becker, J. Phys. Radium 12, 332 [1951].

³ G. T. Rado, Phys. Rev. 83, 821 [1951].



Spins in der Wand wird so gewählt, daß die Gleichungen für die Spinpräzession möglichst einfach werden. Im Ergebnis gewinnt man eine sehr einfache Ableitung für die Eigenfrequenz einer Bloch-Wand und eine anschauliche Vorstellung von der Spinpräzession in einer schwingenden Wand.

Berechnung der Spinpräzession in der Wand

Der Betrachtung liegt eine 180° -Wand zugrunde. Die Wandnormale soll mit x bezeichnet werden. Zu beiden Seiten der Wand liegen die Spins in $+z$ und $-z$ Richtung. In der Wand liegen die Spins in der y, z -Ebene, da eine x -Komponente wegen der damit verbundenen hohen inneren Entmagnetisierungsenergie nicht auftreten kann. φ sei der Drehwinkel der Spinrichtung um die x -Achse, der von der positiven z -Achse aus gerechnet sein möge. Für das kräftefreie Gleichgewicht der Wand bei einachsiger Symmetrie der Anisotropieenergie gilt nach Becker und Döring⁴:

$$\varphi = 2 \operatorname{arc} \operatorname{tg} e^{2(x-x_0)/\delta}. \quad (2)$$

Darin ist x_0 die Lage der Wandmitte.

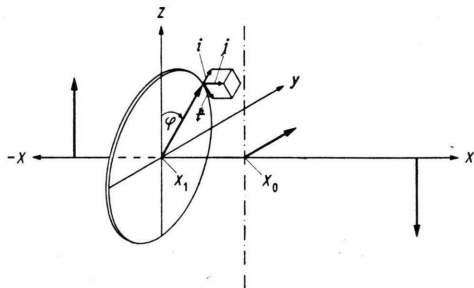


Abb. 1. Lage der Vektoren i, j, f ; i Richtung der Ruhelage eines Spins bei $x = x_1$, j Richtung der Wandnormalen, f Drehrichtung eines Spins beim Übergang in die Richtung der Ruhelage des benachbarten Spins, x Wandnormale, x_0 Wandmitte, y Gleichgewichtslage der Spins in Wandmitte, $+z, -z$ Spinrichtungen auf beiden Seiten der Wand.

Die Bindungskräfte der Wand sollen in Form eines äquivalenten inneren Magnetfeldes \mathfrak{H}_i eingeführt werden. Für die Rechnung ist es am zweckmäßigsten, eine Feldverteilung einzuführen, bei der erstens das durch Gl. (2) ausgedrückte Gleichgewicht der kräftefreien Wand erhalten bleibt, und zweitens ein statisches Magnetfeld die Wand so verschiebt, daß ihre Form bei der Verschiebung erhal-

ten bleibt. Die erste Forderung wird dadurch erfüllt, daß man die Feldrichtung überall mit der Ruhelage der Spins zusammenfallen läßt.

Durch die zweite Forderung wird der Betrag des Feldes festgelegt. Ein äußeres Magnetfeld h in z -Richtung übt auf den einzelnen Spin in der Wand ein Drehmoment $\mu_B h \sin \varphi$ um die x -Achse aus. ($\mu_B =$ Bohrsches Magneton) Bei einer Drehung des Spins um den Betrag $\Delta \varphi$ gegen das innere Feld übt dieses ein rücktreibendes Drehmoment $-H_i/\mu_B \Delta \varphi$ aus. ($H_i =$ Betrag des äquivalenten inneren Magnetfeldes.) Verlangt man, daß die Wandform bei der Verschiebung der Wand erhalten bleibt, so kann man die Variable $\Delta \varphi$ durch die konstante Parallelverschiebung Δx ausdrücken. Die Differentiation von Gl. (2) ergibt:

$$\Delta \varphi = 2 \frac{\Delta x}{\delta} \sin \varphi. \quad (3)$$

Aus dem Gleichsetzen des äußeren Drehmomentes mit dem rücktreibenden Drehmoment erhält man unter Benutzung von Gl. (3):

$$H_i = \frac{h}{\Delta x} \frac{\delta}{2}. \quad (4)$$

Der Quotient $h/\Delta x$ läßt sich durch die statische Suszeptibilität χ_0 ausdrücken. Nimmt man an, daß alle Bezirke die gleiche Dicke l haben und durch 180° -Wände voneinander getrennt sind, so wird

$$2 I \frac{\Delta x}{l} = \chi_0 h. \quad (5)$$

Die Gleichung wird nach $h/\Delta x$ aufgelöst und in Gl. (4) eingesetzt. Man erhält für den Betrag des äquivalenten inneren Magnetfeldes:

$$H_i = \frac{I}{\chi_0} \frac{\delta}{l}. \quad (6)$$

Ein periodisches äußeres Magnetfeld ruft eine Präzession der Spins um ihre Gleichgewichtslagen hervor. Vernachlässigt man die Kräfte, die bei Abweichungen des Wandgleichgewichts von seiner statischen Form auftreten können, so präzedieren die Elektronenspins im inneren Feld nach denselben Gesetzen wie beim Einkristall im Fremdfeld. Beachtet man die bei Ablenkungen senkrecht zur Wandebene auftretende Entmagnetisierung, so erhält man für die Eigenfrequenz nach Kittel⁵

$$\omega_0 = \gamma \sqrt{H_i (H_i + 4 \pi I)} \quad (7)$$

mit $\gamma = e/mc = 1,76 \cdot 10^7 \text{ G}^{-1}\text{s}^{-1}$ (c Lichtgeschwindigkeit, e Ladung, m Masse des Elektrons).

⁴ R. Becker u. W. Döring, Ferromagnetismus, Verlag Springer Berlin 1939.

⁵ Ch. Kittel, Phys. Rev. **73**, 155 [1948].

Diese Formel soll für das vorliegende Problem kurz hergeleitet werden. Die Spinpräzession läßt sich durch die Vektorgleichung beschreiben*:

$$\dot{\mathfrak{s}} = \gamma [\mathfrak{s} \mathfrak{S}]; \quad (8)$$

\mathfrak{s} ist der Einheitsvektor in Spinrichtung und \mathfrak{S} die Summe aus äußeren und inneren Magnetfeldern.

Zur Lösung der Gl. (8) wird das in Abb. 1 dargestellte, räumlich variable Koordinatensystem i, j, k benutzt. i ist der Einheitsvektor in der jeweiligen Richtung des inneren Magnetfeldes, j der Einheitsvektor parallel zur Wandnormalen und k der Einheitsvektor in Richtung φ .

Der Einheitsvektor \mathfrak{s} in Spinrichtung sei um kleine Winkelbeträge $\Delta\theta, \Delta\varphi$ aus einer Ruhelage herausgedreht:

$$\mathfrak{s} = i + \Delta\theta j + \Delta\varphi k. \quad (9)$$

Für das resultierende Magnetfeld gilt:

$$\mathfrak{S} = H_i i - 4\pi I \Delta\theta j - h e^{i\omega t} \sin \varphi k. \quad (10)$$

Dabei ist h die Amplitude des äußeren Magnetfeldes, das parallel z angenommen ist. Das Produkt ($-4\pi I \Delta\theta$) stellt das entmagnetisierende Feld dar. Die Komponente des äußeren Magnetfeldes in Richtung i wurde neben dem inneren Feld vernachlässigt.

Die Komponentendarstellung der Gl. (8) lautet für die linearen Störglieder:

$$\begin{aligned} \Delta\dot{\theta} &= \gamma (H_i \Delta\varphi + h \sin \varphi e^{i\omega t}), \\ \Delta\dot{\varphi} &= -\gamma (H_i + 4\pi I) \Delta\theta. \end{aligned} \quad (11)$$

Die mit $e^{i\omega t}$ periodische Lösung dieses Gleichungssystems ergibt für $\Delta\theta$ und $\Delta\varphi$:

$$\begin{aligned} \Delta\varphi &= -\frac{\gamma^2 (H_i + 4\pi I)}{\omega_0^2 - \omega^2} h \sin \varphi e^{i\omega t}, \\ \Delta\theta &= -\frac{i\omega}{\gamma (H_i + 4\pi I)} \Delta\varphi, \end{aligned} \quad (12)$$

wobei ω_0 aus Gl. (7) einzusetzen ist.

Gl. (12) ergibt bei Vernachlässigung von $\Delta\theta$ eine Verschiebung der ganzen Wand unter Beibehaltung ihrer Form für alle Frequenzen. Die Ablenkungen $\Delta\theta$ bedeuten eine mit der Frequenz anwachsende Auslenkung der Spins aus der Wandebene, die bei der Resonanzfrequenz im Verhältnis $[H_i/(4\pi I)]^{1/2}$ klein gegen die Ablenkungen in der Wandebene sind. Die durch die Ablenkungen senkrecht zur Wandebene hervorgerufenen zusätzlichen Drehmomente

der Anisotropiekräfte und der Austauschkräfte wurden vernachlässigt. Im Anhang wird gezeigt, daß diese Drehmomente klein sind verglichen mit dem berücksichtigten Drehmoment des entmagnetisierenden Feldes.

Gl. (7) für die Eigenfrequenz lautet, wenn man das innere Feld H_i aus Gl. (6) einsetzt:

$$\omega_0 = \gamma I \sqrt{\delta/l} \sqrt{4\pi/\kappa_0}. \quad (13)$$

Diese Eigenfrequenz unterscheidet sich nur durch einen Faktor $\sqrt{2}$ von derjenigen, die sich unter Benutzung der Wandmasse nach Döring für ein Material mit 90°-Wänden ergibt.

Anhang

Hier sollen die durch die Ablenkungen $\Delta\theta$ bedingten Drehmomente der Anisotropie-Energie und der Austausch-Energie abgeschätzt werden. Die Transformation eines Vektors aus dem Koordinatensystem x, y, z in das Koordinatensystem i, j, k geht nach den Gleichungen vor sich:

$$\begin{aligned} a_i &= a_y \cos \varphi - a_z \sin \varphi, \\ a_j &= a_y \sin \varphi + a_z \cos \varphi, \\ a_k &= a_x. \end{aligned} \quad (14)$$

Die durch die Austauschkraft ausgeübten Drehmomente bezogen auf 1 cm^3 sind nach Döring¹ gegeben durch:

$$\begin{aligned} M_{Ay} &= \frac{nAa^2}{2} \left(\mathfrak{s}_z \frac{\partial^2 \mathfrak{s}_x}{\partial x^2} - \mathfrak{s}_x \frac{\partial^2 \mathfrak{s}_z}{\partial x^2} \right), \\ M_{Az} &= \frac{nAa^2}{2} \left(\mathfrak{s}_x \frac{\partial^2 \mathfrak{s}_y}{\partial x^2} - \mathfrak{s}_y \frac{\partial^2 \mathfrak{s}_x}{\partial x^2} \right). \end{aligned} \quad (15)$$

Darin bedeuten: A Austauschintegral, a Gitterkonstante, n Zahl der Spins je cm^3 , ferner sind $\mathfrak{s}_x = \Delta\theta$, $\mathfrak{s}_y = \sin \varphi$, $\mathfrak{s}_z = \cos \varphi$ die Komponenten des Einheitsvektors \mathfrak{s} in Spinrichtung.

Berechnet man M_{Ay} und M_{Az} nach Gl. (15) und bildet daraus M_{At} nach Gl. (14), so erhält man:

$$\begin{aligned} M_{At} &= \frac{nAa^2}{2} \left[\frac{\partial^2 (\Delta\theta)}{\partial x^2} - \left(\cos \varphi \frac{\partial^2 \cos \varphi}{\partial x^2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sin \varphi \frac{\partial^2 \sin \varphi}{\partial x^2} \right) \Delta\theta \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

Zur Abschätzung der Größenordnung kann man die Differentiation nach x durch den Faktor $1/\delta$ ersetzen. Man erhält für die Dichte des Austauschdrehmomentes um die k -Achse:

$$M_{At} \approx \frac{nAa^2}{2} \frac{\Delta\theta}{\delta^2}. \quad (17)$$

Eine entsprechende Abschätzung läßt sich für die k -Komponente des durch die Anisotropie bedingten Drehmomentes durchführen. Die Anisotropieenergie ist bei dem zugrunde gelegten Modell einer 180°-Wand

* Die quantenmechanische Behandlung der Spinpräzession liefert nach Polder⁶ dieselben Ergebnisse

für die Eigenfrequenzen wie die Rechnung mit Vektoren.

⁶ D. Polder, Phil. Mag. 40, 99 [1949].

gegeben durch: $E_C = C \sin^2 \alpha$, wobei α der Winkel des Spins gegen die z -Achse und C die Anisotropie-Konstante ist. Mit $\cos \alpha = \cos \varphi \sqrt{1 - (\Delta \theta)^2}$ erhält man für die f -Komponente M_{Cf} dieses Drehmomentes:

$$M_{Cf} = - \frac{\partial E_C}{\partial (\Delta \theta)} = -2 C \cos^2 \varphi \Delta \theta. \quad (18)$$

Bei dem zugrunde gelegten Wandmodell ist die Wanddicke $\delta = \sqrt{A/(aC)}$ (l. c.⁴). Daraus ergibt sich, daß die Drehmomente (17) und (18) von gleicher Größenordnung sind.

Für Eisen ist $nAa^2 = 7,8 \cdot 10^{-6}$ erg cm⁻¹ (l. c.¹), $\delta = 4 \cdot 10^{-6}$ cm, so daß man erhält:

$$M_{Af} \approx 0,24 \cdot 10^6 \Delta \theta \text{ dyn/cm}^2. \quad (19)$$

Das entmagnetisierende Feld ist parallel zur Wandnormalen gerichtet und beträgt: $H_I = -4\pi I \Delta \theta$. Es übt ein Drehmoment um die f -Achse aus von der Größe:

$$M_{If} = -4\pi I^2 \Delta \theta. \quad (20)$$

Für Eisen berechnet sich daraus mit $4\pi I = 21400$ G

$$M_{If} = -0,36 \cdot 10^8 \Delta \theta \text{ dyn/cm}^2. \quad (21)$$

Aus dem zahlenmäßigen Vergleich der Drehmomente (19) und (21) ist zu ersehen, daß die von der Austauschenergie und der Anisotropieenergie herrührenden Drehmomente neben dem Drehmoment des entmagnetisierenden Feldes vernachlässigt werden können, wovon im Text Gebrauch gemacht wurde.

Zweizentren-Wechselwirkungsintegrale IV

Grundintegrale bei heteronuklearen Molekülen

Von H. PREUSS

Aus dem Max-Planck-Institut für Physik, Göttingen

(Z. Naturforschg. 9a, 376—389 [1954]; eingegangen am 17. September 1953)

In Weiterführung des von Kopineck¹ begonnenen Integralprogramms für Austausch- und andere Zweizentrenintegrale mit 2s- und 2p-Funktionen, sollen die Wechselwirkungsintegrale auch für den Fall verschiedener Kernladungszahlen in den Eigenfunktionen erweitert werden. Die folgende Arbeit legt als Teil eines größeren Programms einige dazu erforderliche, bisher noch nicht berechnete Grundintegrale tabelliert vor. Zu einem weiteren Grundintegraltyp, der zum Teil in der Literatur schon tabelliert vorliegt, werden Wertetabellen in kleineren Schritten des Parameters angegeben, die eine bessere Interpolation gestatten.

Bei Untersuchungen der chemischen Bindung bieten die auftretenden Wechselwirkungsintegrale große numerische Schwierigkeiten.

Aus diesem Grund ist schon bald nach Entstehen der quantenchemischen Theorie versucht worden, unabhängig von speziellen Betrachtungen die zu erwartenden Integrale zu berechnen und für die Anwendung ausreichend zu tabellieren. Besonders in den letzten Jahren sind von verschiedenen Autoren Integralprogramme begonnen worden. Ihre Durchführung würde bedeuten, daß jede quantenchemische Untersuchung nicht von vornherein mit der mühseligen Berechnung der auftretenden Integrale belastet ist und somit eine viel größere Beweglichkeit der Behandlung zahlreicher Probleme gewährleistet wäre.

Die Untersuchungen führen auf Integrale der Form

$$\int \psi^* \mathbf{H} \psi d\tau, \quad (1)$$

wobei \mathbf{H} der Hamilton-Operator (in at. E) die allgemeinste Form hat

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \Delta_i - \sum_{\lambda=1}^N \sum_{i=1}^n \frac{Z_\lambda}{r_{\lambda i}} + \sum_{\substack{i,k=1 \\ i < k}}^n \frac{1}{r_{ik}} + \sum_{\mu=1}^N \sum_{\lambda=1}^N \frac{Z_\lambda Z_\mu}{R_{\mu\lambda}} \quad (2)$$

($R_{\mu\lambda}$ = Abstand der Zentren μ, λ ; μ, λ : Kerne; i, k : Elektronen) und ψ eine Näherung der Eigenfunktion des vorliegenden Systems ist, die aus Linearkombinationen von Produkten der Einelektronenfunktionen aufgebaut ist²:

$$\psi = \sum c_k (P\chi) \delta_P (P\psi_k). \quad (3)$$

In den Ausdrücken (2), (3) handelt es sich um ein System von n Elektronen (i, k) im Felde von N Kernen, die die Ladungen Z_λ (bzw. Z_μ), $1 \leq \mu, \lambda \leq N$,

¹ H. J. Kopineck, Z. Naturforschg. 5a, 420 [1950]; 6a, 177 [1951]; 7a, 785 [1952].

² Siehe z. B. H. Hellmann, Einführung in die Quantenchemie, Franz Deuticke, Leipzig und Wien 1937.