



Abb. 9. Abhängigkeit der Sekundärelektronen-Ausbeute  $I_{\text{sek}}/I_{\text{prim}}$  vom Einfallswinkel für verschiedene Elemente (nach H. O. MÜLLER<sup>9</sup>).

Reihe von Substanzen die Winkelabhängigkeit der Sekundärelektronenausbeute dargestellt. Das starke

Anwachsen der Sekundäremission mit zunehmendem Einfallswinkel wird dadurch erklärt, daß bei schrägem Einfall der Primärelektronen ein längerer Teil ihrer Bahn als bei senkrechtem Einfall in einer Schicht verläuft, aus der Sekundärelektronen noch austreten können.

Die Untersuchungen zeigen, daß störende Aufladungen durch geeignete Bestrahlung mit langsamen Elektronen völlig beseitigt werden können, wodurch sich die Voraussetzung für die Beobachtung ungestörter Kleinwinkel-Beugungsdiagramme und Schattenprojektionsbilder herbeiführen läßt. Andererseits können durch die Bestrahlung zusätzliche Aufladungen erzeugt werden, die bei Schattenabbildung unter Umständen Inhomogenitäten und Unebenheiten besonders deutlich hervortreten lassen.

Für finanzielle Unterstützung der Untersuchungen sind wir dem Wirtschaftsministerium des Landes Baden-Württemberg und der Arbeitsgemeinschaft für Elektronenoptik zu Dank verpflichtet.

## Über einen Zusammenhang zwischen Kristallanisotropie und Magnetostriktion bei Nickel

Von R. BRENNER

Aus dem Laboratorium der Vacuumschmelze AG, Hanau  
(Z. Naturforsch. 17 a, 150—154 [1962] : eingegangen am 6. Dezember 1961)

Es wird untersucht, ob sich die Magnetostriktion des Nickels durch die Abhängigkeit der Spin-Bahn-Wechselwirkung von Gitterverzerrungen deuten läßt, d. h. als Nebeneffekt der Kristallanisotropie mit gleicher physikalischer Ursache.

Zu diesem Zweck wird die VAN VLECKSche Quadrupolwechselwirkung in einfacher klassischer Behandlung auf das verzerrte Nickelgitter angewendet. Das Ergebnis: Ist die Volumenabhängigkeit der Kristallanisotropie von Null verschieden, so zeigt das Kristallgitter spontane Verzerrungen. Im Fall des Nickels stimmen diese nach Art und Größe weitgehend mit der beobachteten Magnetostriktion überein.

Die Untersuchung blieb auf Nickel beschränkt, weil nur für dieses Metall bisher vollständige Messungen aller Magnetostriktionskonstanten vorliegen.

Unter *Magnetostriktion* versteht man die Gitterverzerrungen, die ferromagnetische Metalle erleiden, wenn man sie magnetisiert. Durch die *Kristallanisotropie* werden einzelne Orientierungen der spontanen Magnetisierung im Kristallgitter gegenüber anderen energetisch bevorzugt.

Die Ursachen der Anisotropie sind zumindest in den Grundzügen aufgeklärt, es existiert auch ein quantenmechanisches Modell dieser Erscheinung

(VAN VLECK<sup>1</sup>). Sie kommt zustande durch eine Wechselwirkung der Spin- und Bahnmomente benachbarter Atome.

Der physikalische Hintergrund der Magnetostriktion dagegen liegt noch weitgehend im Dunkeln. Nach Untersuchungen von AKULOV<sup>2</sup> und BECKER<sup>3</sup> zeigt ein Gitter aus magnetischen Dipolen zwar durch die magnetostatischen Kräfte eine spontane Verzerrung, doch ergibt eine Anwendung auf die

<sup>1</sup> J. H. VAN VLECK, Phys. Rev. **52**, 1178 [1937].

<sup>2</sup> N. AKULOV, Z. Phys. **52**, 389 [1928].

<sup>3</sup> R. BECKER, Z. Phys. **62**, 253 [1930].



ferromagnetischen Metalle qualitativ keine Übereinstimmung mit der Beobachtung. Die vorherrschende Auffassung geht daher dahin, daß die Magnetostriktion ähnlich wie die Kristallanisotropie von einer quantenmechanischen Wechselwirkung verursacht wird, die kein klassisches Analogon hat. Doch konnte diese Meinung bisher noch nicht überzeugend konkretisiert werden.

In der vorliegenden Arbeit soll nun eine andersartige Ursache für die spontane Gitterverzerrung näher untersucht werden. Sie besteht darin, daß die normale Spin-Bahn-Wechselwirkung vom Deformationszustand des Kristallgitters abhängen soll. Ist eine solche Abhängigkeit gegeben, so besteht die Möglichkeit, daß sich das Gitter aus energetischen Gründen spontan verzerrt. Die Magnetostriktion würde dadurch in unmittelbarem Zusammenhang mit der Kristallanisotropie gebracht, sie würde gewissermaßen zu einem Nebeneffekt der Anisotropie. Beide Effekte haben dann die gleiche physikalische Ursache.

Nahegelegt wird diese Möglichkeit zur Interpretation der Magnetostriktion durch folgende Überlegung. Nach VAN VLECK<sup>1</sup> hat die elementare Spin-Bahn-Wechselwirkungsenergie folgende Form:

$$E_{SB} = \gamma_{ij} r_{ij}^{-4} (\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{S}_i)^2 (\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{S}_j)^2. \quad (1)$$

$\mathbf{r}_{ij}$  (Betrag  $r_{ij}$ ) ist hierbei der Verbindungsvektor der Mittelpunkte der Nachbaratome  $i, j$ .  $\mathbf{S}_i$  und  $\mathbf{S}_j$  sind die Spinvektoren dieser Atome. Durch den Faktor  $r_{ij}^{-4}$  wird eine eventuelle Abhängigkeit der Wechselwirkung vom Abstand der Atome in die Koppelungskonstante  $\gamma_{ij}$  verschoben. Daß  $\gamma_{ij}$  tatsächlich vom Atomabstand abhängen muß, zeigt der experimentelle Befund (s. z. B. Anm.<sup>4</sup>), daß sich die Kristallanisotropie bei einer isotropen Kompression oder Dilatation des Gitters (wobei sich alle Atomabstände gleichmäßig verkleinern oder vergrößern) ändert. Bei einer beliebigen Deformation des Kristallgitters sollten sich also nicht nur die Skalarprodukte in (1) bzw. deren Mittelwerte ändern, sondern auch die  $\gamma_{ij}$ . Während demnach die Summe von (1) über alle Nachbaratome eines unverzerrten Kristalls die normale Kristallanisotropie ergibt, sollte die Anwendung dieser Beziehung auf ein verzerrtes Gitter eine *modifizierte Anisotropie* liefern. Ob diese allerdings auch die Möglichkeit für spon-

tane Gitterverzerrungen enthält, muß die folgende Untersuchung ergeben.

Die Vermutung, daß der geschilderte Zusammenhang zwischen Magnetostriktion und Kristallenergie bestehen könnte, findet sich übrigens schon bei KITTEL<sup>5, 6</sup>.

Ob die Anwendung von (1) auf ein deformierbares Kristallgitter spontane Verzerrungen ermöglicht, läßt sich am besten an Hand eines Vergleichs mit gewissen Ergebnissen der formalen Theorie der Magnetostriktion feststellen. Diese sollen daher zunächst zusammengestellt werden. Wir schließen uns dabei an die Darstellung von BECKER und DÖRING<sup>4</sup> an. Doch werden andere Verzerrungskomponenten und Elastizitätsmoduln verwendet.

## 1. Formale Behandlung der Magnetostriktion

Bei einer kleinen Deformation des Kristallgitters werde der Gitterpunkt  $(x, y, z)$  verschoben nach  $(x', y', z')$ . Dann ist im allgemeisten Fall

$$\begin{aligned} x' &= x + e_{xx} x + \frac{1}{2} e_{xy} y + \frac{1}{2} e_{xz} z, \\ y' &= y + \frac{1}{2} e_{xy} x + e_{yy} y + \frac{1}{2} e_{yz} z, \\ z' &= z + \frac{1}{2} e_{xz} x + \frac{1}{2} e_{yz} y + e_{zz} z. \end{aligned} \quad (2)$$

Die Deformation wird durch die Komponenten  $e_{ik}$  beschrieben ( $i, k = x, y, z$ ). Speziell bei einem kubischen Gitter ist sie verbunden mit einer Speicherung von elastischer Energie der räumlichen Dichte

$$\begin{aligned} E_{el} = & \frac{1}{2} c_{11} (e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2) \\ & + c_{12} (e_{xx} e_{yy} + e_{yy} e_{zz} + e_{zz} e_{xx}) \\ & + \frac{1}{2} c_{44} (e_{xy}^2 + e_{yz}^2 + e_{xz}^2). \end{aligned} \quad (3)$$

Hierin sind  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  und  $c_{44}$  die drei Elastizitätsmoduln bei kubischer Gittersymmetrie. Nun habe dieser Kristall eine spontane Magnetisierung und es werde willkürlich angenommen, daß zwischen der Magnetisierung und der Verzerrung des Gitters eine Wechselwirkung besteht, dergestalt, daß zusätzlich zur elastischen Energie (3) der Deformation eine „magneto-elastische Energie“ auftritt, die von der Richtung ( $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ ) der spontanen Magnetisierung abhängt. Denkt man sich diese Energiefunktion nach den Verzerrungen  $e_{ik}$  und den Richtungskosinus  $\alpha_i$

<sup>5</sup> C. KITTEL, Rev. Mod. Phys. **21**, 541 [1949].

<sup>6</sup> C. KITTEL, Introduction to Solid State Physics, J. Wiley & Sons, Inc., 2. Aufl., New York 1954, S. 183.

<sup>4</sup> R. BECKER u. W. DÖRING, Ferromagnetismus, J. Springer, Berlin 1939.

entwickelt<sup>7</sup> und berücksichtigt man nur Glieder, die linear in den  $e_{ik}$  und von maximal viertem Grad in den  $\alpha_i$  sind, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} E_{\text{me}} = & b_0 \omega \\ & + b_1 [(\alpha_1^2 - \frac{1}{3}) e_{xx} + (\alpha_2^2 - \frac{1}{3}) e_{yy} \\ & \quad + (\alpha_3^2 - \frac{1}{3}) e_{zz}] \\ & + b_2 (\alpha_1 \alpha_2 e_{xy} + \alpha_2 \alpha_3 e_{yz} + \alpha_3 \alpha_1 e_{xz}) \\ & + b_3 \omega s \\ & + b_4 [(\alpha_1^4 + \frac{2}{3} s - \frac{1}{3}) e_{xx} + (\alpha_2^4 + \frac{2}{3} s - \frac{1}{3}) e_{yy} \\ & \quad + (\alpha_3^4 + \frac{2}{3} s - \frac{1}{3}) e_{zz}] \\ & + b_5 (\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3^2 e_{xy} + \alpha_2 \alpha_3 \alpha_1^2 e_{yz} + \alpha_3 \alpha_1 \alpha_2^2 e_{xz}) \end{aligned} \quad (4)$$

als allgemeinste Form der magneto-elastischen Energie bei kubischer Gittersymmetrie. Die Koeffizienten  $b_0 \dots b_5$  werden als magneto-elastische Konstanten bezeichnet. Als Abkürzungen sind verwendet:

$$\omega = e_{xx} + e_{yy} + e_{zz} = \delta V/V,$$

die relative Volumenänderung bei der Deformation, und

$$s = \alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2.$$

Die Terme von (4) sind so geordnet, daß bei einer isotropen Deformation ( $e_{xx} = e_{yy} = e_{zz} = \omega/3$ ,  $e_{ik} = 0$  für  $i \neq k$ )

$$E_{\text{me}} = b_0 \omega + b_3 \omega s \quad (5)$$

wird. Da nun aber die Winkelabhängigkeit der Kri-

stallanisotropie-Energie in erster Näherung durch die Beziehung

$$E_K = K_1 \cdot s \quad (6)$$

(mit der Anisotropiekonstanten  $K_1$ ) gegeben ist, stellt  $b_3$  nichts anderes dar als den Koeffizienten der Volumenabhängigkeit der Kristallanisotropie. Die Konstante  $b_3$  der magneto-elastischen Energie lässt sich demnach als einzige ohne Zuhilfenahme der Magnetostriktion unmittelbar experimentell bestimmen aus der Volumenabhängigkeit der Kristallanisotropie.

Es ist nun leicht zu zeigen, daß ein Kristall mit einer magneto-elastischen Energie (4) sich spontan verzerrt. Er tut dies gegen den Widerstand der elastischen Kräfte, um die magneto-elastische Energie zu verkleinern. Man berechnet die spontanen Verzerrungen bei vorgegebener Richtung der spontanen Magnetisierung als jene Deformation, bei der die Gesamtenergie  $E_{\text{el}} + E_{\text{me}}$  am kleinsten ist:

$$\partial (E_{\text{el}} + E_{\text{me}}) / \partial e_{ik} = 0. \quad (7)$$

Aus diesen sechs Gleichungen ergeben sich die sechs Komponenten  $e_{ik}$  der spontanen Verzerrung. Die relative Längenänderung in einer beliebigen Richtung ( $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ ) findet man, indem man bildet

$$\left( \frac{\delta l}{l} \right)_{\alpha_i, \beta_i} = \sum_{i, k \geq i} e_{ik} \beta_i \beta_k.$$

Man erhält nach Einsetzen der Lösungen von (7)

$$\begin{aligned} \left( \frac{\delta l}{l} \right)_{\alpha_i, \beta_i} = & - \frac{b_0}{c_{11} + 2 c_{12}} - \frac{b_1}{c_{11} - c_{12}} (\alpha_1^2 \beta_1^2 + \alpha_2^2 \beta_2^2 + \alpha_3^2 \beta_3^2 - \frac{1}{3}) \\ & - \frac{b_2}{c_{44}} (\alpha_1 \alpha_2 \beta_1 \beta_2 + \alpha_2 \alpha_3 \beta_2 \beta_3 + \alpha_3 \alpha_1 \beta_3 \beta_1) \\ & - \frac{b_3}{c_{11} + 2 c_{12}} s - \frac{b_4}{c_{11} - c_{12}} (\alpha_1^4 \beta_1^2 + \alpha_2^4 \beta_2^2 + \alpha_3^4 \beta_3^2 + \frac{2}{3} s - \frac{1}{3}) \\ & - \frac{b_5}{c_{44}} (\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3^2 \beta_1 \beta_2 + \alpha_2 \alpha_3 \alpha_1^2 \beta_2 \beta_3 + \alpha_3 \alpha_1 \alpha_2^2 \beta_3 \beta_1) \quad (\text{s. Anm. } 8). \end{aligned} \quad (8)$$

Diese Beziehung gibt also die Abhängigkeit der spontanen Gitterverzerrung (der Magnetostriktion) von der Beobachtungsrichtung und der Richtung der spontanen Magnetisierung. Man benützt sie, um durch Messung der Verzerrungen — wobei es sich natürlich nur um Differenzmessungen handeln kann, da ja die Abmessungen des unverzerrten Gitters

nicht bekannt sind — die magneto-elastischen Konstanten  $b_1, b_2, \dots, b_5$  zu bestimmen. Die Konstante  $b_0$  kann durch eine Vereinbarung über das Bezugsvolumen festgelegt werden, doch ist ihre Größe für den beobachtbaren Effekt der Magnetostriktion belanglos.

In der angegebenen Weise wurden bisher nur die

<sup>7</sup>  $\alpha_i$  sind die Richtungskosinus gegenüber den kristallographischen Hauptachsen.

<sup>8</sup> Vielfach berücksichtigt man nur die Glieder mit  $b_1$  und  $b_2$  und schreibt unter Einführung der „Magnetostriktions-

konstanten“  $\lambda_{100}$  und  $\lambda_{111}$   
 $(\delta l/l) = \frac{3}{2} \lambda_{100} (\alpha_1^2 \beta_1^2 + \alpha_2^2 \beta_2^2 + \alpha_3^2 \beta_3^2 - \frac{1}{3})$   
 $- \frac{3}{2} \lambda_{111} (2 \alpha_1 \alpha_2 \beta_1 \beta_2 + 2 \alpha_2 \alpha_3 \beta_2 \beta_3 + 2 \alpha_3 \alpha_1 \beta_3 \beta_1)$ .

Konstanten von Nickel vollständig bestimmt. Das Ergebnis dieser Messungen von BOZORTH und HAMMING<sup>9</sup> lautet:

$b_1$	$b_2$	$b_3$	$b_4$	$b_5$	
6,2	8,6	1,6	0,7	-1,8	$\cdot 10^7 \text{ erg cm}^{-3}$

(9)

(bei Zimmertemperatur).

Es ist nun unsere Aufgabe, zu untersuchen, ob die Spin-Bahn-Wechselwirkung (1) in einem verzerrten Gitter neben der normalen Kristallanisotropie auch eine magneto-elastische Energie der Form (4) ergibt. Ist dies der Fall, so verursacht – nach den vorstehenden Überlegungen – die Spin-Bahn-Wechselwirkung automatisch eine spontane Gitterverzerrung. Ein Vergleich der berechneten mit den gemessenen magneto-elastischen Konstanten (9) muß dann zeigen, ob der Effekt auch quantitativ mit der beobachteten Magnetostriktion des Nickels übereinstimmt.

## 2. Die Spin-Bahn-Wechselwirkung im verzerrten Gitter

Für den Zweck eines ersten Überblicks genügt es, die Beziehung (1) in vereinfachter Gestalt anzuwenden. Es sollen daher alle vorkommenden Symbole als klassische Größen verstanden, die Operatoren also gewissermaßen durch ihre Erwartungswerte ersetzt werden. Außerdem sei eine vollständige Spinkorrelation angenommen, d. h.  $\mathbf{S}_i$  und  $\mathbf{S}_j$  sollen stets gleichgerichtet sein und die Richtung ( $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ ) der spontanen Magnetisierung des Kristalls haben. Schließlich sei  $\gamma_{ij}$  für alle Paare wechselwirkender Atome gleich groß (=  $\gamma$ ).

In einem unverzerrten Nickel-Kristall habe nun ein beliebig herausgegriffenes Atom den Ort (0, 0, 0). Seine zwölf nächsten Nachbarn befinden sich dann in den Punkten

$$(i_n, j_n, k_n)_{n=1,2,\dots,12} = \begin{cases} 2^{-1/2}(0, \pm 1, \pm 1) \\ 2^{-1/2}(\pm 1, 0, \pm 1), \\ 2^{-1/2}(\pm 1, \pm 1, 0) \end{cases} \quad (10)$$

wobei diese Ortsvektoren bereits normiert wurden, so daß  $i_n^2 + j_n^2 + k_n^2 = 1$  ist. Dann ist nach (1)

$$E_{\text{SB}}^{(n)} = \gamma |\mathbf{S}|^4 (i_n \alpha_1 + j_n \alpha_2 + k_n \alpha_3)^4 \quad (11)$$

die Spin-Bahn-Wechselwirkungsenergie des Zentral-

atoms mit dem  $n$ -ten Nachbaratom. Summiert man (11) über die Orte (10) der nächsten Nachbarn und multipliziert mit der Zahl  $N$  der Atome im  $\text{cm}^3$  und mit dem Faktor  $\frac{1}{2}$  (um nicht jedes Atom doppelt zu zählen), so ergibt sich

$$\begin{aligned} E_{\text{SB}} &= \frac{1}{2} N \gamma |\mathbf{S}|^4 \sum_{n=1}^{12} (i_n \alpha_1 + j_n \alpha_2 + k_n \alpha_3)^4 \\ &= N \gamma |\mathbf{S}|^4 (1 + \alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) \quad (12) \\ &= \text{const} + K_1 \cdot s, \end{aligned}$$

also die normale Kristallanisotropie-Energie des unverzerrten Gitters mit der Anisotropie-Konstanten

$$K_1 = N \gamma |\mathbf{S}|^4.$$

Als nächstes werde das Gitter nun einer isotropen Dilatation unterworfen. Dabei ändern sich nur die Abstände der Atome des Gitters, nicht aber die Richtungen der Verbindungsvektoren. Da die Kristallanisotropie durch eine derartige Dilatation geändert wird, muß  $\gamma$  vom Atomabstand abhängen. Diese Abhängigkeit sei in erster Näherung linear angesetzt,

$$\gamma' = \gamma + \varkappa (\delta l / l), \quad (13)$$

wobei sich  $\gamma$  wie bisher auf das unverzerrte Gitter bezieht, und  $\delta l / l$  die relative Abstandsänderung der Atome ist.

Die Wechselwirkungsenergie des isotrop gedehnten Gitters beträgt je  $\text{cm}^3$

$$E_{\text{SB}}(\delta l) = \text{const} + N[\gamma + \varkappa(\delta l / l)] |\mathbf{S}|^4 \cdot s,$$

(wobei die geringfügige Änderung von  $N$  vernachlässigt ist).

Da nun – wie im vorhergehenden Abschnitt erwähnt – die Volumenabhängigkeit von  $K_1$  durch die magneto-elastische Konstante  $b_3$  gegeben ist,

$$K_1(\omega) = K_1 + b_3 \omega,$$

folgt wegen  $\delta l / l = \omega / 3$ :

$$\varkappa = b_3 \frac{3}{N |\mathbf{S}|^4} = \frac{\text{d}K_1}{\text{d}\omega} \frac{3}{N |\mathbf{S}|^4}. \quad (14)$$

Die Abhängigkeit der Spin-Bahn-Wechselwirkung vom Atomabstand ist damit auf den experimentellen Wert der Volumenabhängigkeit der Kristallanisotropie zurückgeführt. Dies ist von großer Bedeutung für die Berechnung der Wechselwirkung bei beliebigen Gitterdeformationen.

Im Falle einer allgemeinen Verzerrung ( $e_{ik}$ ) ändern sich sowohl die Atomabstände als auch die Richtungen der Verbindungsvektoren, und zwar ungleichmäßig. Die Wechselwirkungsenergie hat dann

<sup>9</sup> R. M. BOZORTH u. R. W. HAMMING, Phys. Rev. **89**, 865 [1953].

folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} E_{\text{SB}} &= \frac{1}{2} N |\mathbf{S}|^4 \sum_{l=1}^{12} \left( \gamma + \alpha \frac{\delta l_n}{l_n} \right) \\ &\quad \cdot [\cos(\mathbf{r}_n, \mathbf{S}) + \delta \cos(\mathbf{r}_n, \mathbf{S})]^4 \\ &\approx \frac{1}{2} N |\mathbf{S}|^4 \gamma \sum_{n=1}^{12} \cos^4(\mathbf{r}_n, \mathbf{S}) \\ &\quad + \frac{1}{2} N |\mathbf{S}|^4 \gamma \sum_{n=1}^{12} 4 \cos^3(\mathbf{r}_n, \mathbf{S}) \cdot \delta \cos(\mathbf{r}_n, \mathbf{S}) \\ &\quad + \frac{1}{2} N |\mathbf{S}|^4 \alpha \sum_{n=1}^{12} \frac{\delta l_n}{l_n} \cos^4(\mathbf{r}_n, \mathbf{S}). \end{aligned} \quad (15)$$

Die erste der drei Summen ist nach (12) die Kristallanisotropie-Energie des unverzerrten Nickelkristalls. Die zweite Summe stellt den reinen „Winkel-Effekt“ dar. Sie ergibt zwei Glieder, die zwar die Gestalt des zweiten und dritten Terms der magneto-elastischen Energie (4) aufweisen, deren Koeffizienten aber von der Größenordnung von  $K_1$  ( $= -6 \cdot 10^4 \text{ erg cm}^{-3}$ ) sind, also um etwa drei Zehnerpotenzen kleiner als die beobachteten Werte (9). Der Winkel-Effekt führt demnach zwar zu einer Magnetostriktion, doch ist diese bei weitem kleiner als die tatsächlich beobachtete.

Die dritte Summe in (15) enthält den reinen „Abstands-Effekt“. Zu ihrer Auswertung benutzt man die Näherung

$$\begin{aligned} \delta l_n / l_n &\approx (i'_n - i_n) i_n + (j'_n - j_n) j_n + (k'_n - k_n) k_n \\ &= i'_n i_n + j'_n j_n + k'_n k_n - 1, \end{aligned}$$

wobei  $(i'_n, j'_n, k'_n)$  der Ort des  $n$ -ten Nachbaratoms nach der Verzerrung des Gitters ist. Unter Benutzung von (2) findet man so

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{12} \frac{\delta l_n}{l_n} \cos^4(\mathbf{r}_n, \mathbf{S}) &= \sum_{n=1}^{12} (e_{xx} i_n^2 + e_{yy} j_n^2 + e_{zz} k_n^2 + e_{xy} i_n j_n \\ &\quad + e_{yz} j_n k_n + e_{xz} k_n i_n) [\alpha_1 i_n + \alpha_2 j_n + \alpha_3 k_n]^4. \end{aligned}$$

Die Ausführung der Summe ergibt

$$\begin{aligned} &+ \frac{2}{3} \omega \\ &+ 3 [(\alpha_1^2 - \frac{1}{3}) e_{xx} + (\alpha_2^2 - \frac{1}{3}) e_{yy} + (\alpha_3^2 - \frac{1}{3}) e_{zz}] \\ &+ 2 (e_{xy} \alpha_1 \alpha_2 + e_{yz} \alpha_2 \alpha_3 + e_{xz} \alpha_3 \alpha_1) \\ &+ \frac{2}{3} \omega s \\ &- \frac{5}{2} [(\alpha_1^4 + \frac{2}{3} s - \frac{1}{3}) e_{xx} + (\alpha_2^4 + \frac{2}{3} s - \frac{1}{3}) e_{yy} \\ &\quad + (\alpha_3^4 + \frac{2}{3} s - \frac{1}{3}) e_{zz}] \\ &- 2 (\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3^2 e_{xy} + \alpha_2 \alpha_3 \alpha_1^2 e_{yz} + \alpha_3 \alpha_1 \alpha_2^2 e_{xz}), \end{aligned}$$

also eine magneto-elastische Energie der Form (4). Wie ein Vergleich der Koeffizienten zeigt, ist unter Berücksichtigung von (14)

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{9}{2} \frac{dK_1}{d\omega}; \quad b_2 = 3 \frac{dK_1}{d\omega}; \quad b_3 = \frac{dK_1}{d\omega}; \\ b_4 &= -\frac{15}{4} \frac{dK_1}{d\omega}; \quad b_5 = -3 \frac{dK_1}{d\omega}. \end{aligned}$$

Nach dem Ergebnis (9) der Messung von BOZORTH und HAMMING ist  $dK_1/d\omega = b_3 = 1,6 \cdot 10^7 \text{ erg cm}^{-3}$ . Der „Abstands-Effekt“ der Spin-Bahn-Wechselwirkung verursacht demnach eine magneto-elastische Energie mit den Konstanten

$b_1$	$b_2$	$b_4$	$b_5$	
7,2	4,8	-6,0	-4,8	$\cdot 10^7 \text{ erg cm}^{-3}$

(16)

### 3. Diskussion

Die errechneten Werte (16) der magneto-elastischen Konstanten des Nickels stimmen mit den Meßwerten (9) sowohl hinsichtlich des Vorzeichens als auch der Größenordnung weitgehend überein. Man muß beim Vergleich der Werte sowohl die Unsicherheiten der Messung als auch den provisorischen und simplifizierenden Charakter des theoretischen Modells berücksichtigen. Vor allem die Annahme der starken Spinkorrelation, die die Rechnung erheblich vereinfachte, ist gerade bei Nickel nicht ganz unbedenklich. Auch ist im Zusammenhang damit natürlich eine unterschiedliche Temperaturabhängigkeit der magneto-elastischen Konstanten in Betracht zu ziehen, die zu relativen Verschiebungen der Werte bei Zimmertemperatur führen kann.

Das Ergebnis der vorliegenden Untersuchung ist, daß die Abhängigkeit der Kristallanisotropie von Gitterdeformationen sehr wohl den Effekt der Magnetostriktion erklären kann. Ein Kristall mit der Volumenabhängigkeit der Kristallanisotropie des Nickels weist spontane Gitterverzerrungen auf, die von der Art und Größenordnung der am Nickel tatsächlich beobachteten Magnetostriktion sind. Interessanterweise wird die Magnetostriktion nicht von der Größe der Anisotropie selbst, sondern nur von deren Volumenabhängigkeit bestimmt.