NOTIZEN

Diffusion von Spin-Teilchen im Magnetfeld

Von L. Waldmann und H.-D. Kupatt

Max-Planck-Institut für Chemie und Institut für theoretische Physik der Universität Mainz

(Z. Naturforschg. **18 a**, 86—87 [1963]; eingegangen am 22. November 1962)

In früheren Arbeiten [1, 2] war die Diffusion von Spinteilchen in einem unregelmäßigen Gitter kugelsymmetrischer Streuzentren betrachtet worden. In der Sprache der Gastheorie handelte es sich also um das Lorentz-Gas aus Spinteilchen. Gegenstand dieser Note ist die Erweiterung der Theorie durch Hinzunahme eines Magnetfeldes. Dieses bewirkt eine Präzession der Spins, und das besondere Interesse richtet sich auf die Frage nach deren Einfluß auf den Diffusionskoeffizienten und nach dem Polarisationszustand der Teilchen bei der Diffusion.

Wir betrachten ungeladene Teilchen von einheitlichem Geschwindigkeitsbetrag v und beschreiben sie wieder durch einen Verteilungsoperator $f(t, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{e}, \boldsymbol{s})$, der außer von Zeit und Ort vom Einheitsvektor der Geschwindigkeitsrichtung $\boldsymbol{e} = \boldsymbol{v}/v$ und von dem dimensionslosen Spinvektor $\boldsymbol{s}$ abhängt. Als Boltzmann-Gleichung legen wir zugrunde

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} - i\,\omega_H(\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{s}\,f - f\,\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{s}) = -I(f).$$

Das Kommutatorglied — letzter Term links — gibt den Einfluß des Magnetfeldes, das die Richtung des Einheitsvektors $\boldsymbol{h}$ habe. Die Präzessionsfrequenz ist

$$\omega_H = \frac{\mu H}{s \hbar}.$$

Darin bedeutet H den Betrag des Magnetfeldes, μ das magnetische Moment und s den Spin der Teilchen ($2s+1$ = Anzahl der Zustände im Magnetfeld); $\hbar$ bezeichnet die Planck-Konstante. Als Stoßoperator I verwenden wir unverändert den früheren — z. B. Gl. (1.5) in Anm. [2] —, vernachlässigen also den Einfluß des Magnetfeldes auf den Stoßvorgang selbst. Wegen der Spin-Umklappprozesse ist dann der Energiesatz nicht streng erfüllt, jedoch ist das hier praktisch bedeutungslos.

Die Behandlung der obigen Boltzmann-Gleichung schließt an die frühere an. Die Entwicklung der Verteilung f nach irreduziblen Tensoren führt beim Spin 1/2 in der einfachsten, nichttrivialen Näherung auf einen Skalar n_1, die Teilchendichte, einen Pseudoskalar n_3, die Helizitätsdichte, sowie auf zwei polare Vektoren $\boldsymbol{j}_1$, $\boldsymbol{j}_2$, nämlich Teilchenstrom und Dichte des „Azimutalspins" $\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{s}$, und zwei axiale Vektoren $\boldsymbol{j}_3$, $\boldsymbol{j}_4$, nämlich Helizitätsstrom und Transversalspindichte. All diese zeit- und ortsabhängigen Größen sind durch die folgenden Diffusions-Relaxationsgleichungen verknüpft:

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} + \operatorname{div} \boldsymbol{j}_1 = 0\,, \tag{1}$$

$$\frac{\partial n_3}{\partial t} + \operatorname{div} \boldsymbol{j}_3 - \omega_H \frac{\sqrt{2}}{v}\, \boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{j}_2 = -\omega_0\, n_3\,, \tag{2}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{j}_1}{\partial t} + \frac{v^2}{3} \operatorname{grad} n_1 = -\boldsymbol{g}_1\,, \tag{3}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{j}_2}{\partial t} + \frac{v}{2} \operatorname{rot} \boldsymbol{j}_4 + \omega_H \left(\frac{\sqrt{2}}{3}\, v\, n_3\, \boldsymbol{h} + \frac{1}{2}\, \boldsymbol{h}\times\boldsymbol{j}_2\right) = -\boldsymbol{g}_2\,, \tag{4}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{j}_3}{\partial t} + \frac{v^2}{3} \operatorname{grad} n_3 + \omega_H \frac{1}{\sqrt{2}}\, \boldsymbol{h}\times\boldsymbol{j}_4 = -\boldsymbol{g}_3\,, \tag{5}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{j}_4}{\partial t} - \frac{v}{2} \operatorname{rot} \boldsymbol{j}_2 + \omega_H\, \boldsymbol{h}\times\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\, \boldsymbol{j}_3 + \frac{1}{2}\, \boldsymbol{j}_4\right) = -\boldsymbol{g}_4\,. \tag{6}$$

Die „Kräfte" $\boldsymbol{g}$ auf den rechten Seiten sind lineare Funktionen der $\boldsymbol{j}$,

$$\boldsymbol{g}_i = \sum_1^4 \omega_{ik}\, \boldsymbol{j}_k\,.$$

Die Abklingkonstante ω_0 ist positiv, die Matrix ω_{ik} (frühere Bezeichnung: $\omega_1^{(ik)}$) ist positiv-definit und besitzt die Onsager–Casimirschen Symmetrien, siehe Anm. [2].

Nun sei die stationäre Diffusion im Innern des Streukörpers, genügend weit weg von dessen Oberfläche, betrachtet. Dort sind $\boldsymbol{j}_3$ und $\boldsymbol{j}_4$ abgeklungen, und man darf auch $\operatorname{grad} n_3 \approx 0$, $\operatorname{rot} \boldsymbol{j}_2 \approx 0$ annehmen. Gln. (5) und (6) sind dann identisch erfüllt, und es bleibt nur das System übrig

$$\operatorname{div} \boldsymbol{j}_1 = 0\,, \tag{1'}$$

$$\omega_H \frac{\sqrt{2}}{v}\, \boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{j}_2 = \omega_0\, n_3\,, \tag{2'}$$

$$\frac{v^2}{3} \operatorname{grad} n_1 = -\boldsymbol{g}_1\,, \tag{3'}$$

$$\omega_H \left(\frac{\sqrt{2}}{3}\, v\, n_3\, \boldsymbol{h} + \frac{1}{2}\, \boldsymbol{h}\times\boldsymbol{j}_2\right) = -\boldsymbol{g}_2\,. \tag{4'}$$

Aus den Gln. (2') bis (4'), welche man natürlich auch durch eine Chapman–Enskog-Entwicklung bekommen kann, sind $\boldsymbol{j}_{1,2}$ als lineare Funktionen von $\operatorname{grad} n_1$ zu entnehmen mit dem Ergebnis

$$\boldsymbol{j}_1 = -\frac{v^2}{3\,\omega_{11}} \operatorname{grad} n_1 + \frac{l_{12}}{l_{22}}\, \boldsymbol{j}_2\,, \tag{7}$$

$$\boldsymbol{j}_2 = -\frac{v\, l_{21}}{3(1+\varphi^2)} \left[\operatorname{grad} n_1 - \varphi\, \boldsymbol{h}\times\operatorname{grad} n_1 + \frac{(1-\alpha)\,\varphi^2}{1+\alpha\,\varphi^2}\, \boldsymbol{h}\,(\boldsymbol{h}\cdot\operatorname{grad} n_1)\right]. \tag{8}$$

[1] L. Waldmann, Nuovo Cim. **14**, 898 [1959].

[2] L. Waldmann, Z. Naturforschg. **15 a**, 19 [1960].

Hierin bezeichnet l_{ik} die der Relaxationsmatrix ω_{ik} durch Inversion zugeordnete Weglängen-Matrix

$$l_{ik} = v\,\omega^{-1}{}_{ik},$$

und es ist abgekürzt

$$\varphi = \omega_H\, l_{22}/2\,v\,, \quad \alpha = 8\,l_0/3\,l_{22}\,, \quad l_0 = v/\omega_0\,.$$

Der Winkel φ bedeutet also die halbe Präzessionsdrehung des Spins während des Fluges längs der freien Weglänge l_{22}. Allgemein sei noch, wie schon in [2], bemerkt, daß die in der Richtung $\boldsymbol{e}$ bewegten Teilchen den mittleren Spin

$$\bar{\boldsymbol{s}} = 3\,[\boldsymbol{j}_2 \times \boldsymbol{e}]/2\,\sqrt{2}\,(n_1\,v + 3\,\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{j}_1) \tag{9}$$

besitzen, also senkrecht zu $\boldsymbol{j}_2$ und zur Flugrichtung polarisiert sind. An dieser Polarisation greift das Magnetfeld an und bewirkt die Änderung der Diffusion.

Gln. (7) und (8) besagen das Auftreten eines Diffusionstensors: SENFTLEBEN-Effekt[3] bei der Diffusion von Spin-1/2-Teilchen. Dieser Diffusionstensor wird aber isotrop in den beiden Grenzfällen

$\varphi = 0$ (kein Magnetfeld):

$$\boldsymbol{j}_1 = -\frac{1}{3}\,v\,l_{11}\,\mathrm{grad}\,n_1\,, \quad \boldsymbol{j}_2 = \frac{l_{21}}{l_{11}}\,\boldsymbol{j}_1\,; \tag{10}$$

$\varphi \gg 1$ (starkes Magnetfeld):

$$\boldsymbol{j}_1 = -\frac{v^2}{3\,\omega_{11}}\,\mathrm{grad}\,n_1\,, \quad \boldsymbol{j}_2 = 0\,. \tag{11}$$

Im letzten Fall ist also alle azimutale Polarisation der Spins verschwunden. Der zugehörige Diffusionskoeffizient $D = v^2/3\,\omega_{11}$ wird tatsächlich auch direkt erhalten, indem man statt des exakten Stoßoperators der BOLTZMANN-Gleichung, welcher die spinabhängige Streuamplitude a enthält[2], kurzerhand ein gewöhnliches Stoßintegral mit dem Streuquerschnitt

$$\sigma = \frac{1}{2}\,\mathrm{Sp}\,(a\,a^\dagger)$$

verwendet. Nach (10) macht man einen Fehler, wenn man auch im feldfreien Fall so verfährt. Darauf haben grundsätzlich schon MÜHLSCHLEGEL und KOPPE[4] hingewiesen. Der Diffusionskoeffizient ist hier kleiner, nämlich $D = v\,l_{11}/3$ mit

$$l_{11} = \frac{v\,\omega_{22}}{\omega_{11}\,\omega_{22} + \omega_{12}^2}\,.$$

Der Unterschied liegt in der Existenz der Konstanten ω_{12} begründet, die ihrerseits aus der Spin-Bahn-Koppelung beim Stoß resultiert. – Im Prinzip herrschen ähnliche Verhältnisse ganz allgemein bei mehratomigen Gasen, was KAGAN und MAKSIMOV[5] sowie KAGAN und AFANAS'EV[6] in zwei interessanten Arbeiten gezeigt haben. – Es sei noch eigens bemerkt, daß nach SENFTLEBEN bei den zweiatomigen Gasen die Transportkoeffizienten mit zunehmendem Magnetfeld kleiner werden, während, wie eben in (10) und (11) gezeigt, bei Spin 1/2-Teilchen der Diffusionskoeffizient mit wachsendem Magnetfeld zunimmt.

Die durch (9) dargestellte Polarisation ist beobachtbar an Teilchen, die quer zum Diffusionsstrom seitlich austreten (MOTT-Polarisation bei Vielfachstreuung). Eine solche Polarisation sollte experimentell nachweisbar sein auch an einem Strahl von beliebigen nichtkugelförmigen Molekülen, die z. B. aus einem wärmeleitenden Gas von geeignetem Druck quer zum Wärmestrom durch ein Loch in der Seitenwand ins Vakuum übertreten. Eine Spin-Bahn-Koppelung ist bei Spin $\geqq 1$ für das Auftreten von Polarisation nicht erforderlich; es genügt hierfür ein gewöhnliches nicht-sphärisches Potential. In den Arbeiten[5, 6] tritt das Polarisationsglied nicht auf, weil dort ein spezieller Stoßansatz zugrunde liegt.

Schließlich sei noch der mittlere Term rechts in (8) erläutert. Er liefert, in (7) eingesetzt, eine Komponente des Diffusionsstroms senkrecht zum Magnetfeld und senkrecht zum Konzentrationsgradienten und ist bei schwachem Magnetfeld der einzige in diesem lineare Beitrag. Er ist formal und in seiner Auswirkung vergleichbar mit den an geladenen Teilchen durch die LORENTZ-Kraft hervorgerufenen Erscheinungen (HALL-Effekt usw.).

Dem Bundesministerium für Atomkernenergie danken wir vielmals für finanzielle Unterstützung dieser Arbeit.

[3] H. SENFTLEBEN, Phys. Z. **31**, 822, 961 [1930]; **34**, 835 [1933]. – J. J. M. BEENAKKER, G. SCOLES, H. F. P. KNAAP u. R. M. JONKMAN, Physics Letters **2**, 5 [1962].

[4] B. MÜHLSCHLEGEL u. H. KOPPE, Z. Phys. **150**, 474 [1958].

[5] Y. KAGAN u. L. MAKSIMOV, Soviet Phys. JETP **14**, 604 [1962].

[6] Y. KAGAN u. A. M. AFANAS'EV, Soviet Phys. JETP **14**, 1096 [1962].