

approximation are always higher as compared with those by Houston's approximation.

5. Conclusion

It has been found that VRHG approximation for the calculation of the DEBYE temperatures of cubic crystals is quite simple and gives accurate results

in comparison with any of the other approximate methods. It takes about ten minutes on the slide rule to compute Θ_D . The method is also general in that it is applicable to a crystal of any symmetry. Moreover, in this method the elastic parameters need not be that of a single crystal; such data on hot pressed sintered material will suffice for determining DEBYE Θ .

Spinwellen in dünnen ferromagnetischen Schichten

Von RAINER J. JELITTO *

Institut für Theoretische Physik der Universität München

(Z. Naturforsch. 19 a, 1567—1580 [1964]; eingegangen am 31. Juli 1964)

This paper is concerned with an ideal spin-1/2-HEISENBERG-model for thin ferromagnetic films. A general method is given for the calculation of the one-spinwave eigenstates and their spectrum in dependence on the lattice type and the orientation of the surfaces of the film. The function that characterises the shape of the spinwave perpendicular to the film must fulfil a linear eigenvalue-difference-equation as well as a set of boundary conditions.

For next-neighbour interactions this system may be evaluated for an especially simple case. For it spinwavenstates of the form of cos-sin-functions as well as surface states are found. Their momenta are given by some transcendental equations, which are discussed.

For all other cases the given difference-equation cannot be solved in a closed form, but at any rate it is a starting point for numerical calculations.

In a subsequent paper it will be shown that the special case mentioned above covers some important surface orientations of the cubic lattice types. For films of these orientations the dependence of the magnetization on temperature and thickness of the film will be derived from the spinwave spectra.

Von allen Modellen, welche der quantenmechanischen Beschreibung des ferromagnetischen Zustandes dienen, stellt nach wie vor das HEISENBERG-Modell¹ lokalisierter Spins den günstigsten Kompromiß zwischen der Forderung nach physikalischer Richtigkeit einerseits und den Erfordernissen mathematischer Einfachheit andererseits dar.

Besonders bei niedrigen Temperaturen, bei denen das Konzept der Spinwellen ein angemessenes Bild liefert, führen bereits die einfachsten Näherungen zu guten Ergebnissen. Das so gewonnene BLOCHSche² $T^{3/2}$ -Gesetz für die Temperaturabhängigkeit der spontanen Magnetisierung eines unendlich ausgedehnten dreidimensionalen Kristalls trägt dem tatsächlichen Verhalten dieser Größe gut Rechnung und wurde verschiedentlich experimentell bestätigt^{3, 4}. Bei Rechnungen über das Flächengitter und

die lineare Kette kommt es zu Divergenzen, deren tiefliegende Ursachen im Falle des Flächengitters erst 1961 durch DÖRING⁵ geklärt werden konnten.

Legt man den Untersuchungen ein allseitig unendlich ausgedehntes Kristallgitter zugrunde, so werden die Rechnungen durch die Translationsinvarianz des HAMILTON-Operators erheblich vereinfacht; allerdings begibt man sich damit in bekannter Weise der Erfassung von Oberflächeneffekten. Doch ist die Anwendbarkeit des HEISENBERG-Modells und Spinwellenkonzeptes keineswegs auf translationsinvariante Probleme beschränkt; wenn man die besonderen Verhältnisse berücksichtigt, welche die Spins in der Nähe von Oberflächen dadurch antreffen, daß sie weniger Nachbarn besitzen als innere Gitterpunkte, sind sie auch zur Beschreibung von Oberflächeneffekten geeignet.

* Jetzt Institut für Theoretische Physik der Universität Kiel.

¹ W. HEISENBERG, Z. Phys. 49, 619 [1928].

² F. BLOCH, Z. Phys. 61, 206 [1930].

³ S. FONER u. E. D. THOMPSON, J. Appl. Phys. 30, 229 [1959].

⁴ B. E. ARGYLE, S. H. CHARAP u. E. W. PUGH, Phys. Rev. 132, 2051 [1963].

⁵ W. DÖRING, Z. Naturforsch. 16 a, 1008 [1961].



Diese Tatsache findet ihren ersten Niederschlag in Arbeiten von KLEIN und SMITH⁶ sowie später GLASS und KLEIN⁷, die mit dieser Methode die Sättigungsmagnetisierung dünner einkristalliner Schichten berechnen. Doch werden in diesen Arbeiten die erwähnten Randbedingungen nur sehr pauschal erfaßt: die Autoren behalten senkrecht zur Schicht periodische Randbedingungen bei und tragen der endlichen Ausdehnung in dieser Richtung ausschließlich dadurch Rechnung, daß sie auf eine Kontinuumsnäherung des diskreten Impulsspektrums verzichten. Ihre Ergebnisse zeigen eine erhebliche Abhängigkeit der Magnetisierung und der CURIE-Temperatur von der Schichtdicke.

Dazu im Widerspruch stehen sowohl der experimentelle Befund als auch die Ergebnisse von Theorien, die das Problem des Ferromagnetismus dünner Schichten von einem anderen Ausgangspunkt her angehen:

NEUGEBAUER⁸, HOFFMANN⁹ und MAYER-STÜNKEL¹⁰ konnten zeigen, daß meßbare Abweichungen von der Sättigungsmagnetisierung des kompakten Materials erst bei extrem dünnen Schichten auftreten. Dabei erklärte HOFFMANN die Fehler älterer Experimente¹¹, die das entgegengesetzte Ergebnis lieferten hatten. Zu der gleichen Aussage gelangten VALENTE¹² und CORCIOVEI¹³ durch eine Molekularfeldtheorie für dünne Schichten.

Die richtigen Randbedingungen des Problems berücksichtigte erstmals DÖRING¹⁴ in einer Arbeit über die (1, 0, 0)-Oberflächenorientierung beim einfach kubischen Gitter Γ_c . Bereits seine, besonders aber die im Anschluß daran für die (1, 1, 0)-Schicht des Γ_c und die (1, 0, 0)-Orientierung des raumzentriert kubischen Gitters Γ_c'' von ABBEL¹⁵ ausgeführten Rechnungen zeigen charakteristische Abweichungen der Spinwellenformen und -spektren von denjenigen, welche aus der Annahme periodischer Randbedingungen folgen. Das äußert sich zum Beispiel im Auftreten von Oberflächenzuständen. Die mit Hilfe dieser Spektren errechneten Magnetisierungen zeigen nunmehr den erwarteten Effekt: eine relativ geringe Empfindlichkeit von Magnetisierung und CURIE-Temperatur gegenüber der Schichtdicke.

⁶ M. J. KLEIN u. R. S. SMITH, Phys. Rev. **81**, 378 [1951].

⁷ S. J. GLASS u. M. J. KLEIN, Phys. Rev. **109**, 288 [1958].

⁸ C. A. NEUGEBAUER, Phys. Rev. **116**, 1441 [1959]; J. Appl. Phys., Suppl. **31**, 152 [1960].

⁹ H. HOFFMANN, Z. Angew. Phys. **13**, 149 [1961].

¹⁰ H. MAYER u. D. STÜNKEL, Naturwiss. **12**, 277 [1962].

DÖRING und ABBEL befriedigen die Randbedingungen durch eine Superpositions methode, deren Anwendbarkeit von vornherein auf einige einfache Oberflächenorientierungen beschränkt ist (und die für jede spezielle Orientierung eine gesonderte Durchführung der Rechnungen verlangt).

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, eine allgemeine Theorie der Einspinwellenzustände in dünnen ferromagnetischen Schichten beliebiger BRAVAIS-Symmetrie und Oberflächenorientierung zu entwickeln. Das führt auf die Angabe einer Differenzengleichung und eines Satzes von Gleichungen, die Ausdruck der Randbedingungen sind.

Dieses System kann im allgemeinen nur noch numerisch gelöst werden; für eine gewisse einfache Klasse von Orientierungen jedoch ist es explizit lösbar; Spektrum und Formen der in solchen dünnen Schichten existierenden Spinwellen werden angegeben und diskutiert.

In einer weiteren Arbeit sollen die physikalischen Konsequenzen aus dieser Theorie gezogen werden: Es wird gezeigt, daß die obenerwähnte Klasse der rechenbaren Fälle eine Anzahl wichtiger Oberflächenorientierungen der kubischen Gittertypen umfaßt. Insbesondere sind die von DÖRING und ABBEL untersuchten Fälle darin enthalten. Die Ergebnisse dieser Autoren werden bestätigt, sowohl bezüglich der Spektren als auch bezüglich der Magnetisierungen, die für alle erfaßten Fälle berechnet werden.

I. Das Heisenberg-Modell

Bekanntlich besteht das HEISENBERG-Modell in einer Ersetzung des Elektronenkristalls, den der Festkörper bildet, durch ein ideales Gitter lokalisierter Spins, die untereinander in Wechselwirkung stehen:

An jedem Gitterpunkt n eines BRAVAIS-Gitters sei ein Spin der Größe $S = \frac{1}{2}$ befestigt, der durch den Spinoperator \mathbf{s}_n beschrieben wird. \mathbf{s}_n genügt den üblichen Vertauschungsrelationen der PAULI-Matrizen, die wir nach Ausführung der Transformation

$$\mathbf{s}_n^\pm = \mathbf{s}_n^x \pm i \mathbf{s}_n^y \quad (1)$$

¹¹ Siehe dazu etwa die Arbeit von NEUGEBAUER⁸.

¹² L. VALENTE, Czech. J. Phys. **7**, 127, 136 [1957].

¹³ A. CORCIOVEI, Czech. J. Phys. **10**, 568 [1960].

¹⁴ W. DÖRING, Z. Naturforsch. **16 a**, 1146 [1961].

¹⁵ R. ABBEL, Z. Naturforsch. **18 a**, 371 [1963].

in der Form

$$[\mathbf{s}_n^z, \mathbf{s}_m^+] = \delta_{nm} \mathbf{s}_n^+, \quad (2a)$$

$$[\mathbf{s}_n^z, \mathbf{s}_m^-] = -\delta_{nm} \mathbf{s}_n^-, \quad (2b)$$

$$[\mathbf{s}_n^+, \mathbf{s}_m^-] = 2 \delta_{nm} \mathbf{s}_n^z, \quad (2c)$$

schreiben können.

Die Spins an verschiedenen Gitterplätzen stehen in isotroper Austauschwechselwirkung miteinander, so daß das Modell physikalisch durch den HAMILTON-Operator

$$\hat{H} = \hat{J} + H \cdot \hat{M}, \quad (3a)$$

$$\hat{J} = -\frac{1}{2} \sum_{n,m} J(m) \mathbf{s}_n \cdot \mathbf{s}_{n+m}, \quad (3b)$$

$$\hat{M} = 2m \sum_n \mathbf{s}_n^z \quad (3c)$$

beschrieben wird. Dabei ist $J(m)$ die Austauschkopplung zweier um $|\mathbf{m}|$ voneinander entfernter Spins, und setzt man $J(0) = 0$, so läuft die Summation in \hat{J} unabhängig über alle Gittervektoren \mathbf{n} und $\mathbf{n} + \mathbf{m}$ des Kristalls.

Der Operator \hat{M} stellt die z -Komponente der Gesamtmagnetisierung des Systems dar; dabei bedeutet m das magnetische Moment eines Spins, und der Term $H \cdot \hat{M}$ beschreibt die Wirkung eines in negativer z -Richtung an den Kristall angelegten homogenen Magnetfeldes. Da \hat{H} mit dem Operator \hat{M} kommutiert, lassen sich seine Eigenzustände nach den Eigenwerten von \hat{M} klassifizieren; insbesondere ist der Zustand maximalen magnetischen Moments, bei dem also sämtliche Spins in Richtung der negativen z -Achse weisen, als nichtentarteter Eigenzustand von \hat{M} auch solcher von \hat{H} . Für diesen Zustand, den wir mit $|0\rangle$ bezeichnen, gelten die Relationen

$$\mathbf{s}_n^- |0\rangle = 0; \quad \mathbf{s}_n^z |0\rangle = -\frac{1}{2} |0\rangle \quad (4)$$

und die SCHRÖDINGER-Gleichung liefert

$$\hat{H} |0\rangle = E_0 |0\rangle, \quad (5)$$

wobei E_0 bei positiver Austauschkonstante der tiefste Eigenwert des Systems ist. Über diesen Grundzustand hinaus läßt sich noch eine Gruppe angeregter Zustände von \hat{H} samt ihrem Spektrum exakt angeben.

Besteht nämlich unser System aus N Gitterpunkten, so existieren N linear unabhängige Zustände

$$|\mathbf{n}\rangle = \mathbf{s}_n^+ |0\rangle, \quad (6)$$

¹⁶ M. WORTIS, Phys. Rev. **132**, 85 [1963].

¹⁷ J. HANUS, Phys. Rev. Letters **11**, 336 [1963].

die aus $|0\rangle$ durch Umklappung des Spins am Gitterplatz \mathbf{n} entstehen. Als Eigenzustände von \hat{M} gemäß

$$\hat{M} |\mathbf{n}\rangle = -2m \cdot \frac{1}{2}(N-2) |\mathbf{n}\rangle \quad (7)$$

sind sie miteinander entartet, und es müssen demzufolge Linearkombinationen der Form

$$|\mathbf{a}\rangle = \sum_n a(n) |\mathbf{n}\rangle \quad (8)$$

existieren, die Eigenzustände von \hat{H} sind. Diese Eigenvektoren $|\mathbf{a}\rangle$ tragen den Namen Spinwellen.

Nimmt man das Gitter in allen drei Dimensionen als unendlich ausgedehnt an, so lassen sich die Koeffizienten $a(n)$ leicht bestimmen: \hat{H} ist dann translationsinvariant und die Eigenfunktionen müssen demzufolge Darstellungen der Translationsgruppe

$$|\mathbf{a}_k\rangle = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_n \exp\{i\mathbf{k}\mathbf{n}\} |\mathbf{n}\rangle \quad (8')$$

sein, wobei \mathbf{k} die Vektoren der ersten BRILLOUIN-Zone des reziproken Gitters durchläuft.

Diese Tatsache findet bekanntlich besonders bequemen Ausdruck nach dem Übergang zur Impulsdarstellung durch die Transformation

$$\mathbf{s}_k = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_n \exp\{i\mathbf{k}\mathbf{n}\} \mathbf{s}_n, \quad (9)$$

in der die Spinwellenzustände (8') als

$$|\mathbf{k}\rangle = \mathbf{s}_k^+ |0\rangle \quad (8'')$$

geschrieben werden können.

Für höhere angeregte Zustände, solche also, bei denen mehrere Spins aus ihrer Ruhelage herausgedreht sind, stellt die Diagonalisierung des HAMILTON-Operators ein schwieriges Problem dar, das erst kürzlich teilweise gelöst werden konnte^{16, 17}.

Doch beruht die Bedeutung des HEISENBERG-Modells und Spinwellenkonzeptes nun gerade darauf, daß man bereits aus dem Spektrum der Einspinwellenanregungen wichtige Aussagen über das makroskopische Verhalten des Ferromagneten gewinnen kann. Denn Spinwellen, als Quasiteilchen aufgefaßt, üben nur schwache Wechselwirkungen aufeinander aus¹⁸. Bei hinreichend tiefen Temperaturen, bei denen zusätzlich die Anregungshäufigkeiten der höheren Zustände klein sind, läßt sich das Spinwellengas mit befriedigender Genauigkeit als wechselwirkungsfreies BOSE-Gas behandeln¹⁹.

¹⁸ F. DYSON, Phys. Rev. **102**, 1217 [1956].

¹⁹ F. DYSON, Phys. Rev. **102**, 1230 [1956].

II. Ableitung der Differenzengleichung

Die dünne Schicht, der wir uns nun zuwenden wollen, bestehe aus F parallelen Netzebenen beliebiger Orientierung; in Richtung dieser Ebenen sei sie unendlich ausgedehnt. Der Ort eines Gitterpunktes \mathbf{n} ist eindeutig festgelegt durch die Angabe der Netzebene f ($f=1, \dots, F$), auf welcher er liegt, und seiner Koordinate \mathbf{q} auf dieser. Alle Gitterpunkte, die auf einer Ebene der Schicht liegen, bilden darauf ein zweidimensionales BRAVAIS-Gitter, für das wir durch

$$\mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_1 + G \mathbf{q}_2 \quad \text{für alle } \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \quad (10)$$

periodische Randbedingungen einführen wollen.

In Schichtebene ist der HAMILTON-Operator \hat{H} weiterhin translationsinvariant; in diesen Richtungen gehen wir durch

$$\mathbf{s}_{\lambda f} = \frac{1}{G} \sum_q \exp\{i \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{q}\} \mathbf{s}_{qf} \quad (11)$$

für alle (nunmehr zweidimensionalen) Vektoren $\boldsymbol{\lambda}$ aus der ersten BRILLOUIN-Zone des zum Flächengitter reziproken Gitters und alle $\mathbf{s}_{qf} \equiv \mathbf{s}_n$ zur Impulsdarstellung über. Dabei transformieren sich die Vertauschungsrelationen (2) in

$$[\mathbf{s}_{\lambda f}^z, \mathbf{s}_{\lambda+g f}^+] = -\frac{1}{G} \mathbf{s}_{\lambda+\lambda+g f}^+ \delta_{fl}, \quad (12 \text{ a})$$

$$[\mathbf{s}_{\lambda f}^z, \mathbf{s}_{\lambda+g f}^-] = -\frac{1}{G} \mathbf{s}_{\lambda+\lambda+g f}^- \delta_{fl}, \quad (12 \text{ b})$$

$$[\mathbf{s}_{\lambda f}^+, \mathbf{s}_{\lambda+g f}^-] = -\frac{2}{G} \mathbf{s}_{\lambda+\lambda+g f}^z \delta_{fl}; \quad (12 \text{ c})$$

die Gln. (4) in

$$\mathbf{s}_{\lambda f}^- |0\rangle = 0, \quad \mathbf{s}_{\lambda f}^z |0\rangle = -\frac{1}{2} G \delta_{\lambda 0} |0\rangle; \quad (13)$$

und der HAMILTON-Operator (3) lautet in dieser Darstellung

$$\hat{J} = -\frac{1}{2} \sum_{l,g} \sum_{\mathbf{x}} J(\mathbf{x}, g) \mathbf{s}_{\mathbf{x} l} \cdot \mathbf{s}_{-\mathbf{x} l+g}, \quad (14 \text{ a})$$

$$\hat{M} = 2 m G \sum_l \mathbf{s}_{0l}^z. \quad (14 \text{ b})$$

Dabei ist $J(\mathbf{x}, g)$ die FOURIER-Transformierte von $J(m)$

$$J(\mathbf{x}, g) = \sum_q J(q, g) \exp\{i \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{q}\}, \quad (15)$$

und die Summationen in (14) laufen über alle Ebenen der Schicht, alle l und g also, für die sowohl $1 \leqq l \leqq F$ als auch $1 \leqq l+g \leqq F$ gilt. Es ist für die folgenden Rechnungen bequem, sich durch Ein-

führung einer Funktion $A(g, l)$ mit

$$A(g, l) = \begin{cases} 1 & \text{für } 1 \leqq g+l \leqq F, \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (16)$$

von der expliziten Beachtung dieser Summationsbeschränkungen zu befreien. Mit ihr geht (14) in

$$\hat{J} = -\frac{1}{2} \sum_{l,g=-\infty}^{+\infty} \sum_{\mathbf{x}} A(0, l) A(g, l) J(\mathbf{x}, g) \mathbf{s}_{\mathbf{x} l} \cdot \mathbf{s}_{-\mathbf{x} l+g}, \quad (17 \text{ a})$$

$$\hat{M} = 2 m G \sum_{l=-\infty}^{+\infty} A(0, l) \mathbf{s}_{0l}^z \quad (17 \text{ b})$$

über.

Da die Vektoren

$$|\boldsymbol{\lambda}, f\rangle = \mathbf{s}_{\lambda f}^+ |0\rangle \quad (18)$$

– Zustände, bei denen auf der Ebene f eine Spinwelle mit dem Impuls $\boldsymbol{\lambda}$ angeregt ist – die zweidimensionale Translationssymmetrie auf den Netzebenen bereits darstellen, müssen die Einspinwelleneigenzustände (8) dieses Problems notwendigerweise von der Form

$$|\boldsymbol{\lambda}\rangle = \sum_f c(f) |\boldsymbol{\lambda}, f\rangle = \frac{1}{G} \sum_{f,q} c(f) \exp\{i \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{q}\} |\mathbf{q}, f\rangle \quad (19)$$

sein. Zunächst bilden wir $\hat{H}|\boldsymbol{\lambda}, f\rangle$. Dafür gilt

$$\begin{aligned} \hat{H}|\boldsymbol{\lambda}, f\rangle &= E_0 |\boldsymbol{\lambda}, f\rangle + [\hat{H}, \mathbf{s}_{\lambda f}^+] |0\rangle \\ &= (E_0 - 2 m H) |\boldsymbol{\lambda}, f\rangle \\ &\quad + \frac{1}{4} \left\{ \sum_g [A(g, f) + A(-g, f)] J(0, g) \right\} |\boldsymbol{\lambda}, f\rangle \\ &\quad - \frac{1}{4} \sum_g A(g, f) J(-\lambda, g) |\boldsymbol{\lambda}, f+g\rangle \\ &\quad - \frac{1}{4} \sum_g A(-g, f) J(\lambda, g) |\boldsymbol{\lambda}, f-g\rangle. \end{aligned} \quad (20)$$

Eine Relation für die Entwicklungskoeffizienten $c(f)$ erhalten wir daraus, wenn wir die Matrixelemente $\langle \mathbf{x}, g | \hat{H} | \boldsymbol{\lambda} \rangle$ betrachten und die Orthogonalität der Zustände $|\mathbf{x}, f\rangle$ berücksichtigen. So ergibt sich unmittelbar die Differenzengleichung

$$\epsilon_{\lambda} c(f) = (E_{\lambda} - E_0 - 2 m H) c(f)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{4} \left\{ \sum_{g=-\infty}^{+\infty} [A(g, f) + A(-g, f)] J(0, g) \right\} c(f) \\ &\quad - \frac{1}{4} \sum_{g=-\infty}^{+\infty} A(-g, f) J(-\lambda, g) c(f-g) \\ &\quad - \frac{1}{4} \sum_{g=-\infty}^{+\infty} A(g, f) J(\lambda, g) c(f+g). \end{aligned} \quad (21)$$

Diese Beziehung läßt sich weitgehend vereinfachen: Zunächst bemerken wir, daß wegen der Isotropie von $J(m)$ und der Inversionssymmetrie des Gitters aus der Definition von $J(\lambda, g)$ in (15) die Relationen

$$J(\lambda, g) = \overline{J(\lambda, -g)} = J(-\lambda, g) = J(-\lambda, -g) \quad (22)$$

folgen. Denn mit $\mathbf{n} \equiv (\mathbf{q}, g)$ ist auch $-\mathbf{n}$ ein Gittervektor und seine Zerlegung lautet

$$-\mathbf{n} \equiv (-\mathbf{q}, -g).$$

Weiterhin ersetzen wir in allen Faktoren von $\Delta(-g, f)$ in Gl. (21) g durch $-g$ und summieren anschließend über $-(-g)$. Mit diesen Operationen geht (21) in die einfache Gleichung

$$\varepsilon_\lambda c(f) = \frac{1}{2} \sum_g \Delta(g, f) \{ J(0, g) c(f) - J(\lambda, g) c(f+g) \} \quad (23)$$

über.

Für alle weiteren Untersuchungen wollen wir unser Modell auf Nächstnachbarwechselwirkungen einschränken²⁰. $J(m)$ soll also nur dann von Null verschieden sein, wenn \mathbf{m} Verbindungsvektor zweier benachbarter Gitterpunkte ist. Da sämtliche nächsten Nachbarn im Gitter gleichwertig sind, gibt es dann nur noch eine einzige Austauschkonstante J .

Die Summation in

$$J(\lambda, g) = J \cdot \Gamma_g^\lambda = J \sum_d \exp\{i\lambda \mathbf{d}\} \quad (24)$$

läuft über die zweidimensionalen Anteile derjenigen Nächstnachbarvektoren, deren Reichweite senkrecht zur Schicht g Netzebenenabstände beträgt und (23) läßt sich als

$$\varepsilon \cdot c(f) = \frac{1}{2} J \sum_g \Delta(g, f) \{ \Gamma_g^0 c(f) - \Gamma_g^\lambda c(f+g) \} \quad (25)$$

schreiben.

III. Umformung der Differenzengleichung

Bevor wir nun darangehen, diese Differenzengleichung so umzuformen, daß sie gelöst werden kann, wollen wir uns an einem einfachen Beispiel über die Bedeutung solcher Gleichungen informieren.

Setzen wir etwa $\Gamma_g^0 = \Gamma_g^\lambda = \delta_{g,1} + \delta_{g,-1}$, so erhalten wir aus (25)

$$\varepsilon c(f) = \frac{1}{2} J \left[\sum_{\substack{g=-1 \\ +1}} \Delta(g, f) \{ c(f) - c(f+g) \} \right] \quad (25')$$

Das geht für $f = -\infty, \dots, +\infty$ in die bekannte BLOCHSche Differenzengleichung

$$\varepsilon c(f) = \frac{1}{2} J [(c(f) - c(f+1)) + (c(f) - c(f-1))] \quad (26)$$

für die unendlich lange lineare Kette über, deren allgemeinste Lösung

$$c(f) = c_1 e^{ik_f f} + c_2 e^{-ik_f f} \quad (27)$$

mit beliebigem c_1, c_2 wir schon früher als Darstellung der Translationsgruppe (hier für den eindimensionalen Fall) gefunden hatten. Für die Eigenwerte der Energie ergibt sich dabei

$$\varepsilon_\nu = J(1 - \cos k_\nu). \quad (27')$$

Die k_ν genügen dabei den Beziehungen

$$k_\nu = 2\pi \nu / N; \quad \nu = [-\frac{1}{2}N], \dots, [\frac{1}{2}N-1],$$

wobei N die Grundlänge der Kette sei. Für sie wird $c(f) = c(f+N)$ angenommen, was auch als Schließen der Kette gedeutet werden kann.

Ist F hingegen endlich, so folgt (26) nur mehr für $f=2$ bis $f=F-1$, während sich für $f=1$ und $f=F$ die Beziehungen

$$\varepsilon c(1) = \frac{1}{2} J(c(1) - c(2)), \quad (26 \text{ a})$$

$$\varepsilon c(F) = \frac{1}{2} J(c(F) - c(F-1)) \quad (26 \text{ b})$$

ergeben. Jetzt beschreibt unsere Wahl der Größen $\Gamma_g^0, \Gamma_g^\lambda$ den Fall der endlich langen offenen Kette. Machen wir wieder den allgemeinen Lösungsansatz (27), so geht diesmal die Freiheit von c_1 und c_2 verloren: durch die Gln. (26 a, b) werden einerseits das Verhältnis c_2/c_1 und andererseits die Werte von k_ν und mit ihnen die Energieeigenwerte ε_ν festgelegt²¹.

Die Ausführung dieses Programms führt auf die Eigenzustände

$$c(f) = K \cos \{ (\frac{1}{2}(F+1) - f) k \} \quad (28 \text{ a})$$

für die Impulse $k_\nu = 2\nu\pi/F; \quad \nu = 0, \dots, [\frac{1}{2}F]-1$ und

$$c(f) = K \sin \{ (\frac{1}{2}(F+1) - f) k \} \quad (28 \text{ b})$$

für $k_\nu = (2\nu+1)\pi/F; \quad \nu = 0, \dots, [\frac{1}{2}(F-3)]$.

Die Lösung der Differenzengleichung (25') versieht uns also, wie im Falle der unendlich langen Kette so auch bei einer solchen von endlicher Länge, mit der vollständigen Kenntnis der Entwicklungskoeffizienten $c(f)$ und der Energien, und somit den Einspinwelleneigenzuständen des Systems und ihres Spektrums.

²⁰ Diese Einschränkung, die in sehr vielen Arbeiten über das HEISENBERG-Modell des Ferromagneten und insbesondere in sämtlichen zitierten Veröffentlichungen über Spinwellen in dünnen Schichten gemacht wird, wird durch die Annahme gerechtfertigt, daß $J(m)$ als Austauschintegral exponentiell mit der Entfernung abfällt.

²¹ Diese Argumentation, durch die auch DÖRING und ABBEL ihre Ergebnisse erhalten, ist leider nicht beliebig erweiterungsfähig, so daß wir nachher zu einem allgemeineren Lösungsverfahren greifen müssen.

Schon in diesem allereinfachsten Fall kann man sich die Rechnungen dadurch sehr erleichtern, daß man aus den Randbedingungen (26 a, b) den Eigenwert ε eliminiert. Fordern wir das Verschwinden desjenigen Terms, durch den sich (26) für $f=1$ bzw. $f=F$ von (26 a, b) unterscheidet, erhalten wir die neuen Bedingungen

$$c(1) - c(0) = 0, \quad c(F) - c(F+1) = 0, \quad (29 \text{ a, b})$$

die viel bequemer zu handhaben sind als (26 a, b).

Die Gln. (29) sind jedoch unphysikalisch, denn sie enthalten mit $c(0)$ und $c(F+1)$ die Entwicklungskoeffizienten für Netzebenen, die gar nicht mit Spins besetzt sind. In unserem Spezialfall verifiziert man die Identität der Lösungen von (26, 26 a, 26 b) einerseits und (26, 29 a, 29 b) andererseits leicht durch Einsetzen.

Wir werden jetzt die entsprechende Ersetzung — die im allgemeinen Fall das Problem überhaupt erst rechenbar gestaltet — an unserer allgemeinen Differenzengleichung (25) vornehmen und zeigen, daß sie stets zu den richtigen Ergebnissen führt.

Es sei D die größte Anzahl von Netzebenen, die bei einer speziellen Oberflächenorientierung von den Nächstnachbarvektoren überbrückt wird. Dann läuft die Summation in (25) von $-D$ bis $+D$ und in $1+D \leq f \leq F-D$ gilt für alle diese g : $A(g, f) = 1$, so daß in diesem Bereich (25) zu

$$\varepsilon c(f) = \frac{1}{2} J \sum_{g=-D}^{+D} \{I_g^0 c(f) - I_g^\lambda c(f+g)\} \quad (30)$$

wird. Physikalisch bedeutet das: Spins, die so weit von den Oberflächen entfernt sind, daß auch alle ihre nächsten Nachbarn in der Schicht liegen, verhalten sich nicht anders als im kompakten Material. Nur die Spins an Gitterplätzen in unmittelbarer Nähe von Oberflächen spüren etwas von der endlichen Dicke der Schicht. Indem wir zunächst den Definitionsbereich von (30) formal auf das Intervall $[1, F]$ erweitern und (25) von (30) subtrahieren, erhalten wir mit

$$\sum_g (1 - A(g, f)) \{I_g^0 c(f) - I_g^\lambda c(f+g)\} = 0 \quad (31)$$

eine Schar von Gleichungen, die nur für f aus $[1, D]$ oder $[F-D+1, F]$ nicht identisch verschwinden und dort $2D$ Randbedingungen für $c(f)$ liefern, die unabhängig von den Eigenwerten ε sind.

Die Erweiterung des Definitionsbereiches von (30) ist insofern rein formal, als dann auf der

rechten Seite dieser Gleichung Größen $c(f)$ für $-D+1 \leq f \leq 0$ bzw. $F+1 \leq f \leq F+D$ auftreten, denen keinerlei physikalische Bedeutung zukommt. Gemeint ist selbstverständlich, daß die Erweiterung von (30) zusammen mit den Bedingungen (31) die gleichen Eigenwerte liefert, wie die ursprüngliche Gl. (25) und in $[1, F]$, also dort, wo sie physikalisch sinnvoll sind, auch die gleichen Eigenlösungen $c(f)$; der Beweis dafür wird in Anhang I gegeben.

Unter Verwendung der Relationen (22) und einiger leichter Folgerungen daraus können wir (30) nochmals umschreiben:

$$\begin{aligned} \eta c(f) &= \left\{ \frac{2}{J} \varepsilon - \Gamma + \Gamma_0^\lambda \right\} c(f) \\ &= - \sum_{g=1}^D \{ \Gamma_g^\lambda c(f+g) + \overline{\Gamma_g^\lambda} c(f-g) \}, \end{aligned} \quad (32)$$

wobei $\Gamma = \sum_g \Gamma_g^0$ die Anzahl der nächsten Nachbarn eines inneren Gitterpunktes („Koordinationszahl“ des Kristalls) ist.

IV. Zur Lösungstheorie der Differenzengleichungen (25) und (30)

Wie in der Theorie der Differenzengleichungen²² gezeigt wird, ist die allgemeinste Lösung von (32) von der Gestalt

$$c(f) = \sum_{r=1}^{2D} c_r \exp\{i k_r f\}, \quad (33)$$

wobei die c_r willkürliche komplexe Konstanten und die $\exp\{i k_r\}$ die $2D$ Wurzeln der zu (32) gehörigen Stammgleichung sind^{23, 24}:

$$\eta = - \sum_{g=1}^D (\Gamma_g^\lambda e^{ik_g g} + \overline{\Gamma_g^\lambda} e^{-ik_g g}). \quad (34)$$

Die k_r können wir dabei als die Komponente des Spinwellenimpulses senkrecht zur Schicht deuten; diese Komponente kann im Gegensatz zu den Verhältnissen im kompakten Material bei dünnen Schichten komplex werden. In diesem Fall treten Spinwellenzustände auf, die die Form von Oberflächenwellen besitzen. Wir werden später sehen, daß ge-

²² Siehe etwa: Ch. JORDAN, Calculus of Finite Differences, Chelsea Publ. Comp., New York 1950, S. 545.

²³ In der mathematischen Theorie ist es üblich, mit komplexen Größen u zu operieren, die mit den hier verwandten durch $u = e^{ik}$ in Beziehung stehen.

²⁴ Dabei ist nur vorausgesetzt, daß die Wurzeln von (34) sämtlich verschieden sind. Diese Bedingung, die von den Koeffizienten Γ_g^0 abhängt, wird fast immer erfüllt sein, da die möglichen λ -Werte als Vektoren des reziproken Gitters vorgegeben sind.

rade diese Oberflächenzustände von wesentlichem Einfluß auf die thermodynamischen Eigenschaften der dünnen Schicht sind.

Die allgemeine Lösung der Differenzengleichung (32) ist in dieser Sprechweise eine Linearkombination von Wellen, deren Impulse zum gleichen Energiewert η — von ihm sind ja die Wurzeln von (34) abhängig — gehören. Die Gl. (34) selber hat als Funktion $\eta = \eta(k)$ die Form eines Dispersionsgesetzes.

Aus der Vielfalt der Linearkombinationen (33) sondern nun die Randbedingungen (31) diejenigen aus, die auch der Differenzengleichung (25) genügen und somit die Entwicklungskoeffizienten der Einspinwellenzustände sind: Eine Linearkombination der $2D$ in (33) auftretenden Konstanten c_v ist durch die Normierung der Zustände

$$1 = \langle \lambda | \lambda \rangle = \sum_{f,l} \langle \lambda, l | \bar{c}(l) c(f) | \lambda, f \rangle = \sum_f \bar{c}(f) c(f) \quad (35)$$

festgelegt, die übrigen $2D - 1$ linear unabhängigen ergeben sich ebenso wie die erlaubten Eigenwerte η durch Einsetzen von (33) in die Randbedingungen (31).

Berücksichtigt man die Abhängigkeit der Wurzeln von (34) von η , d. h. $k_v = k_v(\eta)$, so entstehen bei diesem Einsetzen die Gleichungen

$$0 = \sum_{v=1}^{2D} c_v \left[\sum_g (1 - \Delta(g, f)) \left\{ \Gamma_g^0 e^{i k_v(\eta) f} - \Gamma_g^\lambda e^{i k_v(\eta)(f+g)} \right\} \right], \quad (36a)$$

die wir abgekürzt schreiben wie folgt:

$$\sum_{v=1}^{2D} a_{fv}(\eta) c_v = 0, \quad f = 1, \dots, D, \quad F-D+1, \dots, F. \quad (36b)$$

Das ist ein System homogener linearer Gleichungen für die Koeffizienten c_v , das nur dann eine nichttriviale Lösung besitzt, wenn der Rang der quadratischen Matrix $(a_{fv}(\eta)) < 2D$ ist. Es muß also gelten

$$\det(a_{fv}(\eta)) = 0, \quad (37)$$

und nur solche η , für die diese Bedingung gilt, sind erlaubte Eigenwerte.

Weitere Einsicht in die Struktur des Problems können wir gewinnen, wenn wir die Differenzengleichung (25) vorübergehend als Matrizeneigenwertgleichung

$$\mathcal{H} \mathbf{c} = \varepsilon \mathbf{c} \quad (38)$$

für den F -komponentigen Vektor \mathbf{c} auffassen.

\mathcal{H} hat die Form

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} J \cdot \begin{pmatrix} H_0 & -\Gamma_0^\lambda & \dots & -\Gamma_0^\lambda \\ -\Gamma_0^\lambda & H_0 & -\Gamma_0^\lambda & \dots & -\Gamma_0^\lambda \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -\Gamma_0^\lambda & \dots & -\Gamma_0^\lambda & H_0 & -\Gamma_0^\lambda \\ -\Gamma_0^\lambda & \dots & -\Gamma_0^\lambda & -\Gamma_0^\lambda & H_0 \end{pmatrix}_{D \times F-2D} \quad (39)$$

mit den Matrixelementen

$$\mathcal{H}_{ii} = \frac{1}{2} J \left(\sum_g \Delta(g, i) \Gamma_g^0 - \Gamma_0^\lambda \right), \quad (40)$$

$$\mathcal{H}_{ik} = \begin{cases} -\frac{1}{2} J \Gamma_{k-i}^\lambda & \text{für } i \neq k, -D \leq k-i \leq +D, \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

und ist hermitesch. Bei dieser Betrachtungsweise bestimmen sich die Eigenwerte ε als Lösungen des Säkularpolynoms

$$\det(\mathcal{H} - \varepsilon \mathcal{E}) = 0. \quad (41)$$

Dieses Polynom ist von der Ordnung F und besitzt somit genau F Wurzeln $\{\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_F\}$ und genau F Eigenvektoren. Deshalb existieren auch genau F linear unabhängige Lösungen der Form (19) zu jedem Impuls λ , und da es genau G^2 solcher Impulsvektoren gibt, genau $N = G^2 \cdot F$ unabhängige Einspinwelleneigenzustände $|\lambda\rangle$.

Da die Gln. (41) und (37) nur verschiedene Lesarten des gleichen Problems sind — bei der Formulierung durch eine Differenzengleichung wird einfach die Tatsache ausgenützt, daß \mathcal{H} im Innenbereich nur von der Differenz der Spalten- und Zeilenindizes abhängt — stimmen die Spektren und Eigenfunktionen der beiden Systeme überein. Somit ist bewiesen, daß die Lösung der Differenzengleichung (30) im Verein mit den Randbedingungen (31) auf genau F unabhängige Eigenfunktionen $c(f)$ führen muß.

V. Die Einspinwellenzustände im Falle $D = 1$

Die rechnerische Durchführung des soeben entwickelten Programms stößt auf große Schwierigkeiten, welche die Angabe von Formeln für die Entwicklungskoeffizienten der Einspinwellenzustände

und deren Spektrum im allgemeinen vereiteln. Sie gelingt allerdings noch im Falle $D = 1$, für die Oberflächenorientierungen also, bei denen sich die Wechselwirkung benachbarter Spins auf benachbarte Netzebenen der Schar beschränkt.

Von den Größen Γ_g^λ sind dann nur Γ_0^λ , Γ_1^λ und Γ_{-1}^λ von Null verschieden, die Differenzengleichung (32) lautet

$$\eta c(f) = -[\Gamma_1^\lambda c(f+1) + \overline{\Gamma_1^\lambda} c(f-1)], \quad (42)$$

und die Randbedingungen (31) gehen in

$$\begin{aligned} \Gamma_1^0 c(1) - \overline{\Gamma_1^\lambda} c(0) &= 0, \\ \Gamma_1^0 c(F) - \Gamma_1^\lambda c(F+1) &= 0 \end{aligned} \quad (43)$$

über. Gehen wir mit der zweckmäßigen Definition

$$\Gamma_1^\lambda = e^{\varrho(\lambda) + i\varphi(\lambda)} \quad (44)$$

und der allgemeinen Lösung (33), die hier die Gestalt

$$c(f) = c_1 e^{i k_1 f} + c_2 e^{i k_2 f} \quad (45)$$

hat, in diese Gleichungen ein, ergeben sich für das Verhältnis c_1/c_2 die Ausdrücke

$$\begin{aligned} \frac{c_1}{c_2} &= -\frac{\Gamma_1^0 e^{ik_2} - e^{\varrho - i\varphi}}{\Gamma_1^0 e^{ik_1} - e^{\varrho - i\varphi}} \\ &= -\frac{\Gamma_1^0 - e^{\varrho + i\varphi} e^{ik_2}}{\Gamma_1^0 - e^{\varrho + i\varphi} e^{ik_1}} \cdot \frac{e^{ik_2 F}}{e^{ik_1 F}}. \end{aligned} \quad (46)$$

Durch Einsetzen dieser Zuordnungen in die Bedingungen (46) erhalten wir nun die Bestimmungsgleichungen für die mit den Randbedingungen verträglichen Impulse, nämlich

$$e^{2\varrho} \sin(s(F+1)) - 2\Gamma_1^0 e^{\varrho} \sin(sF) + \Gamma_1^{02} \sin(s(F-1)) = 0 \quad (48 \text{ a})$$

für die reellen und

$$e^{2\varrho} \sinh(t(F+1)) - (-1)^n 2\Gamma_1^0 e^{\varrho} \sinh(tF) + \Gamma_1^{02} \sinh(t(F-1)) = 0 \quad (48 \text{ b})$$

für die komplexen Spinwellenimpulse. Außerdem ergeben sich dabei die Lösungen (45) zu

$$c(f) = C e^{-i\varphi f} [\Gamma_1^0 \sin(s(f-1)) - e^{\varrho} \sin(sf)] \quad (49 \text{ a})$$

$$\text{bzw. } c(f) = C(-1)^n e^{-i\varphi f} [\Gamma_1^0 \sinh(t(f-1)) - (-1)^n e^{\varrho} \sinh(tf)]. \quad (49 \text{ b})$$

Diese Resultate lassen sich noch wesentlich vereinfachen. Zunächst bemerken wir, daß sich die Bedingung (48 a) als Produkt der Gleichungen

$$e^{\varrho} \cos(\tfrac{1}{2}s(F+1)) - \Gamma_1^0 \cos(\tfrac{1}{2}s(F-1)) = 0 \quad (50 \text{ a})$$

$$e^{\varrho} \sin(\tfrac{1}{2}s(F+1)) - \Gamma_1^0 \sin(\tfrac{1}{2}s(F-1)) = 0, \quad (50 \text{ b})$$

²⁵ Formal folgt diese Tatsache aus der Hermitezität der Matrix (39).

Weitere Information erhalten wir aus der Stammgleichung, die für den Fall $D = 1$ zu

$$\eta = -e^{\varrho} \{ e^{i(\varphi+s)} e^{-t} + e^{-i(\varphi+s)} e^t \} \quad (47)$$

$$= -2 e^{\varrho} \{ \cosh t \cdot \cos(\varphi + s) - i \sinh t \cdot \sin(\varphi + s) \}$$

wird. Dabei ist k gemäß $k = s + it$ in Real- und Imaginärteil zerlegt. Weil η als Energienenewert des Problems notwendigerweise reell ist²⁵, muß der Imaginärteil von (47) verschwinden. Es muß also entweder $t = 0$ sein oder $s' = \varphi + s = n\pi$ gelten, reellen bzw. komplexen Impulsen mit konstantem Realteil entsprechend. Diese verschiedenen Sorten von Impulsen führen zu getrennten Bereichen der Energieskala; für reelles k liegt die Energie in dem Intervall $-2e^{\varrho} \leq \eta \leq 2e^{\varrho}$ und für komplexes gilt $\eta^2 \geq 4e^{2\varrho}$. Im Falle reeller Impulse, die sich im dreidimensional ausgedehnten Gitter als die einzigen möglichen erweisen, bleibt zudem die cos-Form des Dispersionsgesetzes $\eta(k)$, die in der Blochschen Theorie gilt, erhalten.

Liegt der eine der Impulse, etwa k_1 , fest, so ergibt sich der andere, k_2 , der zu dem gleichen η gehört, sofort aus Gl. (47). Und zwar erhält man für reelles k_1 , etwa als $k_1 = s_1' - \varphi$ geschrieben, $k_2 = s_2' - \varphi = -s_1' - \varphi$ und für $k_1 = (n\pi - \varphi) + it_1$ ist $k_2 = (n\pi - \varphi) - it_1$. Die hier eingeführte Größe $s' = s + \varphi$, die das Problem symmetrischer gestaltet, wollen wir in Zukunft als s bezeichnen.

und (48 b) analog als Produkt von

$$e^{\varrho} \cosh(\tfrac{1}{2}t(F+1)) - (-1)^n \Gamma_1^0 \cosh(\tfrac{1}{2}t(F-1)) = 0 \quad (51 \text{ a})$$

und

$$e^{\varrho} \sinh(\tfrac{1}{2}t(F+1)) - (-1)^n \Gamma_1^0 \sinh(\tfrac{1}{2}t(F-1)) = 0 \quad (51 \text{ b})$$

schreiben läßt. Wie im Anhang II gezeigt wird, können wir weiterhin die Zustände (49 a) für Lösungen

von (50 a) als

$$c(f) = K \cdot e^{-i\varphi f} \cos \left[\left(\frac{F+1}{2} - f \right) s \right] \quad (52 \text{ a})$$

für Lösungen von (50 b) als

$$c(f) = K \cdot e^{-i\varphi f} \sin \left[\left(\frac{F+1}{2} - f \right) s \right] \quad (52 \text{ b})$$

und die Zustände (49 b) für Lösungen von (51 a) oder (51 b) gleicherweise durch

$$c(f) = K \cdot (-1)^n e^{-i\varphi f} \cosh \left[\left(\frac{F+1}{2} - f \right) t \right] \quad (53 \text{ a})$$

bzw.

$$c(f) = K \cdot (-1)^n e^{-i\varphi f} \sinh \left[\left(\frac{F+1}{2} - f \right) t \right] \quad (53 \text{ b})$$

darstellen.

Berücksichtigt man, daß $(F+1)/2$ die Koordinate der Mittelebene der Schicht ist (sie ist im Falle von geradem F natürlich keine Netzebene der Schar), stellen sich die Eigenlösungen $c(f)$ des Problems je nach dem Impuls als zu dieser Mittelebene symmetrische – (52 a, 53 a) – bzw. antimetrische – (52 b, 53 b) – Raum – (52) – bzw. Oberflächenzustände – (53) – dar, die noch mit einem „Torsionsfaktor“ $e^{-i\varphi f}$ multipliziert sind, falls I_1^2 keine reelle Größe ist²⁶. Dieser Faktor hat weder Einfluß auf den Energienenwert η [siehe Gl.(47)], noch auf die Wahrscheinlichkeit

$$w(f) = |c(f)|^2 = \bar{c}(f) c(f) \quad (54)$$

dafür, im Eigenzustand $|\lambda\rangle$ den Zustand $|\lambda, f\rangle$ vorzufinden, also festzustellen, daß sich bei Anregung von $|\lambda\rangle$ der umgeklappte Spin auf der Netzebene f aufhält. Im Gegensatz zu den Verhältnissen im kompakten Material ist diese Wahrscheinlichkeit in dünnen Schichten durchaus von Ebene zu Ebene verschieden; sie schwankt im Falle der Raumlösungen periodisch und fällt für die Oberflächenlösungen von den Oberflächen der Schicht zur Mitte hin ab.

VI. Diskussion der Eigenlösungen und ihres Spektrums

Für die Lösungen der Gln. (50) und (51) bilden also die Zustände (52) und (53) die richtigen Entwicklungskoeffizienten $c(f)$ der Einspinwelleneigenzustände $|\lambda\rangle$ des HEISENBERG-Operators im Falle

$D = 1$, und die exakten Eigenwerte sind nach (47) durch

$$\eta = -2 e^{\varrho(\lambda)} \cos s \quad (55 \text{ a})$$

$$\text{bzw. } \eta = -(-1)^n 2 e^{\varrho(\lambda)} \cosh t \quad (55 \text{ b})$$

gegeben. Um Aussagen über die Verteilung der Energien und die realisierten Zustände zu machen, werden wir nun Anzahl und Verteilung der Lösungen s bzw. t der Gln. (50) und (51) untersuchen. Dabei können wir uns sofort auf s bzw. $t \geq 0$ beschränken, denn diese Gleichungen sind symmetrisch zum Nullpunkt und die Lösungen $-s$, $-t$ führen zu keinen neuen Eigenwerten oder linear unabhängigen Zuständen $c(f)$.

Zunächst wenden wir uns der Diskussion der Oberflächenzustände zu. Hierbei genügt es, den Fall $n=0$ zu untersuchen, der gerades n repräsentiert. Bei ungeradem n haben die Gln. (51) – abgesehen von der unphysikalischen sinh-Lösung $t=0$ – sicher keine Lösung, da ihre linken Seiten als Summen zweier positiver Summanden nie zu Null werden können.

Nach Einführung der Größe

$$\alpha(\lambda) = e^{\varrho(\lambda)} / I_1^0 = e^{\varrho(\lambda)} / e^{\varrho(0)} \quad (56)$$

lassen sich die Gln. (51) in die für eine graphische Auswertung besonders bequeme Form

$$\mp e^{t(F-1)} = \frac{\alpha(\lambda) e^{-t-1}}{\alpha(\lambda) e^{t-1}} = A_\lambda(t) \quad (57)$$

bringen; der Variationsbereich von $\alpha(\lambda)$ ist dabei das Intervall $[0, 1]$, wie unmittelbar aus der Definition (24) folgt.

Wie die Abb. 1 zeigt, beginnt die Funktion $A(t)$ für $t=0$ im Punkte 1 und mit der Anfangssteigung

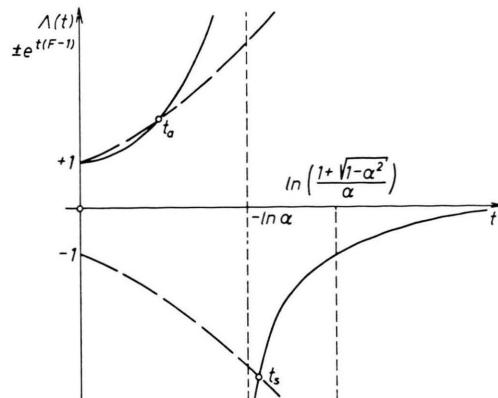


Abb. 1. Oberflächenlösungen $\pm e^{t(F-1)} = A(t)$ [siehe Gl. (57)].

²⁶ Es ist möglich, diesen Symmetriecharakter der Lösungen allgemein aus der Struktur des Problems abzuleiten (siehe Anhang III).

$2\alpha/(1-\alpha)$. Im Punkte $t = -\ln \alpha$ hat sie einen Pol mit Vorzeichenwechsel, um für $t \rightarrow \infty$ gegen -0 zu gehen. Mit der Kurve $-e^{t(F-1)}$ hat $\Lambda(t)$ für alle $\alpha > 0$ genau einen Schnittpunkt, und zwar im Intervall

$$-\ln \alpha < t < \ln(1 + \sqrt{1 - \alpha^2}) - \ln \alpha. \quad (58)$$

Die untere Grenze ist trivial, an der oberen hat $\Lambda(t)$ den Wert -1 und

$$-e^{t(F-1)} = -\left(\frac{1 + \sqrt{1 - \alpha^2}}{\alpha}\right)^{F-1},$$

was für alle α und $F > 1$ kleiner als -1 ist, so daß irgendwo im Intervall ein Schnittpunkt der beiden Funktionen liegen muß.

Die Kurven $+e^{t(F-1)}$ und $\Lambda(t)$ schneiden sich genau dann in einem Punkte $t > 0$ aus dem Intervall $0 < t < -\ln \alpha$, wenn die Anfangssteigung von $\Lambda(t)$ kleiner ist als die von $e^{t(F-1)}$, was auf folgende Bedingung führt:

$$\alpha(\lambda) < (F-1)/(F+1). \quad (59)$$

Wir haben also das Ergebnis: Für alle $\alpha > 0$ existiert eine Lösung der Gl. (51 a) und die dazugehörige symmetrische Oberflächenwelle (53 a). Eine antisymmetrische Oberflächenwelle existiert dann und nur dann, wenn die Bedingung (59) erfüllt ist.²⁷

Energetisch liegt die cosh-Welle tiefer als die sinh-Welle; sie gehört damit bei gegebenem α zum tiefsten Eigenwert des Systems. Denn aus (55 b) folgt

$$-2\Gamma_1^0 \leq \eta_{\cosh} \leq -\Gamma_1^0(1+\alpha^2) \leq \eta_{\sinh} \leq -2\alpha\Gamma_1^0, \quad (60)$$

woran außerdem ersichtlich ist, daß η für alle Werte von α endlich bleibt.

Die Gl. (50) für die Impulse der Raumzustände sind periodisch mit der Länge 2π und – je nachdem, ob F gerade oder ungerade ist – symmetrisch oder antimetrisch zum Punkte $s = \pi$. Bei der Diskussion können wir uns auf das Intervall $0 \leq s < \pi$ beschränken, da die Lösungen außerhalb dieses Intervalls notwendigerweise auf die gleichen Eigenwerte und linear abhängige Zustände führen.

²⁷ Bei unseren vorbereitenden Rechnungen für die lineare Kette haben wir keine Zustände vom sinh-cosh-Charakter, sondern nur sin-cos-Wellen gefunden. Das ist jedoch kein Widerspruch zu unseren jetzigen Ergebnissen, da die Größe α im Falle der linearen Kette stets gleich 1 ist. Die Bedingung (59) ist also unerfüllbar, die antimetrische

Es empfiehlt sich hier, (50 a) als

$$\tan\left(\frac{1}{2}sF\right) = \left(\frac{\alpha-1}{\alpha+1}\right)\cot\left(\frac{1}{2}s\right) \quad (61 \text{ a})$$

und (50 b) als

$$-\cot\left(\frac{1}{2}sF\right) = \left(\frac{\alpha-1}{\alpha+1}\right)\cot\left(\frac{1}{2}s\right) \quad (61 \text{ b})$$

zu schreiben. Der erste Faktor der rechten Seite variiert hierbei im Bereich

$$-1 \leq (\alpha-1)/(\alpha+1) \leq 0,$$

wobei die untere Grenze für $\alpha(\lambda) = 0$, die obere für $\alpha(\lambda) = 1$ erreicht wird.

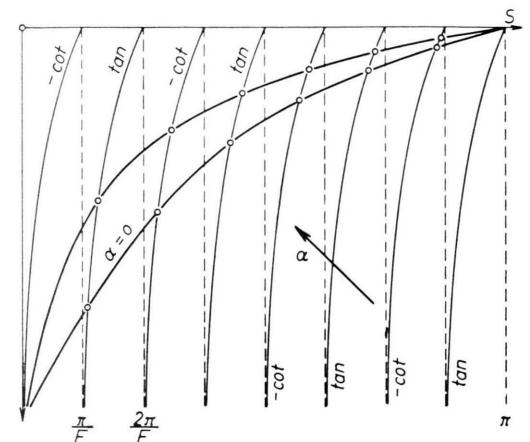


Abb. 2. Die Impulse der Raumlösungen [siehe Gl. (61)], F gerade.

Abb. 2 zeigt den Verlauf dieser Kurven für gerades F . Die Nullstellen der Funktionen $\tan(\frac{1}{2}sF)$ und $\cot(\frac{1}{2}sF)$, die äquidistant in den Abständen π/F liegen, teilen das Diagramm auf natürliche Weise in Streifen ein. Betrachten wir zunächst die inneren dieser Bereiche, die weder von $s=0$ noch $s=\pi$ begrenzt werden. In jedem dieser Intervalle hat abwechselnd entweder (61 a) oder (61 b) genau eine Lösung, die für $\alpha \rightarrow 1$ gegen die obere Begrenzung des Streifens rückt. Im Anfangsintervall treten keine cos-Lösungen auf; für den sin existiert die Lösung $s=0$, die jedoch auf einen Zustand führt, der überall verschwindet und deswegen nicht normierbar und unphysikalisch ist. Darauf hinaus kann es in die-

Oberflächenwelle existiert nie; die symmetrische hätte den Impuls $t=s=0$ und kann somit sowohl als Raum- als auch als Oberflächenzustand geschrieben werden. – Aus dem gleichen Grunde findet auch DÖRING für die (1.0.0)-Oberflächenorientierung des Gitters Γ_c nur Raumzustände.

sem Intervall noch eine sin-Lösung geben, wie man am besten an der zu (61 b) reziproken Bedingung

$$\tan\left(\frac{1}{2}sF\right) = \left(\frac{1+\alpha}{1-\alpha}\right) \tan\left(\frac{1}{2}s\right) \quad (61 \text{ b}')$$

sieht. Sie existiert, falls die Anfangssteigung von $\tan(\frac{1}{2}sF)$ kleiner ist als die von $(\frac{1+\alpha}{1-\alpha}) \tan(\frac{1}{2}s)$, also für

$$\alpha > (F-1)/(F+1). \quad (62)$$

(59) und (62) schließen einander aus; mit wachsendem $\alpha(\lambda)$ geht die antisymmetrische Oberflächenlösung in eine antisymmetrische Raumwelle über. Bei gegebenem λ liefert diese Lösung den zweitiefsten Eigenwert des Systems.

Im Endintervall $(F-1)\pi/F \leq s < \pi$ schließlich tritt überhaupt keine physikalische Lösung der Gln. (61) mehr auf. In Tab. I sind die Lösungen abgezählt und noch einmal zusammengestellt; in Übereinstimmung mit dem allgemeinen Resultat, das wir früher gewonnen hatten, treten stets genau F unabhängige Lösungen auf, so daß wir tatsächlich alle Zustände des Systems gefunden haben.

Mit der expliziten Angabe aller Einspinwellenzustände und ihres Spektrums für den Fall $D=1$ ist das Ziel der vorliegenden Arbeit erreicht. Wir haben eine allgemein gültige Differenzengleichung für die Einspinwellenzustände in dünnen Schichten beliebiger BRAVAIS-Symmetrie und Oberflächenorientierung angegeben. Ihre analytische Auswertung gelang nur in einem einfachen Sonderfall ($D=1$). Es wird das Ziel einer weiteren Veröffentlichung sein, zu zeigen, daß bereits dieser Sonderfall die wichtigsten und häufigsten Oberflächenorientierungen bei den drei kubischen Gittertypen umfaßt. Für diese Orientierungen wird die Temperatur- und Schichtdickenabhängigkeit der spontanen Magnetisierung aus dem Einspinwellenspektrum errechnet werden.

Herrn Prof. Dr. H. KOPPE danke ich für die Anregung und Förderung dieser Arbeit, Herrn Dr. G. OBERMAIR für viele nützliche Diskussionen.

Anhang I

Beweis für die Äquivalenz von (25) mit (30) und (31)

Es soll bewiesen werden, daß sich die Differenzengleichung

$$\varepsilon c(f) = \frac{1}{2} J \sum_g \Delta(g, f) \{ \Gamma_g^0 c(f) - \Gamma_g^\lambda c(f+g) \}, \quad (25)$$

$$f = 1, \dots, F$$

durch (30) und den Satz von Randbedingungen (31)

$$\varepsilon c(f) = \frac{1}{2} J \sum_g \{ \Gamma_g^0 c(f) - \Gamma_g^\lambda c(f+g) \}, \quad (30)$$

$$f = 1, \dots, F,$$

$$\sum_g (1 - \Delta(g, f)) \{ \Gamma_g^0 c(f) - \Gamma_g^\lambda c(f+g) \} = 0, \quad (31)$$

$$f = 1, \dots, D, F+1-D, \dots, F$$

ersetzen läßt, daß also die Eigenwerte ε und Eigenlösungen $c(1), \dots, c(F)$, die aus (25) einerseits und (30) und (31) andererseits folgen, identisch sind.

Hierzu fassen wir die Differenzengleichungen, wie schon in (38) geschehen, als homogene lineare Gleichungssysteme auf. Da es ohne Einfluß auf die Lösungen solcher Systeme ist, wenn man Gleichungen des Systems voneinander subtrahiert, ziehen wir nun – in Umkehr unseres Vorgehens in Ziffer III – die Gln. (31) von (30) ab.

Damit stehen nun das System (25) einerseits (F Gleichungen mit F Unbekannten) und das aus (25) und (31) gebildete andererseits ($F+2D$ Gleichungen mit $F+2D$ Unbekannten) zur Konkurrenz. In Matrixform geschrieben, lauten sie

$$\mathcal{M}(\varepsilon) \mathbf{c} = (\mathcal{H} - \varepsilon \mathcal{E}) \mathbf{c} = 0, \quad (38)$$

$$\mathbf{c} = \{c(1), \dots, c(F)\}$$

$$\text{und } \mathcal{M}'(\varepsilon) \mathbf{c}' = 0, \quad (63)$$

$$\mathbf{c}' = \{c(1-D), \dots, c(0), c(1), \dots, c(F),$$

$$c(F+1), \dots, c(F+D)\}$$

| | cosh | sinh | | sin | | cos | Σ |
|------------|------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|-----------------|----------|
| | | $\alpha < \frac{F-1}{F+1}$ | $\alpha > \frac{F-1}{F+1}$ | $\alpha < \frac{F-1}{F+1}$ | $\alpha > \frac{F-1}{F+1}$ | | |
| $F = 2n$ | 1 | 1 | 0 | $\frac{F}{2}-1$ | $\frac{F}{2}$ | $\frac{F}{2}-1$ | F |
| $F = 2n+1$ | 1 | 1 | 0 | $\frac{F-3}{2}$ | $\frac{F-1}{2}$ | $\frac{F-1}{2}$ | F |

Tab. 1.

wobei \mathcal{M}' von der Form

$$\mathcal{M}'(\varepsilon) = \left[\begin{array}{c|c|c} \mathcal{A} & \mathcal{B} & 0 \\ \hline 0 & \mathcal{M}(\varepsilon) & 0 \\ 0 & \mathcal{B}' & \mathcal{A}' \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{l} D \\ F \\ D \end{array} \right\} \quad (64)$$

ist. Da \mathcal{M}' zerfällt, gilt

$$\det \mathcal{M}'(\varepsilon) = \det \mathcal{A} \cdot \det \mathcal{M}(\varepsilon) \cdot \det \mathcal{A}'. \quad (65)$$

Nun sind die Determinanten von \mathcal{A} und \mathcal{A}' stets von Null verschieden, so daß die Forderung $\det \mathcal{M}'(\varepsilon) = 0$ äquivalent zu $\det \mathcal{M}(\varepsilon) = 0$ ist. Das ist aber die zu beweisende Identität der Eigenwerte ε . Weiterhin hängen wegen der Zerfällung von \mathcal{M}' die Gleichungen $1, \dots, F$ nur von $c(1), \dots, c(F)$ ab und sind identisch mit (38). Daraus folgt die Identität der Lösungen $c(1), \dots, c(F)$.

Die ersten und letzten D Gleichungen in (63) bestimmen die (unphysikalischen) Größen $c(1-D), \dots, c(0), c(F+1), \dots, c(F+D)$ eindeutig aus $c(1), \dots, c(F)$.

Dadurch ist die Legitimität der in Ziffer III vorgenommenen Ersetzung bewiesen.

Anhang II

Beweis der Identität zweier Gleichungen

Es soll die Umrechnung der Gl. (49 a)

$$c(f) = C e^{-i\varphi f} [\Gamma_1^0 \sin(s(f-1)) - e^\varrho \sin(sf)] \quad (49 \text{ a})$$

in die Gl. (52)

$$c(f) = K e^{-i\varphi f} \cos \left[\left(\frac{F+1}{2} - f \right) s \right], \quad (52 \text{ a})$$

$$c(f) = K e^{-i\varphi f} \sin \left[\left(\frac{F+1}{2} - f \right) s \right] \quad (52 \text{ b})$$

vorgenommen werden.

Zunächst zeigen wir

$$\frac{c_1}{c_2} = - \left(\frac{\Gamma_1^0 e^{-is} - e^\varrho}{\Gamma_1^0 e^{is} - e^\varrho} \right) = \pm e^{-i s(F+1)}. \quad (66)$$

Die Gl. (50) lassen sich aufspalten:

$$e^\varrho \{ e^{i(F+1)s/2} \pm e^{-i(F+1)s/2} \} - \Gamma_1^0 \{ e^{i(F-1)s/2} \pm e^{-i(F-1)s/2} \} = 0.$$

Das heißt

$$- \Gamma_1^0 e^{i(F-1)s/2} + e^\varrho e^{i(F+1)s/2} = \pm \Gamma_1^0 e^{-i(F-1)s/2} \mp e^\varrho e^{-i(F+1)s/2},$$

$$(-\Gamma_1^0 e^{-is} + e^\varrho) e^{i(F+1)s/2} = \mp (-\Gamma_1^0 e^{is} + e^\varrho) e^{-i(F+1)s/2}.$$

Daraus folgt aber (66). Setzt man dieses Ergebnis in die allgemeine Lösung (45) ein, ergibt sich sofort

$$c(f) = K e^{-i\varphi f} \left[\begin{array}{l} \cos \\ \sin \end{array} \right] \left[\left(\frac{F+1}{2} - f \right) s \right]. \quad (52)$$

Die Umrechnung für die Oberflächenzustände (49 b) in (53) verläuft völlig analog.

Anhang III

Zum Symmetrieharakter der Eigenlösungen

Um den allgemeinen Symmetrieharakter der Eigenlösungen $c(f)$ zu studieren, bedienen wir uns der Matrixdarstellung (38) des Problems. Durch die Definition

$$\mathbf{S} c(f) = c(F+1-f) \quad (67)$$

führen wir die Spiegelung an der Mittelebene der Schicht als Operation \mathbf{S} ein; \mathbf{S} hat dabei die Matrixdarstellung

$$\mathcal{S}_{ik} = \delta(i, F+1-k). \quad (68)$$

Da $\mathbf{S}^2 = \mathbf{E}$, also $\mathbf{S} = \mathbf{S}^{-1}$ gilt, bildet \mathbf{S} zusammen mit $\mathbf{E} = (\delta_{ik})$ eine der Inversionsgruppe isomorphe Gruppe. Transformiert man \mathcal{H} mit \mathcal{S} , so erhält man

$$(\mathcal{S} \mathcal{H} \mathcal{S})_{ik} = \mathcal{H}_{F+1-i, F+1-k}$$

und daraus folgt wegen (40)

$$\mathcal{S} \mathcal{H} \mathcal{S} = \mathcal{H}^T = \bar{\mathcal{H}}. \quad (69)$$

Nur bei reellem \mathcal{H} vertauscht also \mathcal{S} mit \mathcal{H} . In diesem Falle gilt mit $\mathcal{H}\mathfrak{c} = \varepsilon \mathfrak{c}$ auch $\mathcal{H} \mathcal{S} \mathfrak{c} = \varepsilon \mathcal{S} \mathfrak{c}$ und, wenn der Eigenwert nicht entartet ist, somit $\mathcal{S} \mathfrak{c} = \pm \mathfrak{c}$, d. h. die Lösungsvektoren sind symmetrisch oder antimetrisch in f . Ist \mathcal{H} komplex, so gelten

$$\mathcal{H} \mathfrak{c} = \varepsilon \mathfrak{c}, \quad \bar{\mathcal{H}} \bar{\mathfrak{c}} = \varepsilon \bar{\mathfrak{c}}$$

und

$$\mathcal{S} \mathcal{H} \mathfrak{c} = (\mathcal{S} \mathcal{H} \mathcal{S})(\mathcal{S} \mathfrak{c}) = \bar{\mathcal{H}}(\mathcal{S} \mathfrak{c}) = \varepsilon(\mathcal{S} \mathfrak{c}),$$

so daß mit $\bar{\mathfrak{c}}$ auch $(\mathcal{S} \mathfrak{c})$ Eigenlösung zu ε ist; im Falle der Nichtentartung folgt also hier nur

$$(\mathcal{S} \mathfrak{c}) = \alpha \bar{\mathfrak{c}} \quad \text{mit} \quad \bar{\alpha} \cdot \alpha = 1. \quad (70)$$

Anhang IV

Das asymptotische Verhalten des Spektrums

Es ist interessant zu bemerken, daß das Impulspektrum unseres Problems im Falle $F \rightarrow \infty$ keines-

wegs gegen die Werte $s_\nu = 2\pi\nu/F$ strebt, die sich in der Blochschen Spinwellentheorie im dreidimensional-periodischen BRAVAIS-Gitter ergeben. Vielmehr wird hier das asymptotische Verhalten durch die Beziehung

$$s_\nu = (\pi/F)(\nu - \sigma_a(\nu/F)) \quad (71)$$

bestimmt, wobei $\sigma_a(x)$ durch

$$\sigma_a(x) = \frac{2}{\pi} \arctan \left\{ \left(\frac{1-\alpha}{1+\alpha} \right) \cot \left(\frac{\pi x}{2} \right) \right\} \quad (72)$$

gegeben ist. Diese Funktion ist in Abb. 3 für verschiedene Werte von α gezeichnet.

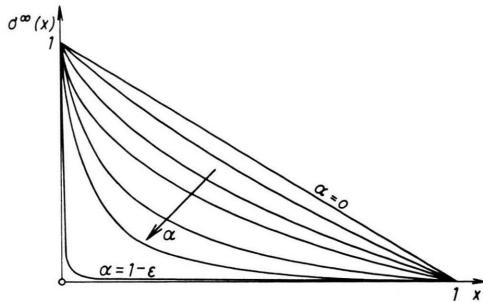


Abb. 3. Zur Lage der Raumlösungen für $F \rightarrow \infty$ [siehe Gl. (72)].

Der Unterschied im asymptotischen Verhalten, der sich für die beiden verglichenen Betrachtungsweisen zeigt, liegt daran, daß die Translationsinvarianz des Problems, aus welcher das Spektrum der Blochschen Theorie folgt, in unserem Modell der dünnen Schicht für kein noch so großes F gegeben ist.

Andererseits müssen wir natürlich verlangen, daß alle makroskopischen physikalischen Eigenschaften, die aus dem Spinwellenspektrum resultieren, die Ergebnisse, die aus der Blochschen Theorie folgen, asymptotisch erreichen. Für die spontane Magnetisierung wird die Erfüllung dieser Forderung in der erwähnten folgenden Veröffentlichung gezeigt werden.

Anhang V

Einige allgemeine Resultate für $D > 1$

Ist die Schichtoberfläche so orientiert, daß Nächst-nachbarvektoren über mehr als einen Netzebenen-abstand hinwegreichen ($D > 1$), so läßt sich die Stammgleichung (34) als

$$\begin{aligned} \eta = -2 \left\{ \sum_{g=1}^D (e^{\varrho(g)} \cosh(tg) \cos(\varphi(g) + sg)) \right. \\ \left. - i \sum_{g=1}^D (e^{\varrho(g)} \sinh(tg) \sin(\varphi(g) + sg)) \right\} \end{aligned} \quad (73)$$

schreiben, wenn man in Verallgemeinerung der Definition (44) die Beziehungen

$$\Gamma_g^\lambda = e^{\varrho(g, \lambda) + i\varphi(g, \lambda)} \quad (74)$$

einführt. Die Forderung $\text{Im}(\eta) = 0$ schränkt wie im Falle $D = 1$ auch hier die erlaubten Spinwellenimpulse auf gewisse Kurven in der komplexen k -Ebene ein. Im Falle $D = 1$ waren diese Kurven durch die reelle Achse ($t = 0$) und durch Parallelen zur imaginären Achse ($s = n\pi - \varphi$) gegeben. Im allgemeinen Falle werden sie wesentlich komplizierter: Zwar sind reelle Impulse auch dann immer möglich, die übrigen Lösungskurven $t = t(s)$ der Gleichung $\text{Im}(\eta) = 0$ aber sind nicht mehr so leicht zu überschauen. Bereits für $D = 2$ erhält man die Funktion

$$t = \text{arcosh} \left(\frac{-e^{\varrho(1)} \sin(\varphi(1) + s)}{2e^{\varrho(2)} \sin(\varphi(2) + 2s)} \right), \quad (75)$$

die in Abb. 4 für einen bestimmten Satz der Größen $\{\varrho(1), \varrho(2), \varphi(1), \varphi(2)\}$ dargestellt ist. Da diese Größen im allgemeinen Funktionen von λ sind, erhält man für jedes λ ein anderes Bild.

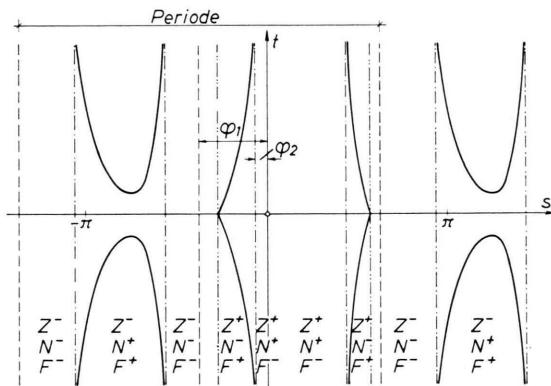


Abb. 4. Resultat für $D = 2$, Möglichkeiten für $k = s + it$, wobei $t = \text{arcosh } F = \text{arcosh}(-Z/N)$, F siehe Gl. (75).
— (sin φ₁ + s) = 0; —·—·— (sin φ₂ + 2s) = 0;
—·—·— F = +1; ————— erlaubte k -Werte.

Zu jedem Impuls k auf einer der erlaubten Kurven $t = t(s)$ gehören ein η und mit diesem — den $2D$ Wurzeln der Stammgleichung entsprechend — $2D - 1$ andere Impulse. Wie in Ziffer IV genauer erörtert, werden aus der Menge der Linearkombinationen der Funktionen $\exp\{ik_r f\}$, die (30) lösen, durch die Randbedingungen nun genau F linear unabhängige aussortiert, F „erlaubte“ Energien und mit ihnen F Sätze von Impulsen $\{k_r\}$ ausgewählt.

Da für sämtliche Reichweiten D reelle Impulse mögliche Lösungen von $\text{Im}(\eta) = 0$ sind, wird es in

allen dünnen Schichten rein periodische Spinwellenzustände geben. Über die Gestalt der übrigen kann man wegen des komplizierten Verlaufes der Kurven $t=t(s)$ kein allgemein gültiges Bild mehr gewinnen.

Wenn diese verwickelten Zusammenhänge es auch unmöglich machen, Spektrum und Eigenlösungen

des Problems für $D > 1$ formelmäßig darzustellen, so können doch die Gln. (30) und (31) stets als Ausgangspunkt für numerische Rechnungen dienen, die bei vorgegebenem Γ_g^{λ} das Spektrum der Einspinwellenanregungen in dünnen Schichten beliebiger Oberflächenorientierung liefern.

Zur spontanen Magnetisierung dünner ferromagnetischer Schichten

Von RAINER J. JELITTO *

Institut für Theoretische Physik der Universität München

(Z. Naturforschg. **19 a**, 1580—1591 [1964]; eingegangen am 31. Juli 1964)

In a preceding paper (I) the spectra of the one-spinwave-eigenstates of an ideal HEISENBERG-model for thin ferromagnetic films were derived for a special type of surface-orientations.

Now these results are applied to the cubic lattice types. First a theory is given for the calculation of certain coefficients by which the general equations of (I) are related to the special lattice types and surface orientations. It is shown that some of the most important orientations of the cubic lattice types belong to the case treated in (I).

For these orientations the dependence of the spontaneous magnetization on temperature and thickness of the film is calculated from the spinwave spectra. The formula obtained for this function was evaluated on a digital computer. The results, some of which are plotted, are discussed and compared with experimental dates.

In all cases the deviations from the magnetization of the compact material are found to be small, down to very thin films.

In einer früheren Arbeit¹ haben wir einen allgemeinen Formalismus für die Errechnung der Einspinwelleneigenzustände in einkristallinen dünnen Schichten angegeben, die nach dem HEISENBERG-Modell² durch einen Ausschnitt aus einem BRAVAIS-Gitter lokalisierter Spins idealisiert wurden. Die Oberflächen der Schicht waren dabei durch parallele Netzebenen beliebiger Orientierung gegeben; auf diesen Ebenen verwandten wir periodische Randbedingungen und gaben die Dicke der Schicht in Netzebenenabständen an. Wird die Spinwelle gemäß (I, 19)

$$|\lambda\rangle = \sum_f c(f) |\lambda, f\rangle \quad (1)$$

nach den Darstellungen des zweidimensionalen BRAVAIS-Gitters auf den einzelnen Ebenen entwickelt, so beschreibt die Funktion $c(f)$ ($f=1, \dots, F$) ihr Verhalten in Richtung der Normale zur Schicht. Diese Funktion muß sowohl eine lineare Differenzengleichung — (I, 30) — erfüllen, wie auch einem Satz von Gleichungen — (I, 31) — genügen, wel-

che Ausdruck der Tatsache sind, daß die Spins in der Nähe der Oberflächen weniger Wechselwirkungspartner besitzen als die im Inneren der Schicht. Dabei findet die spezielle Struktur des BRAVAIS-Gitters wie auch die Orientierung der Oberflächen Ausdruck in den Strukturgrößen Γ_g^{λ} — (I, 24) —, die sowohl in der Differenzengleichung wie auch in den Randbedingungen auftreten.

Für alle Orientierungen, bei denen die Nächstnachbarvektoren eines Gitterpunktes höchstens auf den nächstbenachbarten Netzebenen enden ($D=1$), — wobei nur Γ_{-1}^{λ} , Γ_0^{λ} und Γ_1^{λ} von Null verschiedenen sind —, konnten wir das Energiespektrum der Einspinwellenzustände und die Funktion $c(f)$ explizit angeben.

Wir fanden für $c(f)$ die Raumlösungen (I, 52)

$$c(f) = K \cdot e^{-i\varphi f} \begin{cases} \cos \\ \sin \end{cases} \left[\left(\frac{F+1}{2} - f \right) s \right] \quad (2)$$

für die Impulse s , die den Gln. (I, 50)

$$e^{i\varphi} \begin{cases} \cos \\ \sin \end{cases} \left[\frac{s}{2} (F+1) \right] - \Gamma_1^{\lambda} \begin{cases} \cos \\ \sin \end{cases} \left[\frac{s}{2} (F-1) \right] = 0 \quad (3)$$

* Jetzt Institut für Theoretische Physik der Universität Kiel.

¹ R. J. JELITTO, Z. Naturforschg. **19 a**, 1567 [1964], im folgenden als I zitiert.

² W. HEISENBERG, Z. Phys. **49**, 619 [1928].