

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  $I_g^\lambda$  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. Naturforsch. **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 Arbeit<sup>1</sup> haben wir einen allgemeinen Formalismus für die Errechnung der Einspinwelleneigenzustände in einkristallinen dünnen Schichten angegeben, die nach dem HEISENBERG-Modell<sup>2</sup> 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  $I_g^\lambda$  — (I, 24) —, die sowohl in der Differenzengleichung wie auch in den Randbedingungen auftreten.

Für alle Orientierungen, bei denen die Nächst-nachbarvektoren eines Gitterpunktes höchstens auf den nächstbenachbarten Netzebenen enden ( $D = 1$ ), — wobei nur  $I_{-1}^\lambda$ ,  $I_0^\lambda$  und  $I_1^\lambda$  von Null verschieden sind —, konnten wir das Energiespektrum der Einspinwellenzustände und die Funktion  $c(f)$  explizit angeben.

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

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

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

$$e^{\varphi} \begin{vmatrix} \cos \\ \sin \end{vmatrix} \left[ \frac{s}{2} (F+1) \right] - I_1^0 \begin{vmatrix} \cos \\ \sin \end{vmatrix} \left[ \frac{s}{2} (F-1) \right] = 0 \quad (3)$$

\* Jetzt Institut für Theoretische Physik der Universität Kiel.

<sup>1</sup> R. J. JELITTO, Z. Naturforsch. **19 a**, 1567 [1964], im folgenden als I zitiert.

<sup>2</sup> W. HEISENBERG, Z. Phys. **49**, 619 [1928].



genügen, sowie die Oberflächenzustände (I, 53)

$$c(f) = K \cdot e^{-i\varphi} t \left\{ \frac{\cosh}{\sinh} \right\} \left[ \left( \frac{F+1}{2} - f \right) t \right] \quad (4)$$

für die Lösungen von (I, 51)

$$e^{\varphi} \left\{ \frac{\cosh}{\sinh} \right\} \left[ \frac{t}{2} (F+1) \right] - \Gamma_1^0 \left\{ \frac{\cosh}{\sinh} \right\} \left[ \frac{t}{2} (F-1) \right] = 0. \quad (5)$$

Die Energien der Raumzustände ergaben sich zu (I, 55 a)

$$\eta = -2 e^{\varphi} \cos s, \quad (6 a)$$

die der Oberflächenlösungen zu (I, 55 b)

$$\eta = -2 e^{\varphi} \cosh t. \quad (6 b)$$

Die genauere Diskussion ergab, daß stets ein cosh-Zustand existiert, der bei gegebenem  $\lambda$  zum tiefsten Eigenwert des Systems gehört; der zweitniedrigste Eigenwert gehört zu einem antisymmetrischen Zustand, der für

$$\alpha(\lambda) = e^{\varphi(\lambda)} / \Gamma_1^0 < (F-1)/(F+1) \quad (7 a)$$

ein Oberflächenzustand ist und für

$$\alpha(\lambda) > (F-1)/(F+1) \quad (7 b)$$

in eine Raumlösung übergeht. Darüber liegen  $F-2$  Raumzustände abwechselnder Symmetrie.

Ähnliche Ergebnisse hatten bereits zuvor DÖRING<sup>3</sup> für den Sonderfall der (1, 0, 0)-Orientierung beim einfach kubischen Gitter  $\Gamma_c$  und ABBEL<sup>4</sup> für die (1, 1, 0)-Orientierung des  $\Gamma_c$  und die (1, 0, 0)-Orientierung des raumzentriert kubischen Gitters  $\Gamma_c''$  gewonnen. Doch steht einem genauen Vergleich der Ergebnisse bislang die Tatsache entgegen, daß wir noch kein Verfahren angegeben haben, um zu entscheiden, welche Oberflächenorientierungen bei gegebenem Gittertyp dem Spezialfall  $D=1$  genügen und wie sich dann – und auch im allgemeinen Fall – die Größen  $\Gamma_g^{\lambda}$  berechnen.

Darum werden wir diese Arbeit mit einer allgemeinen Transformationstheorie beginnen, die ein Rechenverfahren für diese Größen liefert. Dieser Kalkül wird anschließend auf die verschiedenen kubischen Gittertypen angewandt werden und wir werden zeigen, daß neben den Sonderfällen der genannten Autoren noch einige andere Oberflächenorientierungen die Bedingung  $D=1$  erfüllen.

Die stets geübte Praxis, die thermodynamischen Eigenschaften von Ferromagneten bei tiefen Temperaturen aus dem Spektrum der Einspinwellenanregungen zu errechnen, welche zu diesem Zweck als Bosonen aufgefaßt werden, hat durch DYSON<sup>5</sup> ihre Rechtfertigung gefunden: einerseits ist die Wechselwirkung zwischen Spinwellen schwach, so daß sie

für alle praktischen Zwecke vernachlässigt werden kann, andererseits spielen die statistischen Einschränkungen, die sich aus der Algebra der Spins ergeben, bei tiefen Temperaturen und den damit verbundenen niedrigen Besetzungszahlen der Zustände keine wesentliche Rolle.

In Ausnützung dieser Tatsachen werden wir im Hauptteil dieser Arbeit die Temperatur- und Schichtdickenabhängigkeit der Sättigungsmagnetisierung für alle Oberflächenorientierungen berechnen, die  $D=1$  erfüllen. Bei den dazu notwendigen Approximationen werden wir uns eng dem Vorgehen von ABBEL anschließen. Auch einige Argumente, die DÖRING in seiner Arbeit gegeben hat, und einige seiner mathematischen Teilergebnisse können dabei übernommen werden.

Die Auswertung der so gewonnenen Resultate erfolgte durch Funktionswertberechnung auf einer elektronischen Rechenmaschine. Einige der berechneten Kurven sind gezeichnet; die Ergebnisse für die verschiedenen Oberflächenorientierungen werden miteinander und mit experimentellen Ergebnissen verglichen und diskutiert.

## I. Transformationstheorie zur Gewinnung der Größen $\Gamma_g^{\lambda}$

Zur Berechnung der Größen  $\Gamma_g^{\lambda}$

$$\Gamma_g^{\lambda} = \sum_{\mathbf{d}(g)} \exp \{ i \lambda \mathbf{d} \}, \quad (8)$$

deren Kenntnis es zur Anwendung der in I entwickelten Theorie auf konkrete Probleme bedarf, müssen wir die Nächstnachbarvektoren des betrachteten BRAVAIS-Gitters gemäß  $\Delta = (\mathbf{d}, g)$  in ihre Komponenten  $g$  senkrecht zur Schicht und ihre Projektionen  $\mathbf{d}$  auf die Netzebenen zerlegen. Zu diesem Zweck müssen wir von dem Basissystem, in dem das Gitter gegeben ist, zu einem Koordinatensystem übergehen, dessen erste beiden Grundvektoren  $\mathbf{l}_1$  und  $\mathbf{l}_2$  die Symmetrie auf den Netzebenen darstellen und dessen dritter –  $\mathbf{l}_3$  – senkrecht zu der Schicht steht und die Länge des Abstandes benachbarter Ebenen der Schar hat.

Das BRAVAIS-Gitter, aus dem die Schicht herausgeschnitten ist, möge sich durch das reduzierte Tripel  $\{\mathbf{t}_i\}$  als  $\{n^i \mathbf{t}_i; n^i = \text{ganz}\}$  aus einer einpunktigen Basis aufbauen. Die dünne Schicht läßt sich dann

<sup>3</sup> W. DÖRING, Z. Naturforschg. **16 a**, 1146 [1961].

<sup>4</sup> R. ABBEL, Z. Naturforschg. **18 a**, 371 [1963].

<sup>5</sup> F. DYSON, Phys. Rev. **102**, 1217, 1230 [1956].

als Schar von  $F$  parallelen Netzebenen beliebiger Orientierung durch einen Vektor  $h_i \mathbf{t}^i$  des reziproken Gitters charakterisieren; die einzelnen Netzebenen dieser Schar werden durch

$$(h_1, h_2, h_3)_f \\ = \{x^i: h_i x^i = f, h_i = \text{ganz, teilerfremd}\} \quad (9) \\ f = 1, \dots, F$$

beschrieben, wobei der Abstand zweier benachbarter Ebenen durch

$$a(h_i) = 1/|\mathbf{h}| = 1/\sqrt{h_i h^i} \quad (10)$$

gegeben ist. Offenbar liegt jeder Gitterpunkt auf einer der Netzebenen, und zwar auf  $(h_1, h_2, h_3) n^i h_i$  und auf jeder Netzebene liegen Gitterpunkte. Dabei definieren alle Gitterpunkte, die auf ein und derselben Ebene liegen, auf dieser ein zweidimensionales Gitter, das sich gemäß  $\{m^\mu \mathbf{l}_\mu: m^\mu = \text{ganz}\}$  aus der Basis  $\{\mathbf{l}_\mu; \mu = 1, 2\}$  erzeugen läßt. Man kann zeigen, daß die Symmetrie dieser Gitter auf allen Netzebenen die gleiche ist und die verschiedenen ebenen Gitter gegeneinander nicht verdreht, sondern nur um einen im allgemeinen unganzzahligen Vektor  $\mathbf{q}$  verschoben sind. So genügt ein einziges System  $\{\mathbf{l}_\mu\}$  zur Charakterisierung aller Netzebenen, und alle Gitterpunkte der Schicht lassen sich durch  $n^i \mathbf{t}_i = (m^\mu + q_0^\mu \cdot f) \mathbf{l}_\mu + f \mathbf{l}_3, m^\mu = \text{ganz}, f = 1, \dots, F$  (11)

darstellen;  $\{\mathbf{q}_0^\mu\}$  ist dabei der Vektor, um den die Gitter auf zwei benachbarten Ebenen gegeneinander verschoben sind.

Die angekündigte Transformation der Koordinatensysteme soll nun durch

$$\mathbf{l}_i = T_i^k \mathbf{t}_k, \quad i, k = 1, \dots, 3 \quad (12)$$

vorgenommen werden. Die noch vorhandene Willkür in der Wahl der  $\mathbf{l}_\mu$  (entsprechend den verschiedenen Möglichkeiten, die zweidimensionalen Gitter darzustellen) beheben wir durch die Forderung, daß das System  $\{\mathbf{l}_\mu\}$  bereits reduziert sein möge. Das heißt, die Grundvektoren  $\mathbf{l}_1$  und  $\mathbf{l}_2$  sollen möglichst kurz sein und den kleinstmöglichen Winkel miteinander einschließen<sup>6</sup>.

<sup>6</sup> Durch diese Wahl werden bei der Einführung periodischer Randbedingungen auf den Ebenen die Grundgebiete so kompakt wie möglich.

<sup>7</sup>  $u^i$  und  $v^i$  lassen sich aus  $h_i u^i = h_i v^i = 0$  allgemein errechnen, wenn man das Problem zunächst auf eine inhomogene diophantische Gleichung zurückführt und diese anschließend, etwa nach dem in <sup>8</sup> angegebenen Kettenbruchverfahren löst. Für die einfachen Netzebenenscharen, die wir später untersuchen wollen, ist es jedoch viel bequemer,

Bezeichnen wir mit  $u^i$  den Gitterpunkt auf der Ebene  $(h_i)_0$ , für den der Abstand von  $n^i = 0$  ein Minimum  $> 0$  wird, und mit  $v^i$  denjenigen von  $u^i$  linear unabhängigen, der mit  $u^i$  ein Rechtssystem bildet und mit ihm den kleinstmöglichen Winkel einschließt, wobei sein Nullpunktsabstand abermals minimal wird<sup>7</sup> –

$$u^i: h_i u^i = 0; u^i \neq 0, \text{ ganz}; u^i u_i = \text{Min!}; \\ v^i: h_i v^i = 0; v^i \neq 0, \text{ ganz}; 0 < \angle(u^i, v^i) < \pi; \\ \angle(u^i, v^i) = \text{Min!}, v^i v_i = \text{Min!} \quad (13)$$

– so erhalten wir für die Transformationsmatrix  $T_i^k$  aus (12)

$$T_i^k = \begin{pmatrix} u^1 & u^2 & u^3 \\ v^1 & v^2 & v^3 \\ h^1 & h^2 & h^3 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Man überzeugt sich leicht davon, daß das so definierte System  $\{\mathbf{l}_i\}$  alle Forderungen erfüllt.

$$\text{Gemäß} \quad q^i \mathbf{l}_i = n^k \mathbf{t}_k \quad (15)$$

beschreibt  $T_i^k$  nicht nur den Übergang der alten in die neue Basis, sondern mit

$$n^k = T_i^k q^i \quad (16)$$

auch den Übergang der neuen in die alten Komponenten (wobei in Matrixschreibweise die Spalten der Matrix festzuhalten sind!). Die Rücktransformationen werden nach

$$\mathbf{t}_k = \hat{T}_k^i \mathbf{l}_i, \quad q^i = \hat{T}_k^i n^k \quad (17 \text{ a, b})$$

durch die zu  $T_i^k$  reziproke Matrix

$$T_i^k \hat{T}_k^l = \hat{T}_i^k T_k^l = \delta_i^l \quad (18)$$

besorgt;  $\hat{T}_i^k$  errechnet sich aus (18) zu

$$\hat{T}_i^k = \begin{pmatrix} \frac{v^2 h^3 - v^3 h^2}{\Delta}; \frac{u^3 h^2 - u^2 h^3}{\Delta}; h_1 \\ \frac{v^3 h^1 - v^1 h^3}{\Delta}; \frac{u^1 h^3 - u^3 h^1}{\Delta}; h_2 \\ \frac{v^1 h^2 - v^2 h^1}{\Delta}; \frac{u^2 h^1 - u^1 h^2}{\Delta}; h_3 \end{pmatrix} \quad (19 \text{ a})$$

mit

$$\Delta = \det(T_i^k) \cdot |\mathbf{h}|^2 = \{ (u^2 v^3 - u^3 v^2) h^1 \\ + (u^3 v^1 - u^1 v^3) h^2 + (u^1 v^2 - u^2 v^1) h^3 \}. \quad (19 \text{ b})$$

die  $u^i$  und  $v^i$  einfach durch Erprobung festzustellen. Das ist immer leicht möglich, zumal auch  $u^i$  und  $v^i$  teilerfremd sein müssen. Denn wären sie es nicht, so lägen auch die durch den gemeinsamen Faktor aller Komponenten gekürzten Vektoren auf  $(h_i)_0$ , aber ihre Länge wäre geringer als die der ursprünglichen, im Widerspruch zu (13).

<sup>8</sup> A. O. GELFOND, Die Auflösung von Gleichungen in ganzen Zahlen; Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1960, S. 8.

Setzen wir nun in (17 b) für die  $(n^i)$  der Reihe nach die Nächstnachbarvektoren  $\Delta$  ein, so wird

$$q^3 \equiv g, \quad (q^1, q^2) \equiv \mathbf{d}, \quad (20)$$

und die Reichweite  $D$  der Wechselwirkungen senkrecht zur Schicht bestimmt sich als

$$D = \text{Max} \{q^3: q^3 = h_k n^k; (n^k) \text{ aus } \{\Delta\}\}. \quad (21)$$

Hieraus und aus der Definition (8) lassen sich nun die  $\Gamma_g^k$  explizit errechnen.

## II. Anwendung der Transformationstheorie auf die kubischen Gitter

Mit Hilfe des soeben geschaffenen Verfahrens wollen wir nun darangehen, die drei kubischen Gittertypen daraufhin zu untersuchen, welche Oberflächenorientierungen bei ihnen die Bedingung  $D=1$  erfüllen, auf welche Orientierungen wir also die Ergebnisse von I, Abschnitt V und VI unmittelbar anwenden können.

Wir beschränken uns dabei auf die kubischen Gittertypen, einmal weil die ferromagnetischen Elemente (mit Ausnahme der bei Zimmertemperatur vorliegenden hexagonalen Kobalt-Modifikation) sämtlich von diesem Typus sind, zum anderen, weil wir hier ein Nächstnachbarwechselwirkungsmodell betrachten, das ohnehin nur für Koordinationsgitter sinnvoll erscheint.

Bei der Beschreibung der Netzebenenscharen eines kubischen Gitters geht man gerne von der Methode ab, die Komponenten des Vektors  $\mathbf{h}$  in einem Koordinatensystem anzugeben, das einer reduzierten einpunktigen Basis entspricht; vielmehr geht man von einer orthogonalen Basis aus, die nur für den einfach kubischen Kristall  $\Gamma_c$  einpunktig, für den flächenzentrierten  $\Gamma_c'$  jedoch vierpunktig und für den raumzentrierten  $\Gamma_c''$  zweipunktig ist<sup>9</sup>. In dieser Basis werden die Kristalle durch

$$\mathbf{t}_i = l_0 \mathbf{e}_i \quad (\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_k) = \delta_{ik}, \quad (22)$$

$$\Gamma_c \equiv \{n^i \mathbf{t}_i: n^i = \text{ganz}\}, \quad (23 \text{ a})$$

$$\Gamma_c' \equiv \{m^i \mathbf{t}_i = (n^i \mathbf{t}_i) + (\delta_1 d_1^i + \delta_2 d_2^i + \delta_3 d_3^i) \mathbf{t}_i: n^i = \text{ganz}; \delta_1, \delta_2, \delta_3 = 0 \text{ oder } 1\} \quad (23 \text{ b})$$

und

$$d_1^i = \frac{1}{2}(1, 1, 0), \quad d_2^i = \frac{1}{2}(1, 0, 1), \quad d_3^i = \frac{1}{2}(0, 1, 1),$$

und

$$\Gamma_c'' \equiv \{m^i \mathbf{t}_i = (n^i + \delta d^i) \mathbf{t}_i: n^i = \text{ganz}, \delta = 0 \text{ oder } 1\} \quad (23 \text{ c})$$

mit

$$d^i = \frac{1}{2}(1, 1, 1)$$

beschrieben. Stellt man die Netzebenen in dem orthogonalen System (22) dar, hat man den Vorteil, daß Netzebenenscharen  $(h_1, h_2, h_3)$ , die durch Permutation oder Vorzeichenwechsel der Komponenten  $h_1, h_2, h_3$  auseinander hervorgehen, äquivalent sind. Als Nachteil nimmt man in Kauf, daß die einzelnen Ebenen nicht mehr durch ganzzahlige Indizes beschrieben werden, solange man an der Teilerfremdheit der  $h_i$  festhält.

Für  $\Gamma_c$  gilt trivialerweise

$$h_i n^i = p = \text{ganz}, \quad (24 \text{ a})$$

für  $\Gamma_c'$  jedoch

$$h_i m^i = p = \begin{cases} \text{ganz} & \text{für } h_i = \text{ungerade,} \\ \text{halbganz} & \text{sonst} \end{cases} \quad (24 \text{ b})$$

und für  $\Gamma_c''$

$$h_i m^i = p = \begin{cases} \text{ganz} & \text{für } \sum h_i = \text{gerade,} \\ \text{halbganz} & \text{sonst.} \end{cases} \quad (24 \text{ c})$$

### Einfach kubisches Gitter $\Gamma_c$

Die Koordinationszahl  $\Gamma$  ist gleich 6. Die Nächstnachbarvektoren werden durch

$$\Delta_{(i)} = \delta_{(i)}^k \mathbf{t}_k = \begin{bmatrix} \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{pmatrix} \quad (25)$$

beschrieben. Für  $D$  folgt also aus (21)

$$D = \text{Max} |h_i|, \quad (26)$$

so daß die  $(1, 0, 0)$ -,  $(1, 1, 0)$ - und  $(1, 1, 1)$ -Orientierungen dieses Gittertyps durch  $D=1$  beschrieben werden.

### Flächenzentriert kubisches Gitter $\Gamma_c'$

Bei diesem Gittertyp ist die Koordinationszahl  $\Gamma=12$ . Die Komponenten der Nächstnachbarvektoren sind

$$\Delta_{(i)} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \pm 1 & \pm 1 & 0 \\ \pm 1 & \mp 1 & 0 \\ \pm 1 & 0 & \pm 1 \\ \pm 1 & 0 & \mp 1 \\ 0 & \pm 1 & \pm 1 \\ 0 & \pm 1 & \mp 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{pmatrix}, \quad (27)$$

und für  $D$  folgt wegen (24 b)

$$D = \begin{cases} \frac{1}{2} \text{Max}(|h_i| + |h_k|) & \text{für } h_l = \text{ungerade,} \\ \text{Max}(|h_i| + |h_k|) & \text{sonst.} \end{cases} \quad (28)$$

Demnach gehören hier nur die Netzebenenscharen  $(1, 0, 0)$  und  $(1, 1, 1)$  zu dem Falle  $D=1$ , die durch

<sup>9</sup> Die Abänderungen, die durch diesen Basiswechsel an dem Kalkül aus dem I. Abschnitt erforderlich werden, liegen auf der Hand.



$\mathbf{h} = (1, 1, 0)$  gekennzeichnete Orientierung führt bereits auf  $D = 2$ .

### Raumzentriert kubisches Gitter $\Gamma_c''$

Die Koordinationszahl ist  $\Gamma = 8$ .

Im orthogonalen Basissystem stellen sich die Nächstnachbarvektoren zu

$$\Delta_{(i)} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \pm 1 & \pm 1 & \pm 1 \\ \pm 1 & \pm 1 & \mp 1 \\ \mp 1 & \pm 1 & \pm 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{pmatrix} \quad (29)$$

dar. Wegen (24 c) erhalten wir hier für  $D$  die Beziehung

$$D = \begin{cases} \text{Max}(\sum |h_i|) & \text{für } \sum h_i = \text{ungerade,} \\ \frac{1}{2} \text{Max}(\sum |h_i|) & \text{für } \sum h_i = \text{gerade.} \end{cases} \quad (30)$$

Sie zeigt, daß für raumzentrierte Gitter die  $(1, 0, 0)$ - und  $(1, 1, 0)$ -Ebenenscharen von unseren Rechnungen erfaßt werden; die  $(1, 1, 1)$ -Orientierung gehört zu  $D = 3$ .

Die Ausführung der Transformationen (12) und (17 b) liefert uns nun die Kenntnis der Symmetrien der Flächengitter auf den Netzebenen und der Konstanten  $\Gamma_0^\lambda$ ; die Ergebnisse für die verschiedenen untersuchten Fälle sind in Tab. 1 zusammengestellt. Ordnet man die einfachsten Orientierungen eines jeden kubischen Gittertyps nach abnehmendem Abstand  $a$  zweier benachbarter Netzebenen, so erhält man

für  $\Gamma_c$ :

$$\begin{aligned} & \underline{a(1, 0, 0)} : \underline{a(1, 1, 0)} : \underline{a(1, 1, 1)} : a(2, 1, 0) : \\ & a(2, 1, 1) : a(2, 2, 1) : a(3, 1, 0) : a(3, 1, 1) : \dots \\ & = 1 : \frac{1}{\sqrt{2}} : \frac{1}{\sqrt{3}} : \frac{1}{\sqrt{5}} : \frac{1}{\sqrt{6}} : \frac{1}{3} : \frac{1}{\sqrt{10}} : \frac{1}{\sqrt{11}} : \dots; \end{aligned}$$

für  $\Gamma_c'$ :

$$\begin{aligned} & \underline{a(1, 1, 1)} : \underline{a(1, 0, 0)} : \underline{a(1, 1, 0)} : \underline{a(3, 1, 1)} : \\ & \underline{a(2, 1, 0)} : \underline{a(2, 1, 1)} : \underline{a(2, 2, 1)} : \underline{a(3, 1, 0)} : \dots \\ & = \frac{1}{\sqrt{3}} : \frac{1}{2} : \frac{1}{2\sqrt{2}} : \frac{1}{\sqrt{11}} : \frac{1}{2\sqrt{5}} : \frac{1}{2\sqrt{6}} : \frac{1}{6} : \frac{1}{2\sqrt{10}} : \dots; \end{aligned}$$

und für  $\Gamma_c''$ :

$$\begin{aligned} & \underline{a(1, 1, 0)} : \underline{a(1, 0, 0)} : \underline{a(2, 1, 1)} : \underline{a(3, 1, 0)} : \\ & \underline{a(1, 1, 1)} : \underline{a(2, 1, 0)} : \underline{a(2, 2, 1)} : \underline{a(3, 1, 1)} : \dots \\ & = \frac{1}{\sqrt{2}} : \frac{1}{2} : \frac{1}{\sqrt{6}} : \frac{1}{\sqrt{10}} : \frac{1}{2\sqrt{3}} : \frac{1}{2\sqrt{5}} : \frac{1}{6} : \frac{1}{2\sqrt{11}} : \dots. \end{aligned}$$

Die Orientierungen mit  $D = 1$  haben wir in dieser Liste unterstrichen. Es sind jeweils genau die Scharen, die zu maximalem Netzebenenabstand gehören. Diese Gesetzmäßigkeit setzt sich für höhere  $D$  fort: je kleiner der Netzebenenabstand ist, desto größer ist die Wechselwirkungsreichweite  $D$ , desto mehr Ebenen der Schar schneiden die Kugel mit dem Radius des kürzesten Atomabstandes im Gitter, auf die nach Modellannahme die Austauschwechselwirkung beschränkt sein soll.

Das ist insofern von praktischem Interesse, als die Häufigkeit des Auftretens einer Kristallfläche mit abnehmendem Netzebenenabstand ziemlich schnell kleiner wird.

Unsere Rechnungen für  $D = 1$  erfassen also nicht nur die Netzebenen mit dem größten Abstand, sondern damit auch diejenigen, die in der Natur vor allen anderen mit Abstand am häufigsten realisiert sind – oder am leichtesten hergestellt werden können.

|                              | $\mathbf{h}$ | $D$ | $a$             | $\Gamma_0^\lambda$   | $ee(\lambda) =  \Gamma_1^\lambda $  | $\Gamma_2^\lambda$ $\Gamma_3^\lambda$ | Flächengitter |
|------------------------------|--------------|-----|-----------------|--|---|---------------------------------------|---------------|
| $\Gamma_c$<br>$\Gamma = 6$   | $\{100\}$    | 1   | 1               | $2(\cos \lambda_1 + \cos \lambda_2)$                               | 1   | — —                                   | quadratisch   |
|                              | $\{110\}$    | 1   | $1/\sqrt{2}$    | $2 \cos \lambda_1$   | $2 \cos(\lambda_2/2)$   | — —                                   | rechteckig    |
|                              | $\{111\}$    | 1   | $1/\sqrt{3}$    | 0  | $\sqrt{3} + 2(\cos \lambda_1 + \cos \lambda_2 + \cos(\lambda_1 + \lambda_2))$ | — —                                   | hexagonal     |
| $\Gamma_c'$<br>$\Gamma = 12$ | $\{100\}$    | 1   | $1/2$           | $2(\cos \lambda_1 + \cos \lambda_2)$                               | $4 \cos(\lambda_1/2) \cdot \cos(\lambda_2/2)$                                 | — —                                   | quadratisch   |
|                              | $\{111\}$    | 1   | $1/\sqrt{3}$    | $2(\cos \lambda_1 + \cos \lambda_2 + \cos(\lambda_1 + \lambda_2))$ | $\sqrt{3} + 2(\cos \lambda_1 + \cos \lambda_2 + \cos(\lambda_1 + \lambda_2))$ | — —                                   | hexagonal     |
|                              | $\{110\}$    | 2   | $1/(2\sqrt{2})$ | $2 \cos \lambda_1$   | $4 \cos(\lambda_1/2) \cdot \cos(\lambda_2/2)$                                 | 1 —                                   | rechteckig    |
| $\Gamma_c''$<br>$\Gamma = 8$ | $\{100\}$    | 1   | $1/2$           | 0  | $4 \cos(\lambda_1/2) \cdot \cos(\lambda_2/2)$                                 | — —                                   | quadratisch   |
|                              | $\{110\}$    | 1   | $1/\sqrt{2}$    | $2(\cos \lambda_1 + \cos \lambda_2)$                               | $2  \cos(\frac{1}{2}(\lambda_1 - \lambda_2)) $                                | — —                                   | rhombisch     |
|                              | $\{111\}$    | 3   | $1/(2\sqrt{3})$ | 0  | $\sqrt{3} + 2(\cos \lambda_1 + \cos \lambda_2 + \cos(\lambda_1 + \lambda_2))$ | 0 1                                   | hexagonal     |

Tab. 1.

### III. Näherungen für das Eigenwertspektrum

Nachdem wir nun die Größen  $\Gamma_g^\lambda$  für sämtliche von  $D=1$  erfaßten Oberflächenorientierungen der kubischen Gittertypen berechnet haben, kennen wir jetzt auch die Spektren der Einspinwellenzustände, die aus (I, 21) und (6) zu

$$E_{\lambda\nu} = 2mH + \frac{1}{2}J(\Gamma - \Gamma_0^\lambda - 2e^{q(\lambda)} \cdot \begin{pmatrix} \cosh t_\nu(\lambda) \\ \cos s_\nu(\lambda) \end{pmatrix}) \quad (31)$$

folgen, und können sie dazu benützen, Aussagen über das thermodynamische Verhalten der untersuchten ferromagnetischen Schichten zu gewinnen. Von besonderem Interesse ist dabei das Tieftemperaturverhalten und die Schichtdickenabhängigkeit der spontanen Magnetisierung

$$M(T) = \frac{\text{Sp}(\hat{M} \exp\{-\tau \hat{H}\})}{\text{Sp}(\exp\{-\tau \hat{H}\})}, \quad \tau = 1/kT, \quad (32)$$

wobei  $\hat{M}$ , wie in (I, 3c) definiert, den Operator für die  $z$ -Komponente der Magnetisierung darstellt.

Bei der bei tiefen Temperaturen gerechtfertigten<sup>5</sup> Vernachlässigung der Spinwellenwechselwirkungen geht (32) in

$$M(T) = m \left( N - 2 \sum_{\langle E \rangle} \frac{1}{e^{\tau E} - 1} \right) \quad (33)$$

über, wobei die Summation über das Spektrum der Einspinwellenzustände läuft.  $N$  ist wieder die Anzahl der Spins im gesamten Bereich und  $m$  das magnetische Moment eines Spins. Im Falle des isotropen Flächengitters führen, wie DÖRING<sup>10</sup> gezeigt hat, superparamagnetische Schwankungen des Magnetisierungsvektors zu einer logarithmischen Divergenz der in (33) auftretenden Summe, welche vortäuscht, das Flächengitter könnte nicht ferromagnetisch sein. Die einfachste Möglichkeit, diese Schwierigkeit zu umgehen, besteht in der Einführung eines endlichen äußeren Magnetfeldes, welches eine bestimmte Raumrichtung energetisch auszeichnet und so die superparamagnetischen Schwankungen unterdrückt. Die Summe in (33) ist mit den Energien (31) geschlossen nicht ausführbar, zumal die Spinwellenimpulse in Richtung der Schichtebennormale als Lösungen der transzendenten Gln. (3) bzw. (5) – abgesehen vom einfachen Fall  $\Gamma_c(1, 0, 0)$  – analytisch nicht mehr auszudrücken sind. Wir müssen uns mit Näherungen für sie begnügen. Zunächst wird die Energie nach Potenzen der Spinwellen-

impulse entwickelt. Für kompaktes Material und nicht zu hohe Temperaturen stellt bereits die Entwicklung bis zur zweiten Ordnung eine brauchbare Näherung dar, da das BLOCHSche<sup>11</sup> Dispersionsgesetz eine cos-Funktion ist und der cos in der Nähe seines Maximums – also für die tiefen Eigenwerte, die bei niedrigen Temperaturen allein zu wesentlichen Beiträgen in der Zustandssumme führen – durch eine Parabel ganz gut angenähert wird.

Bei unseren Rechnungen liegen die Verhältnisse nicht ganz so günstig. Wie Tab. 1 zeigt, treten in den einzelnen Summanden der Energie (31) neben cos-Funktionen zuweilen auch Wurzeln und Beträge von solchen auf. Für diese ist die Anschmiegung der Parabeln weit weniger gut. Das ist gleichbedeutend damit, daß die obere Temperaturgrenze, für die die Temperaturabhängigkeit der spontanen Magnetisierung noch gut wiedergegeben wird, weiter absinkt.

Dennoch wollen wir uns im folgenden einerseits um der rechnerischen Einfachheit willen und andererseits um unmittelbaren Anschluß an die Rechnungen von ABBEL<sup>4</sup> zu gewinnen, auf quadratische Approximationen beschränken.

In dieser Näherung lassen sich die Energien (31) in der Form

$$E_{\lambda\nu} = 2mH + \frac{1}{2}J \sum_{i,k}^2 a_{ik} \lambda_i \lambda_k + \frac{1}{2}Jb \cdot \begin{pmatrix} (+s_\nu^2) \\ (-t_\nu^2) \end{pmatrix} \quad (34)$$

schreiben, wobei  $a_{ik}$  eine symmetrische  $2 \times 2$ -Matrix und  $b$  eine Konstante ist.

Für die  $s_\nu$  und  $t_\nu$  machen wir die bereits von ABBEL verwandten Näherungen:

Die Impulse der reinen Raumwellenzustände ersetzen wir durch ihre Grenzwerte für  $\lambda=0$ , nämlich  $s_\nu = (\pi/F) \nu$ ;  $\nu=2, \dots, F-1$ , die Impulse des cosh-Zustandes (4) und des sinh – sin-Zustandes (4 bzw. 2) werden in  $\lambda$  quadratisch approximiert. Da sich  $\alpha(\lambda) = e^q/T_1^0$  in zweiter Ordnung als

$$\alpha(\lambda) \approx 1 - \sum_{i,k} b_{ik} \lambda_i \lambda_k \quad (35)$$

darstellt, ergibt die Entwicklung der Eigenwertgleichung (5) für den Impuls der symmetrischen Oberflächenwelle die Beziehung

$$t_s^2 = \frac{2}{F} \sum_{i,k} b_{ik} \lambda_i \lambda_k. \quad (36)$$

Der Zustand zum zweitniedrigsten Eigenwert  $\eta$  existiert nach (7b) für  $\lambda=0$  als Raumwelle. Um die Variation dieses Eigenwertes in der Umgebung von

<sup>10</sup> W. DÖRING, Z. Naturforschg. **16 a**, 1008 [1961].

<sup>11</sup> F. BLOCH, Z. Phys. **61**, 206 [1930].

$\lambda=0$  zu erfassen, müssen wir demzufolge Gl. (5) um den Punkt  $s=\pi/F$  entwickeln. Die Vernachlässigung aller Glieder höherer als zweiter Potenz führt hier auf die Gleichung

$$s^2 = \left(\frac{\pi}{F}\right)^2 - \frac{2\pi}{F^2} \cot\left(\frac{\pi}{2F}\right) \sum_{i,k} b_{ik} \lambda_i \lambda_k. \quad (37)$$

Mit diesen Approximationen lassen sich die Energien (31) nun in einer Form schreiben, mit der wir im folgenden weiterrechnen können:

$$E_{\lambda\nu} = 2mH + \frac{1}{2}J \sum_{i,k} a_{ik} \lambda_i \lambda_k + \frac{1}{2}Jb(\pi/F)^2 \nu^2 \quad (38a) \\ (\nu=2, \dots, F-1)$$

für die Raumwellen,

$$E_{\lambda s} = 2mH + \frac{1}{2}J \sum_{i,k} c_{ik} \lambda_i \lambda_k \quad (38b)$$

für die symmetrische Oberflächenwelle, und

$$E_{\lambda a} = 2mH + \frac{1}{2}Jb(\pi/F)^2 + \frac{1}{2}J \sum_{i,k} d_{ik} \lambda_i \lambda_k \quad (38c)$$

für den antisymmetrischen  $\sin - \sinh$ -Zustand.

In Tab. 2 sind diese Energien, wie sie sich für die verschiedenen betrachteten Gittertypen und Oberflächenorientierungen errechnen, zusammengestellt.

#### IV. Die Berechnung der Sättigungsmagnetisierung

Mit den Approximationen (38) für die Energieeigenwerte wollen wir nun die Summe in (33) ausführen. Zunächst können wir schreiben

$$S(T) = \sum_{\{E\}} \frac{1}{\exp\{\tau E\} - 1} = \sum_{\lambda_i = -\pi}^{+\pi} \left\{ \sum_{\nu=2}^{F-1} \frac{1}{\exp\{\tau E_{\lambda\nu}\} - 1} + \frac{1}{\exp\{\tau E_{\lambda s}\} - 1} + \frac{1}{\exp\{\tau E_{\lambda a}\} - 1} \right\}, \quad (39)$$

bzw. nach Vertauschung der Summationen

$$S(T) = \sum_{\nu=2}^{F-1} S_\nu + S_s + S_a. \quad (40)$$

Es ist zweckmäßig, an dieser Stelle die Größen

$$\Theta = kT/J = 1/(J\tau), \quad \gamma = 2mH\tau, \quad (41a, b)$$

$$\delta^2 = (2\pi^2/G^2) J\tau = (2\pi^2/G^2) (1/\Theta), \quad (41c)$$

$$\beta^2 = \frac{1}{2}J(\pi/F)^2 = (\pi/F)^2 (1/2\Theta) \quad (41d)$$

einzuführen. Die Komponenten der Vektoren  $\lambda$  lassen sich nach Einführung der Periodizitätslänge  $G$  als

$$\lambda_i = (2\pi/G) \kappa_i; \quad \kappa_i = \text{ganz}, \quad -G/2 < \kappa_i \leq +G/2 \quad (42)$$

darstellen.

Setzt man alle diese Größen und die Energien aus (38) in (40) ein, erhält man

$$S_\nu = \sum_{\kappa_i, \kappa_k} \frac{1}{\exp\{\gamma + \beta^2 b \nu^2 + \delta^2 \sum a_{ik} \kappa_i \kappa_k\} - 1}, \quad (43a)$$

$$S_s = \sum_{\kappa_i, \kappa_k} \frac{1}{\exp\{\gamma + \delta^2 \sum c_{ik} \kappa_i \kappa_k\} - 1}, \quad (43b)$$

$$S_a = \sum_{\kappa_i, \kappa_k} \frac{1}{\exp\{\gamma + \beta^2 b + \delta^2 \sum d_{ik} \kappa_i \kappa_k\} - 1}. \quad (43c)$$

Die Summationen über alle ganzen  $\kappa$  aus

$$-G/2 < \kappa \leq +G/2$$

lassen sich, wie DÖRING<sup>3</sup> ausführlich begründet hat, durch Integrationen über die Ebene  $-\infty < \kappa_i < +\infty$  ersetzen. Vor der Ausführung dieser Integrationen führen wir Variablentransformationen

$$Q_i = \sum_k A_{ik}^{(r,s,a)} \kappa_k, \quad \kappa_k = \sum_i B_{ik}^{(r,s,a)} Q_i \quad (44)$$

so aus, daß sich die Formen im Nenner der Integranden transformieren, wie  $\sum a_{ik} \kappa_i \kappa_k$  nach

$$\sum a_{ik} \kappa_i \kappa_k = Q_1^2 + Q_2^2. \quad (45)$$

Die Funktionaldeterminanten dieser Transformationen wollen wir der Reihe nach  $\Delta_r, \Delta_s, \Delta_a$  nennen. Schreibt man die Gln. (44) in Matrixschreibweise mit  $a_{ik} = (a)_{ik}$  und  $B_{ik} = (\mathcal{B})_{ik}$ , erhält man

$$\mathbf{x}^T \mathbf{a} \mathbf{x} = \mathbf{p}^T \mathcal{B}^T \mathbf{a} \mathcal{B} \mathbf{p} = \mathbf{p}^T \cdot \mathbf{p} \quad (46)$$

so daß

$$\mathcal{B}^T \cdot \mathbf{a} \cdot \mathcal{B} = \mathcal{E} \quad (47)$$

sein muß. Also folgt für die Determinanten

$$|\mathcal{B}|^2 \cdot |\mathbf{a}| = 1, \quad (48)$$

und da nach (44)

$$\partial(\kappa_1, \kappa_2) / \partial(Q_1, Q_2) = \Delta = |\mathcal{B}| \quad (49)$$

ist, erhalten wir schließlich

$$\Delta_r = (\det(a_{ik}))^{-1/2} \quad (50a)$$

und analog für die Determinanten  $\Delta_a$  und  $\Delta_s$

$$\Delta_s = (\det(c_{ik}))^{-1/2}, \quad \Delta_a = (\det(d_{ik}))^{-1/2}. \quad (50b, c)$$

|              | $h$   | $E_{\lambda\nu} - 2mH$  | $E_{\lambda s} - 2mH$  | $E_{\lambda a} - 2mH$   | $b$ | $\Delta_\nu$         | $\Delta_s$                 | $\Delta_a$               |
|--------------|-------|---|--|---|-----|----------------------|----------------------------|--------------------------|
| $\Gamma_c$   | {100} | $\frac{1}{2} J [(\lambda_1^2 + \lambda_2^2) + s_\nu^2]$   | $\leftarrow \nu = 0$<br>$\frac{1}{2} J \left[ \lambda_1^2 + \frac{\lambda_2^2}{2} (1 - 1/F) \right]$                                 | $\leftarrow \nu = 1$<br>$J(\pi/F)^2 + \frac{1}{2} J \left\{ \lambda_1^2 + \frac{\lambda_2^2}{2} (1 - A) \right\}$                     | 1   | 1                    | 1                          | 1                        |
|              | {110} | $\frac{1}{2} J \left[ \left( \lambda_1^2 + \frac{\lambda_2^2}{2} \right) + 2s_\nu^2 \right]$            | $\frac{1}{2} J \left[ \lambda_1^2 + \frac{\lambda_2^2}{2} (1 - 1/F) \cdot (\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_1 \lambda_2) \right]$ | $\frac{3}{2} J(\pi/F)^2 + \frac{1}{2} J \left\{ \frac{2}{3} (1 - A) \cdot (\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_1 \lambda_2) \right\}$ | 2   | $\sqrt{2}$           | $\sqrt{\frac{2}{1 - 1/F}}$ | $\sqrt{\frac{2}{1 - A}}$ |
|              | {111} | $\frac{1}{2} J \left[ \frac{2}{3} (\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_1 \lambda_2) + 3s_\nu^2 \right]$ | $\frac{1}{2} J \cdot \frac{2}{3} (1 - 1/F) \cdot (\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_1 \lambda_2)$                                  | $\frac{3}{2} J(\pi/F)^2 + \frac{1}{2} J \left\{ \frac{2}{3} (1 - A) \cdot (\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_1 \lambda_2) \right\}$ | 3   | $\sqrt{3}$           | $\sqrt{\frac{3}{1 - 1/F}}$ | $\sqrt{\frac{3}{1 - A}}$ |
| $\Gamma'_c$  | {100} | $\frac{1}{2} J [2(\lambda_1^2 + \lambda_2^2) + 4s_\nu^2]$   | $\frac{1}{2} J (2 - 1/F) \cdot (\lambda_1^2 + \lambda_2^2)$  | $2J(\pi/F)^2 + \frac{1}{2} J \{ (2 - A) \cdot (\lambda_1^2 + \lambda_2^2) \}$   | 4   | $\frac{1}{2}$        | $\frac{1}{2 - 1/F}$        | $\frac{1}{2 - A}$        |
|              | {111} | $\frac{1}{2} J \left[ \frac{8}{3} (\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_1 \lambda_2) + 3s_\nu^2 \right]$ | $\frac{1}{2} J \cdot \frac{8}{3} (4 - 1/F) \cdot (\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_1 \lambda_2)$                                  | $\frac{3}{2} J(\pi/F)^2 + \frac{1}{2} J \left\{ \frac{8}{3} (4 - A) \cdot (\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_1 \lambda_2) \right\}$ | 3   | $\frac{\sqrt{3}}{4}$ | $\frac{\sqrt{3}}{4 - 1/F}$ | $\frac{\sqrt{3}}{4 - A}$ |
| $\Gamma''_c$ | {100} | $\frac{1}{2} J [(\lambda_1^2 + \lambda_2^2) + 4s_\nu^2]$  | $\frac{1}{2} J (1 - 1/F) \cdot (\lambda_1^2 + \lambda_2^2)$  | $2J(\pi/F)^2 + \frac{1}{2} J \{ (1 - A) \cdot (\lambda_1^2 + \lambda_2^2) \}$   | 4   | 1                    | $\frac{1}{1 - 1/F}$        | $\frac{1}{1 - A}$        |
|              | {110} | $\frac{1}{2} J \left[ \frac{2}{3} (\lambda_1^2 + \lambda_2^2 - \lambda_1 \lambda_2) + 2s_\nu^2 \right]$ | $\frac{1}{2} J \left\{ \frac{2}{3} (3 - 1/F) (\lambda_1^2 + \lambda_2^2) - (1 - 1/F) \lambda_1 \lambda_2 \right\}$                   | $J(\pi/F)^2 + \frac{1}{2} J \left\{ \frac{2}{3} (3 - A) \cdot (\lambda_1^2 + \lambda_2^2) - (1 - A) \lambda_1 \lambda_2 \right\}$     | 2   | $\frac{1}{\sqrt{2}}$ | $\frac{1}{\sqrt{2 - 1/F}}$ | $\frac{1}{\sqrt{2 - A}}$ |

Tab. 2.  $A = (\pi/F^2) \cdot \cot(\frac{1}{2} \pi/F)$ .

Damit errechnen sich die Summen (43) nun zu

$$S_\nu = \Delta_\nu \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varrho_1 d\varrho_2}{\exp \{ \gamma + b \beta^2 \nu^2 + \delta^2 (\varrho_1^2 + \varrho_2^2) \} - 1} \quad (51a)$$

$$= -(\pi/\delta^2) \Delta_\nu \log(1 - \exp\{-\gamma - \beta^2 b \nu^2\}),$$

$$S_s = \Delta_s \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varrho_1 d\varrho_2}{\exp \{ \gamma + \delta^2 (\varrho_1^2 + \varrho_2^2) \} - 1} \quad (51b)$$

$$= -(\pi/\delta^2) \Delta_s \log(1 - \exp\{-\gamma\}),$$

$$S_a = \Delta_a \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varrho_1 d\varrho_2}{\exp \{ \gamma + \beta^2 b + \delta^2 (\varrho_1^2 + \varrho_2^2) \} - 1} \quad (51c)$$

$$= -(\pi/\delta^2) \Delta_a \log(1 - \exp\{-\gamma - \beta^2 b\}).$$

Diese Ausdrücke enthalten als einzige Parameter, die von der Struktur des speziellen Problems abhängen, die Konstanten  $\Delta_\nu$ ,  $\Delta_s$ ,  $\Delta_a$  und  $b$ . Auch diese Größen sind in Tab. 2 angegeben.

Die Summen  $S_\nu$  und  $S_a$  sind im Punkte  $\gamma = 0$  analytisch; wir können sie in eine Potenzreihe nach  $\gamma$  entwickeln, die wir nach dem linearen Gliede abbrechen dürfen, da für nicht zu großes  $H$  die Größe  $\gamma \ll 1$  ist. Die Rechnung ergibt

$$S_\nu = -\frac{\pi \Delta_\nu}{\delta^2} \left\{ \log(1 - e^{-\beta^2 b \nu^2}) + \frac{\gamma}{\exp \{ \beta^2 b \nu^2 \} - 1} \right\}, \quad (52a)$$

$$S_a = -\frac{\pi \Delta_a}{\delta^2} \left\{ \log(1 - e^{-\beta^2 b}) + \frac{\gamma}{\exp \{ \beta^2 b \} - 1} \right\}. \quad (52b)$$

Die Summe  $S_s$  hat für  $\gamma = 0$  eine Singularität; sie ist verantwortlich für die logarithmische Divergenz der Integrale, die auftritt, wenn man das äußere Feld  $H$  gleich Null setzt. Für  $S_s$  können wir mit guter Genauigkeit schreiben

$$S_s = -(\pi \Delta_s / \delta^2) \{ \log \gamma - \gamma/2 \}. \quad (53)$$

Der nächste Schritt auf dem Wege zur Berechnung der Funktion  $S(T)$  ist die Bestimmung der Summe  $S_R = \sum_{\nu=2}^{F-1} S_\nu$ . Wir benutzen hierzu ein Ergebnis von DÖRING<sup>3</sup>, dessen Voraussetzungen auch in unserem Fall erfüllt sind.

Für hinreichend große  $\beta$ , also kleine Schichtdicken  $F$  und tiefe Temperaturen, wird die Summe durch ihre ersten Summanden sehr gut approximiert. Für kleine  $\beta$ , also höhere Temperaturen und dickere Schichten, erhält man mit Hilfe der EULERSCHEN



Summenformel die Näherungen

$$\sum_r \log(1 - \exp\{-\beta^2 b \nu^2\}) = \log\left(\frac{2\pi}{\beta \sqrt{b}}\right) - \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \sqrt{\frac{\pi}{b}} \cdot \frac{1}{2\beta}, \quad (54a)$$

$$\sum_1 \frac{1}{\exp\{\beta^2 b \nu^2\} - 1} = \frac{\pi^2}{6\beta^2 b} + \frac{1}{4} + \zeta\left(\frac{1}{2}\right) \sqrt{\frac{\pi}{b}} \cdot \frac{1}{2\beta}. \quad (54b)$$

Der Beitrag, der in (54) von den Summanden  $F \leq \nu < \infty$  herrührt, wird dabei vernachlässigbar klein, da wegen  $\Theta \ll 1$  der Ausdruck

$$\frac{M(T)}{M(0)} = 1 + \frac{\Theta}{\pi F} \left[ \Delta_r \log(1 - \exp\{-4b\beta^2\}) + \Delta_r \log(1 - \exp\{-9b\beta^2\}) + \Delta_a \log(1 - \exp\{-\beta^2 b\}) \right] + \Delta_s \log \gamma + \gamma \left[ \frac{\Delta_r}{\exp\{4\beta^2 b\} - 1} + \frac{\Delta_r}{\exp\{9\beta^2 b\} - 1} + \frac{\Delta_a}{\exp\{\beta^2 b\} - 1} - \frac{\Delta_s}{2} \right] \quad (57a)$$

für  $F \geq 4$  und großes  $\beta$ ,

$$\frac{M(T)}{M(0)} = 1 + \frac{\Theta}{\pi F} \left\{ \left[ \Delta_r \log\left(\frac{2\pi}{\beta \sqrt{b}}\right) - \Delta_r \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \sqrt{\frac{\pi}{b}} \cdot \frac{1}{2\beta} + (\Delta_a - \Delta_r) \log(1 - \exp\{-\beta^2 b\}) \right] + \Delta_s \log \gamma + \gamma \left[ \frac{\Delta_r \pi^2}{6\beta^2 b} + \frac{\Delta_r}{4} - \frac{\Delta_s}{2} + \Delta_r \zeta\left(\frac{1}{2}\right) \sqrt{\frac{\pi}{b}} \cdot \frac{1}{2\beta} + (\Delta_a - \Delta_r) \frac{1}{\exp\{\beta^2 b\} - 1} \right] \right\} \text{ für kleines } \beta. \quad (57b)$$

## V. Auswertung und Diskussion der Ergebnisse aus IV

Die Ergebnisse (57) wurden auf einer elektronischen Rechenmaschine<sup>12</sup> ausgewertet. Zu diesem Zweck führen wir, wie schon DÖRING und ABBEL, eine Transformation auf die relative Temperatur  $T/T_C$  ( $T_C$  = CURIE-Temperatur)

$$\Theta = \Lambda(T/T_C) \quad (58)$$

durch. Die Proportionalitätsfaktoren  $\Lambda$  wurden einer Arbeit von RUSHBROOKE und WOOD<sup>13</sup> entnommen; sie sind für die verschiedenen Gittertypen<sup>14</sup>:

|           | $\Gamma_c$ | $\Gamma_c'$ | $\Gamma_c''$ |
|-----------|------------|-------------|--------------|
| $\Lambda$ | 0,85       | 2,075       | 1,3          |

Von dem äußeren Magnetfeld hängt die Magnetisierung für nicht zu große Feldstärken nur schwach ab; der Wert für  $\gamma$  wurde deshalb universell zu  $\gamma = 4 \cdot 10^{-6}/\Theta$  festgelegt. Das entspricht in unserem Falle Feldstärken von der Größenordnung  $H \cong 20$  Oe.

Zur Errechnung der Magnetisierung wurden über

$$\beta^2 b \nu^2 = \frac{1}{2} \pi^2 b / \Theta$$

für  $\nu \sim F$  bereits sehr groß ist.

Mit diesen Näherungen und unter Berücksichtigung der Beziehung

$$\frac{2}{N} \cdot \frac{\pi}{\delta^2} = \frac{2}{G^2 F} \cdot \frac{\pi}{2\pi^2} \cdot G^2 \Theta = \frac{\Theta}{\pi F} \quad (55)$$

erhält man schließlich für die Temperaturabhängigkeit der spontanen Magnetisierung

$$M(T)/M(0) = 1 - (2/N) S(T) = 1 - (2/N) (S_R + S_s + S_a) \quad (56)$$

die Formeln

das gesamte Temperaturintervall  $0 < T/T_C \leq 0,7$  sowohl Formel (57a) als auch Gl. (57b) herangezogen. Die numerischen Ergebnisse zeigen, daß sich die Gültigkeitsbereiche der beiden Näherungen

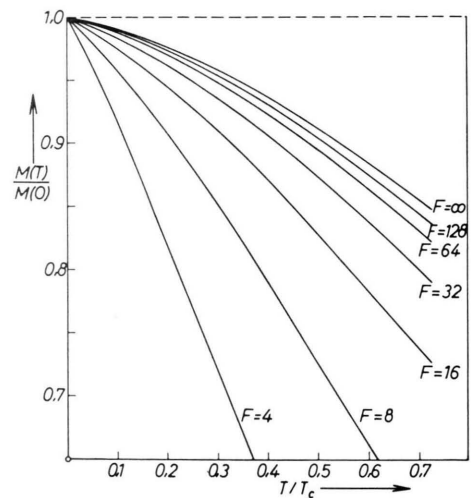


Abb. 1. Magnetisierung dünner  $\Gamma_c'\{1, 1, 1\}$ -Schichten als Temperaturfunktion; Parameter: Schichtdicke in Atomlagen.

<sup>12</sup> PERM, Rechenzentrum der Technischen Hochschule, München.

<sup>13</sup> G. S. RUSHBROOKE u. P. J. WOOD, Mol. Phys. **1**, 257 [1958].

<sup>14</sup> RUSHBROOKE und WOOD geben für diese Größen genau die doppelten Zahlenwerte an. Wir müssen jedoch berücksichtigen, daß sowohl sie, als auch DÖRING und ABBEL von Austauschoperatoren [s. (I, 3 b)] ausgehen, die sich um den Faktor 2 von dem unterscheiden, welchen wir im Anschluß an die Arbeiten von DYSON unseren Rechnungen zugrunde gelegt haben. Die Berücksichtigung dieser Diskrepanz führt gerade auf die oben angegebenen Werte für  $\Lambda$ .

so weit überlappen, daß die Angabe der jeweiligen Gültigkeitsgrenzen keineswegs kritisch ist.

In Abb. 1 werden die Ergebnisse der Rechnungen für den Fall  $\Gamma_c'(1, 1, 1)$  graphisch dargestellt. Für alle anderen Gittertypen und Oberflächenorientierungen sind die Kurvenscharen qualitativ die gleichen; für  $\Gamma_c(1, 0, 0)$ ,  $\Gamma_c(1, 1, 0)$  und  $\Gamma_c''(1, 0, 0)$  stimmen sie mit den von ABBEL angegebenen überein<sup>15</sup>.

In den Abbildungen 2 und 3 ist das Verhältnis  $M(F)/M(\infty)$  als Funktion der Schichtdicke dargestellt<sup>16</sup>. Die relative Temperatur wird hierbei festgehalten ( $T/T_c = 0,2$  bzw.  $0,4$ ). Die Ergebnisse unserer Rechnungen sind an den Kurven abzulesen:

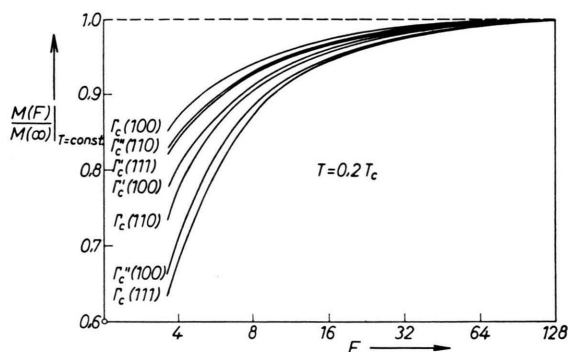


Abb. 2. Magnetisierung als Funktion der Schichtdicke  $F$ ; Parameter: Gittertyp und Orientierung. Das Einlaufen der Kurven in die Horizontale  $M(F)/M(\infty)=1$  für  $F=128$  ist hier, wie auch in Abb. 3, im Rahmen der Zeichengenauigkeit zu verstehen.

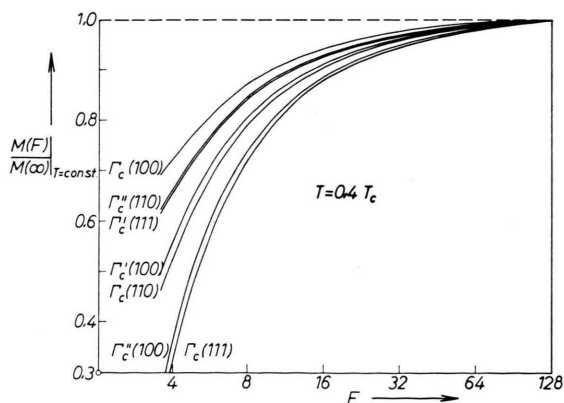


Abb. 3. Magnetisierung als Funktion der Schichtdicke  $F$ ; Parameter: Gittertyp und Orientierung.

Für alle betrachteten Gittertypen und Oberflächenorientierungen ist die Abhängigkeit der spontanen Magnetisierung von der Schichtdicke äußerst schwach; erst bei Schichtdicken von ca. 16 Atomlagen treten wesentliche Abweichungen von der Magnetisierung für kompaktes Material auf. Auch die Abhängigkeit von der Orientierung der Oberflächen ist gering, wenn auch in den Abbildungen 2 und 3, in denen die Schichtdicke logarithmisch abgetragen ist, deutlich zu bemerken. Dabei fällt auf, daß die verschiedenen Kurven in Gruppen zusammenliegen. Diese Gruppen lassen sich nach den Zahlenverhältnissen

$$z = \frac{1}{2} \Gamma_0^0 / \Gamma_1^0 \quad (59)$$

der verschiedenen Orientierungen klassifizieren. Man erhält für  $z$  – nach früheren Ergebnissen ist das gerade das Verhältnis der nächsten Nachbarn eines Spins, die auf der gleichen Netzebene liegen, zu denen, die eine Ebene entfernt sind – folgende Zahlenwerte:

|     | $\Gamma_c$ |       |       | $\Gamma_c'$ |       | $\Gamma_c''$ |       |
|-----|------------|-------|-------|-------------|-------|--------------|-------|
|     | (100)      | (110) | (111) | (100)       | (111) | (100)        | (110) |
| $z$ | 2          | 1/2   | 0     | 1/2         | 1     | 0            | 1     |

Die Magnetisierungskurven, die zu ein und demselben Zahlenverhältnis gehören, bilden in den Diagrammen eine Gruppe; je kleiner  $z$  ist, desto stärker ist die Abhängigkeit der Magnetisierung von der Dicke der Schicht.

Dieses Ergebnis ist leicht zu deuten. Je mehr Nächstnachbaratome auf einer Ebene liegen, je größer also  $z$  ist, desto geringer wird der Einfluß der an den Oberflächen der Schicht fehlenden Wechselwirkungspartner, desto weniger beeinflussen demzufolge die Randbedingungen das Spektrum des Problems und die daraus ableitbaren makroskopischen Eigenschaften.

Für die  $\Gamma_c(1, 0, 0)$ -Lage erreicht  $z$  mit  $z=2$  ein absolutes Maximum; für diese Orientierung wird demzufolge die Schichtdickenabhängigkeit der Magnetisierung minimal.

Das gilt zunächst einmal für alle Schichten, deren Wechselwirkungsreichweite  $D=1$  ist. Nimmt man jedoch an, daß die zu  $z$  analogen Verhältnisse

<sup>15</sup> DÖRING geht von einem Wert für  $\lambda$  aus, der mit den hier verwandten nicht in Einklang zu bringen ist. Seine Resultate müssen zum Vergleich erst auf unser  $\lambda$  umgerechnet werden.

<sup>16</sup> Zu  $M(F=\infty)$  siehe Anhang I.

auch für die Fälle  $D > 1$  die Schichtdickenabhängigkeit wesentlich bestimmen, so kann man erwarten, daß die Magnetisierung der  $\Gamma_c(1, 0, 0)$ -Lage ein generelles Maximum der relativen Magnetisierungen  $M_F/M_\infty$  für alle Oberflächenorientierungen bildet.

## VI. Vergleich mit den Ergebnissen von Experimenten und anderen Theorien

Unsere Untersuchungen umfassen die von DÖRING und ABBEL gerechneten Fälle, reproduzieren demzufolge ihre Resultate und bestätigen darüber hinaus das Hauptergebnis ihrer Arbeiten, die schwache Abhängigkeit der Magnetisierung von der Schichtdicke, für eine Reihe weiterer Oberflächenorientierungen.

Schon vorher hatten VALENTA<sup>17</sup> und CORCIOVEI<sup>18</sup> mittels einer Molekularfeldtheorie für dünne Schichten das gleiche Ergebnis gewonnen; dagegen zeigen die Kurven, die KLEIN-SMITH<sup>19</sup> und GLASS-KLEIN<sup>20</sup> für den Temperaturverlauf der Magnetisierung angeben, eine viel empfindlichere Abhängigkeit von der Dicke der Schicht. Wie in I beschrieben, legen diese Autoren ihren Rechnungen ein Spinwellenspektrum zugrunde, das sie durch eine recht pauschale Betrachtung der Randbedingungen gewonnen haben.

Die Experimente zeigen, daß die Magnetisierung bis hinab zu sehr dünnen Schichten von der des kompakten Materials nicht wesentlich abweicht: NEUGEBAUER<sup>21</sup>, HOFFMANN<sup>22</sup> und MAYER-STÜNKEL<sup>23</sup> fanden Abweichungen erst für extrem dünne Schichten. Zwar liegen auch ältere Experimente vor, die eine stärkere Schichtdickenabhängigkeit zu bestätigen schienen, doch konnte HOFFMANN klären, daß diese Effekte unerwünschten Oxydationserscheinungen der Schicht zuzuschreiben waren.

Die in den erwähnten experimentellen Arbeiten angegebenen Meßkurven stehen in guter qualitativer Übereinstimmung sowohl miteinander als auch mit den hier berechneten Kurven. Dabei ist es wohl hauptsächlich der ziemlich schwachen Abhängigkeit der Ergebnisse von der Orientierung der Schichtoberflächen – siehe Abb. 2 und 3 – zuzuschreiben, daß die Messungen, die größtenteils an polykristallinen Aufdampfschichten vorgenommen wurden, zu derart reproduzierbaren Ergebnissen füh-

ren. Denn die Meßkurven können dabei je nach der zufälligen Konsistenz der Schicht nur innerhalb des von einkristallinen Schichten begrenzten Bereiches streuen.

Ein genauer quantitativer Vergleich mit den Experimenten wird allerdings erst dann möglich sein, wenn man es gelernt haben wird, wohldefinierte einkristalline Schichten beliebiger Oberflächenorientierung herzustellen. Wegen der erwähnten schwachen Abhängigkeit von der Orientierung müßten dabei hohe Anforderungen an die Meßgenauigkeit gestellt werden, doch könnten solche Experimente dazu dienen, Einsicht in den Gültigkeitsbereich des idealen HEISENBERG-Modells und der Beschränkung der Austauschwechselwirkung ausschließlich auf nächste Gitternachbarn zu gewinnen.

Herrn Prof. Dr. H. KOPPE danke ich für die Anregung dieser Untersuchungen und sein ständiges Interesse an ihrem Fortgang, Herrn Dr. G. OBERMAIR für zahlreiche klärende Diskussionen und Fräulein Karin DICHTEL für ihre Hilfe bei der Vorbereitung der numerischen Rechnungen.

## Anhang I

### Die Magnetisierung im Grenzfall $F = \infty$

Für große Schichtdicken  $F$  gilt für die Magnetisierung die Formel (57 b). Setzt man in diese die Ausdrücke für die in (41) definierten Größen wieder ein und läßt dann zunächst  $F \rightarrow \infty$  und dann  $H \rightarrow 0$  gehen, so bleibt nur noch der Ausdruck

$$\frac{M(T)}{M(0)} = 1 - \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \frac{\Delta_v}{\sqrt{2} b} \frac{1}{\pi^{1/2}} \left(\frac{k T}{J}\right)^{1/2} \quad (60)$$

übrig. Aus Tab. 2 entnimmt man, daß der Quotient  $\Delta_v/\sqrt{2} b$  nur vom Gittertyp, nicht aber von der jeweiligen Oberflächenorientierung der Schicht abhängig ist. Auch der Verlauf der spontanen Magnetisierung mit der Temperatur ist also im Grenzfall unendlich dicker Schichten unabhängig von der Oberflächenorientierung.

Die gleiche Formel, die wir hier als Grenzfall unserer Rechnungen gefunden haben, wurde von BLOCH<sup>11</sup> für das dreidimensional ausgedehnte translationsinvariante Gitter angegeben. Wir haben somit die Bestätigung für unsere Forderung aus I, Anhang IV, erhalten, daß die Berücksichtigung der physikalischen Randbedingungen, die für alle Schichtdicken ein anderes Spektrum lieferten, als das der translationsinvarianten Theorie, im Limes dicker Schichten für thermodynamische Größen doch auf die gleichen Werte führen sollte, wie die BLOCHsche Theorie.

<sup>17</sup> L. VALENTA, Czech. J. Phys. **7**, 127 [1957].

<sup>18</sup> A. CORCIOVEI, Czech. J. Phys. **10**, 568 [1960].

<sup>19</sup> M. J. KLEIN u. R. S. SMITH, Phys. Rev. **81**, 378 [1951].

<sup>20</sup> S. J. GLASS u. M. J. KLEIN, Phys. Rev. **109**, 288 [1958].

<sup>21</sup> C. A. NEUGEBAUER, Phys. Rev. **116**, 1441 [1959].

<sup>22</sup> H. HOFFMANN, Z. Angew. Phys. **13**, 149 [1961].

<sup>23</sup> H. MAYER u. D. STÜNKEL, Naturwiss. **12**, 277 [1962].

Der im Grenzübergang  $F \rightarrow \infty$ ,  $\gamma \rightarrow 0$  wegfallende Term ist ein direktes Maß für die Abweichung der Magnetisierung dünner Schichten von der des kompakten Materials. Diese Abweichung kann man merkwürdigerweise nicht als linearen Oberflächeneffekt deuten. Denn ein solcher würde einen Verlauf  $\sim 1/F$  zeigen, während die Abweichung in (57 b) mit  $F \rightarrow \infty$  schwächer gegen Null strebt als  $1/F$ .

## Anhang II

### Eine Monotonieeigenschaft der Magnetisierung

Abschließend soll noch auf eine Monotonieeigenschaft der Magnetisierung und auf ihre Konsequenzen für die durchgeführten Rechnungen hingewiesen werden.

Ersetzt man nämlich in (33) das Spektrum  $\{E\}$  der Einspinwellenzustände durch ein anderes  $\{E'\}$ , für des-

sen Eigenwerte die Beziehung

$$E_{\nu'}' \geq E_{\nu} \quad \text{für alle } \nu \quad (61)$$

gelten soll, so ist auch  $M'(T) \geq M(T)$ ; die Magnetisierung ist also monoton „mit dem Spektrum“.

Die in Abschnitt III durchgeführten Näherungen für die Eigenwerte kommen nun gerade einer solchen Ersetzung des wahren Spektrums durch ein approximiertes gleich und für diese Ersetzung gilt (61). Denn sowohl  $I_0^{\nu}$  als auch  $e^{\nu}$  ist überall größer als seine Schmiegungsparabel, durch die wir die  $\lambda$ -Abhängigkeit der Eigenwerte erfaßten, und demzufolge liegen die quadratisch genäherten Energien über den exakt errechneten. Das gilt auch für die Approximationen für  $s_{\nu}$  bzw.  $t_{\nu}$ . Somit stellen die Formeln (57) — ebenso wie das Blochsche  $T^{3/2}$ -Gesetz für das kompakte Material — eine obere Grenze der Magnetisierungen dar, die sich bei Verwendung der wahren Eigenwerte in (33) ergeben würden.

## Piezoelectric Polaron Effects in Regular Crystals

By HELMUT GABRIEL

Institut für Theoretische Physik A der Technischen Hochschule Braunschweig

(Z. Naturforschg. 19 a, 1591—1598 [1964]; eingegangen am 31. Juli 1964)

Due to the interaction of an electron with both optical and acoustical modes in piezoelectric polar crystals, modified expressions for the self-energy and effective mass of the polaron are to be expected. The lattice vibrations are considered in the limit of large wave-length and an electrostatic approach to the interaction of charges in the lattice has been used. The HAMILTONIAN for a piezoelectric crystal of arbitrary lattice structure is given. With special reference to crystals of zincblende-type, approximate solutions for the self-energy and effective mass are found by thermodynamical perturbation theory. A numerical estimate for ZnS as a particularly favourable example, shows a negligible modification of the ground-state energy, but concerning the effective mass a contribution due to acoustical phonons of more than 50% of the optical-mode term.

In considering the interaction of electrons with the vibrating lattices of ionic crystals earlier investigations were restricted to the case of an electron within an isotropic polarizable medium. Then, in the limit of long waves, the electron strongly interacts with the optical modes only and we now know that for the behaviour of the resulting polaron the longitudinal optical mode is of particular importance. Looking upon the problem from the viewpoint of lattice dynamics of anisotropic crystals (or if we like an anisotropic polarizable continuum) it is evident, that such a simple treatment must break down in crystals without a centre of symmetry or with polar axes. It is the purpose of this note to extend the theory of polarons to such piezoelectric crystals. We start from the exact equations of motion for lattice waves of large wave-length and the MAXWELL equations for the macroscopic electromagnetic fields within the crystals and write down the corresponding HAMILTONIAN. Because of the cou-

pling between the displacements of the ions relative to each other and the displacement of the centre-of-gravity of each lattice cell established by a 3<sup>rd</sup> rank tensor (which is connected with the piezoelectric tensor) the acoustical vibrations can no longer be separated from the interaction HAMILTONIAN. In other words, the field of acoustical phonons cannot be considered as a conservative subsystem and therefore suppressed as in the usual treatment of the polaron problem.

Some simplifying assumptions will be introduced during the presented work, (1) only a slowly-moving electron will be considered, so that an electrostatic approach may be a good approximation; (2) we specialize to the simplest piezoelectric crystal with only one nonvanishing piezoelectric constant (zincblende structure). Even in this case the secular equation determining the frequency spectrum cannot be solved exactly except for some special directions of wave vector for the lattice vibrations. To arrive