

# Über die Spinwellen in einigen ferromagnetischen dünnen Schichten mit kubischer und hexagonaler Struktur

LUBOŠ VALENTA \* und LESZEK WOJTCZAK \*\*

Institut für Magnetische Werkstoffe der Deutschen Akademie der Wissenschaften zu Berlin, Jena

(Z. Naturforschg. 22 a, 620—625 [1967]; eingegangen am 24. Dezember 1966)

A spin wave theory of magnetic thin films in the HOLSTEIN-PRIMAKOFF approximation is presented which includes cases like SC (100), SC (101), FCC (111), BCC (100) and hexagonal (0001) for any spin  $S$ . In the center of interest are the wave functions of the spin waves. Furthermore, a comparison is given with the theories of ABBEL<sup>1</sup> and JELITTO<sup>2</sup>, both elaborated for spin  $S=1/2$  and based on another formalism.

In dieser Arbeit wollen wir uns vor allem mit den Spinwellenfunktionen in dünnen Schichten mit kubischer und hexagonaler Struktur des Kobalts beschäftigen. Wir benutzen zu diesem Zweck die von uns in unseren früheren Arbeiten<sup>3, 4</sup> benutzte Methode: durch Umkehrung der zu der Diagonalisierung des Ausgangsenergieoperators im Rahmen der zweiten Quantelung führenden Transformationen bekommen wir aus den Wellenfunktionen der Elementaranregungen (Quasiteilchen) die Wellenfunktionen der kollektiven Schwingungen des Spinsystems in der  $S^z$ -Darstellung. Diese sind für die massiven Proben identisch mit den BLOCHSchen Spinwellen und stellen für dünne Schichten eine gewisse Verallgemeinerung der bisherigen Spinwellen dar, wie es von uns in<sup>4</sup> und gleichzeitig unabhängig von JELITTO<sup>2</sup> gezeigt worden ist.

Als ein Problem an sich bleibt bis heute die Wahl des Energieoperators und seine Diagonalisierung. Mit Rücksicht auf die Resultate einer ganzen Reihe von Arbeiten in den letzten Jahren beschränken wir uns auf den HEISENBERGSchen Austauschoperator in der (wahrscheinlich vernünftigen) Hoffnung, daß er schon die wesentlichen Züge der von uns untersuchten Ferromagnetika widerspiegelt.

Die Frage, wie man einen solchen HAMILTON-Operator im Falle einer dünnen Schicht im Rahmen der Spinwellennäherung von HOLSTEIN und PRIMAKOFF näherungsweise diagonalisieren kann, ist schon im wesentlichen auf Grund der Arbeiten<sup>1, 4, 5</sup> klar ge-

worden. Es handelt sich also heute vor allem darum, die in diesem Sinne durchzuführende Diagonalisierung am effektivsten zu realisieren. Eine mögliche Variante für kubische und hexagonale Kristalle, zu der wir nach einigen Versuchen gelangt sind, ist in dieser Arbeit präsentiert.

Wie schon oben erwähnt, erschien unabhängig und gleichzeitig mit unserer Arbeit<sup>4</sup> die Arbeit<sup>2</sup> von JELITTO, die eine natürliche Weiterentwicklung der Arbeiten von DÖRING<sup>5</sup> und ABBEL<sup>1</sup> darstellt. Der Ausgangspunkt der Arbeit von JELITTO ist die BLOCHSche Differenzengleichung, deren Lösung mit Rücksicht auf die Randbedingungen untersucht wird. Trotz der verschiedenen Formalismen, die man in<sup>4</sup> und in<sup>2</sup> benutzt, sind die Resultate beider Arbeiten weitgehend äquivalent. Die Arbeit<sup>2</sup> ist nur für den Spin 1/2, die Arbeit<sup>4</sup> für beliebige Werte des Spins ausgearbeitet worden. Es wird deswegen im weiteren der Zusammenhang der Auffassungen von JELITTO und der von VALENTA und WOJTCZAK kurz angedeutet.

Wenn man die Möglichkeit der Spinwellen in primitiven Gittern (wie Fe, Ni) und in Gittern mit mehreren Atomen pro Elementarzelle (wie Co) nur oberflächlich betrachtet, kann man geneigt sein, zu erwarten, daß die Spinwellen in beiden Gittertypen einen ganz verschiedenen Charakter haben müssen, weil z. B. in massivem Eisen nur akustische, dagegen in Kobalt auch optische Schwingungen in dem Spinspektrum vertreten sein müssen (s. z. B. <sup>6</sup>).

\* Zur Zeit Institut für Physikalische Chemie der Friedrich-Schiller-Universität Jena; ständige Anschrift: Fakultät für Technische Physik und Kernphysik, ČVUT, Praha.

\*\* Ständige Anschrift: Lehrstuhl für Theoretische Physik der Universität, Łódź.

<sup>1</sup> R. ABBEL, Z. Naturforschg. 18 a, 371 [1963].

<sup>2</sup> R. J. JELITTO, Z. Naturforschg. 19 a, 1567 [1964].

<sup>3</sup> L. VALENTA, Czech. J. Phys. B 14, 278 [1964].

<sup>4</sup> L. VALENTA u. L. WOJTCZAK, Proceedings of the International Conference on Magnetism, Nottingham, Sept. 1964, p. 830.

<sup>5</sup> W. DÖRING, Z. Naturforschg. 16 a, 1146 [1961].

<sup>6</sup> G. G. E. LOW, Proc. Phys. Soc. London A 79, 473 [1962].



Die dünnen Schichten kann man aber auch als ein System von mit Atomen belegten Ebenen parallel zu der Oberfläche betrachten. Diese Atomlagen bilden dann ein System von zueinander parallelen und zusammengekoppelten Untergittern (s. z. B. <sup>7</sup>). Hat man aber mehr als ein Untergitter, muß man sowohl mit der Existenz von akustischen als auch mit der von optischen Schwingungen rechnen, und das auch bei Gittern mit primitiver Elementarzelle [was sich auch wirklich zeigt, s. z. B. <sup>4</sup>].

In dieser Arbeit wollen wir vor allem zeigen, daß fast dieselbe Situation wie in dünnen Schichten von Fe und Ni auch in dünnen Schichten von Co zu erwarten ist.

Der typische Unterschied zwischen dem primitiven und zusammengesetzten Gitter zeigt sich also erst beim Übergang zu den massiven Proben. Vom mathematischen Standpunkt aus kann man natürlich gewisse Unterschiede schon bei dem Diagonalisierungsverfahren feststellen, da dieses für kompliziertere Gitter im allgemeinen als Folge des Fehlens der Zentralsymmetrie der Punktgruppe schwieriger ist.

## I. Zur Diagonalisierung

Wie gesagt, benutzen wir den einfachen Energieoperator mit dem HEISENBERGSchen Austauschglied

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle j_\nu, j_{\nu'} \rangle} \mathbf{S}_{j_\nu} \cdot \mathbf{S}_{j_{\nu'}} - g \beta \mathbf{H} \cdot \sum_{j_\nu} \mathbf{S}_{j_\nu}, \quad (1)$$

wo  $S_{j_\nu}$  den Spinoperator des  $j_\nu$ -ten Atoms in der  $\nu$ -ten Atomlage parallel zu der Schichtoberfläche darstellt.  $J$  ist die effektive Austauschkonstante für die nächsten Nachbarn, über die nur summiert wird,  $g$  die gyromagnetische Konstante,  $\beta$  das BOHRSCHE Magneton und  $\mathbf{H}$  der Vektor der Feldstärke des äußeren Magnetfeldes.

Wir nehmen an, daß die Schicht unendlich ausgedehnt, monokristallin, mit idealer Oberfläche und

überall homogen ist (also u. a. auch ohne irgendeine Oxidschicht, ohne Deformationen des Gitters, Fehlstellen usw.), aber die bisherigen Erfahrungen (s. z. B. <sup>7</sup>) lassen eine gewisse Berechtigung zu einer solchen Annahme zu. Die kristallographische Orientierung der Schichtnormalen wird zuerst als beliebig angenommen.

Das rechtwinklige Koordinatensystem wählen wir so, daß die Richtung der  $x$ -Achse mit der Richtung der Normalen zur Schicht zusammenfällt. Die  $y$ - und  $z$ -Achse liegen in der Schichtebene, und zwar so, daß die  $z$ -Achse in der Richtung der spontanen Magnetisierung parallel zu der  $z$ -Achse vorausgesetzt wird.

Eine Näherungsdiagonalisierung im Sinne der vereinfachten Methode von HOLSTEIN und PRIMAKOFF können wir so durchführen, daß die Operatoren  $S_{j_\nu}^\pm = S_{j_\nu}^x \pm S_{j_\nu}^y$  durch Bose-Operatoren  $a_{j_\nu}^\pm$  ersetzen, so daß

$$S_{j_\nu}^\pm = \sqrt{2S} a_{j_\nu}^\pm, \quad \nu = 1, 2, \dots, n \quad (2)$$

( $S$  ist der Spin pro Atom,  $n$  die Zahl der Atomlagen) ist. Wir gehen mit Hilfe der gewöhnlichen FOURIER-Transformation

$$a_{j_\nu}^\pm = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{h}} \exp \{ \mp i \mathbf{h} \cdot \mathbf{j}_\nu \} a_{\nu \mathbf{h}}^\pm \quad (3)$$

( $N^2$  ist die Zahl der Atome in jeder Atomlage) zu den kollektiven dynamischen Veränderlichen über. Dabei sind  $\mathbf{h}$  zweidimensionale Vektoren des reziproken Gitters aus der ersten BRILLOUINSchen Zone (sie entsprechen im Endergebnis den Wellenvektoren der gewöhnlichen BLOCHSchen Wellen, die sich in der Schichtebene ausbreiten).

In diesem Falle bekommt der Energieoperator sowohl für die kubischen Schichten mit einfach kubischem, flächenzentriertem und raumzentriertem Gitter als auch für die hexagonalen Gitter mit der Kobaltstruktur die Form ( $\mathbf{H}$  wird im weiteren als vernachlässigbar klein angenommen und nicht mehr berücksichtigt)

$$\hat{H} = \frac{1}{2} JS \sum_{\nu} \sum_{\mathbf{h}} (z_0 + 2z_1 - z_0 \gamma_{\mathbf{h}}) (a_{\nu \mathbf{h}}^+ a_{\nu \mathbf{h}}^- + a_{\nu \mathbf{h}}^- a_{\nu \mathbf{h}}^+) - \frac{1}{2} JS \left\{ \sum_{\nu} \sum_{\mathbf{h}} Z(\nu) \cdot (a_{\nu \mathbf{h}}^+ a_{\nu \mathbf{h}}^- + a_{\nu \mathbf{h}}^- a_{\nu \mathbf{h}}^+) \right. \\ \left. + 2 \sum_{\mathbf{h}} \sum_{\langle \nu, \nu' \rangle} z(\nu, \nu') \cdot (\Gamma_{\nu \rightarrow \nu'}^{\mathbf{h}} a_{\nu \mathbf{h}}^+ a_{\nu' \mathbf{h}}^- + \Gamma_{\nu \rightarrow \nu'}^* a_{\nu \mathbf{h}}^- a_{\nu' \mathbf{h}}^+) \right\}, \quad (4)$$

wo die neu eingeführten Symbole folgende Bedeutung haben:  $z_0$  ist die Zahl der nächsten Nachbarn in der jeweiligen Atomlage,  $2z_1$  ist die Anzahl aller

möglichen Nachbarn eines Atoms in dem idealen unendlichen Gitter,  $Z(\nu)$  ist der Unterschied zwischen der höchstmöglichen Zahl der nächsten Nachbarn

<sup>7</sup> L. VALENTA, Phys. Status Solidi **2**, 112 [1962]. — L. WOJTCZAK, Phys. Status Solidi **13**, 245 [1966].

eines Atoms in der  $\nu$ -ten Lage und der wirklichen Zahl seiner nächsten Nachbarn [ $Z(\nu)$  ist also nichts anderes als die Zahl der „fehlenden“ Nachbarn],  $z(\lambda, \nu)$  ist die Zahl der nächsten Nachbarn in der  $\nu$ -ten Atomlage zu einem Atom in der  $\lambda$ -ten Atomlage;  $\gamma_h$  ist durch die Gleichung

$$\gamma_h = z^{-1}(\lambda, \nu) \sum_{\nu \lambda} \exp \{i \mathbf{h} \cdot \mathbf{p}_{\lambda \nu}\} \quad (5)$$

definiert, wo in der Summe über die  $\mathbf{p}_{\lambda \nu} = \mathbf{j}_\nu - \mathbf{j}_\lambda$  über alle nächsten Nachbarn des  $\lambda$ -ten Atoms in der  $\nu$ -ten Atomlage summiert wird. Diese Summe ist für alle Atome aus der  $\lambda$ -ten Atomlage gleich. Betrachten wir nur die nächsten Nachbarn und nehmen an, daß sie sich nur in den unmittelbar benachbarten Atomlagen befinden, was wir im weiteren immer voraussetzen wollen, kommt nur ein Typ der  $\gamma_h$  in Frage.

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{1}{2} JS \sum_{\nu} \sum_{\mathbf{h}} \sum_{\tau, \tau'} (z_0 + 2z_1 - z_0 \gamma_h) T_{\nu \tau}^{\mathbf{h}} T_{\nu \tau'}^{\mathbf{h}} [\mathcal{T}_{\nu}^+ \mathcal{T}_{\nu}^- b_{\tau \mathbf{h}}^+ b_{\tau' \mathbf{h}}^- + \mathcal{T}_{\nu}^- \mathcal{T}_{\nu}^+ b_{\tau \mathbf{h}}^- b_{\tau' \mathbf{h}}^+] \\ & - \frac{1}{2} JS \sum_{\tau, \tau'} \sum_{\mathbf{h}} \left\{ \sum_{\nu} Z(\nu) T_{\nu \tau}^{\mathbf{h}} T_{\nu \tau'}^{\mathbf{h}} [\mathcal{T}_{\nu}^+ \mathcal{T}_{\nu}^- b_{\tau \mathbf{h}}^+ b_{\tau' \mathbf{h}}^- + \mathcal{T}_{\nu}^- \mathcal{T}_{\nu}^+ b_{\tau \mathbf{h}}^- b_{\tau' \mathbf{h}}^+] \right. \\ & \left. + 2 \sum_{\langle \nu, \nu' \rangle} z(\nu, \nu') [\Gamma_{\nu \rightarrow \nu'}^{\mathbf{h}} \mathcal{T}_{\nu}^+ \mathcal{T}_{\nu'}^- T_{\nu \tau}^{\mathbf{h}} T_{\nu' \tau'}^{\mathbf{h}} b_{\tau \mathbf{h}}^+ b_{\tau' \mathbf{h}}^- + \Gamma_{\nu \rightarrow \nu'}^{\mathbf{h}} \mathcal{T}_{\nu}^- \mathcal{T}_{\nu'}^+ T_{\nu \tau}^{\mathbf{h}} T_{\nu' \tau'}^{\mathbf{h}} b_{\tau \mathbf{h}}^- b_{\tau' \mathbf{h}}^+] \right\} \end{aligned}$$

annimmt, verlangen wir, daß

$$\mathcal{T}_{\nu}^+ \mathcal{T}_{\nu}^- = 1$$

und weiter

$$\mathcal{T}_{\nu}^{\pm} = \mathcal{T}_1^{\pm} = \exp \{ \pm \frac{1}{2} i \arg(\Gamma_1^{\mathbf{h}}) \} \text{ für ungerade } \nu$$

und

$$\mathcal{T}_{\nu}^{\pm} = \mathcal{T}_2^{\pm} = \exp \{ \mp \frac{1}{2} i \arg(\Gamma_1^{\mathbf{h}}) \} \text{ für gerade } \nu.$$

Dazu wird noch die Orthonormalität der  $T_{\mu \nu}^{\mathbf{h}}$  verlangt, d. h.

$$\sum_{\nu} T_{\nu \tau}^{\mathbf{h}} T_{\nu \tau'}^{\mathbf{h}} = \delta_{\tau \tau'} \quad (8)$$

Das gibt uns

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{1}{2} JS \sum_{\tau} \sum_{\mathbf{h}} (z_0 + 2z_1 - z_0 \gamma_h) b_{\tau \mathbf{h}}^+ b_{\tau \mathbf{h}}^- + b_{\tau \mathbf{h}}^- b_{\tau \mathbf{h}}^+ - \frac{1}{2} JS \sum_{\tau, \tau'} \sum_{\mathbf{h}} \left\{ \sum_{\nu} Z(\nu) T_{\nu \tau}^{\mathbf{h}} T_{\nu \tau'}^{\mathbf{h}} \right. \\ & \left. \cdot (b_{\tau \mathbf{h}}^+ b_{\tau' \mathbf{h}}^- + b_{\tau \mathbf{h}}^- b_{\tau' \mathbf{h}}^+) + 2 \sum_{\langle \nu, \nu' \rangle} z(\nu, \nu') |\Gamma_1^{\mathbf{h}}| \cdot T_{\nu \tau}^{\mathbf{h}} T_{\nu' \tau'}^{\mathbf{h}} (b_{\tau \mathbf{h}}^+ b_{\tau' \mathbf{h}}^- + b_{\tau \mathbf{h}}^- b_{\tau' \mathbf{h}}^+) \right\}. \end{aligned} \quad (9)$$

(9) läßt sich dann leicht diagonalisieren, wenn wir als  $T_{\nu \tau}^{\mathbf{h}}$  die Lösung des homogenen linearen Systems

$$(Z(\nu) - x_{\tau}^{\mathbf{h}}) T_{\nu \tau}^{\mathbf{h}} + \sum_{\nu' (\neq \nu)} z(\nu, \nu') |\Gamma_1^{\mathbf{h}}| T_{\nu' \tau}^{\mathbf{h}} = 0 \quad \nu = 1, 2, \dots, n, \quad (10)$$

nehmen. — Dann ist

$$\begin{aligned} H = & \frac{1}{2} JS \sum_{\tau} \sum_{\mathbf{h}} (z_0 + 2z_1 - z_0 \gamma_h - x_{\tau}^{\mathbf{h}}) \\ & \cdot (b_{\tau \mathbf{h}}^+ b_{\tau \mathbf{h}}^- + b_{\tau \mathbf{h}}^- b_{\tau \mathbf{h}}^+) \end{aligned}$$

und die weitere Diagonalisierung trivial. Wir wollen sie deswegen nicht konkret durchführen.

Die Diagonalisierung von (4) gelingt nun, wenn wir statt  $a_{\tau \mathbf{h}}^{\pm}$  neue Operatoren  $b_{\tau \mathbf{h}}$  durch die Transformation (vgl. 8, 4)

$$a_{\tau \mathbf{h}}^{\pm} = \sum_{\tau}^{\pm} T_{\nu \tau}^{\mathbf{h}} b_{\tau \mathbf{h}}^{\pm} \quad (6)$$

einführen, wo wir in Hinsicht auf die von uns in <sup>4</sup> benutzten Größen  $T_{\nu \tau}^{\mathbf{h}}$  die  $\pm T_{\nu \tau}^{\mathbf{h}}$  als

$$\pm T_{\nu \tau}^{\mathbf{h}} = \mathcal{T}_{\nu}^{\pm} T_{\nu \tau}^{\mathbf{h}} \quad (7)$$

einführen. Von den  $b_{\tau \mathbf{h}}^{\pm}$  verlangen wir wieder, daß sie den Bose-Vertauschungsrelationen genügen. Auf  $\pm T_{\nu \tau}^{\mathbf{h}}$  können wir nun noch gewisse Bedingungen so auflegen, daß sie zu der erwünschten Diagonalisierung führen. Weil der Energieoperator in den  $b_{\tau \mathbf{h}}^{\pm}$  die Form

Die Operatoren  $b_{\tau \mathbf{h}}^{\pm}$  sind nun offensichtlich die Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren des  $(\tau, \mathbf{h})$ -ten unabhängigen harmonischen Oszillators. Die  $x_{\tau}^{\mathbf{h}}$  sind Eigenwerte des zu (10) gehörenden Säkularproblems.

## II. Zu den Spinwellen

Einer Elementaranregung entspricht jetzt der Kettenvektor  $b_{\tau \mathbf{h}}^{\pm} |0\rangle$ , wo der „Vakuumzustandsvektor“  $|0\rangle$  dem Grundzustand mit gleichgerichteten Spins entspricht. Ersetzt man  $b_{\tau \mathbf{h}}^{\pm}$  mittels (6), (3) und (2)

<sup>8</sup> A. CORCIOVEI, Phys. Rev. **130**, 2223 [1963].

durch die Spinoperatoren, so hat man

$$\begin{aligned} b_{\tau\hbar}^+ |0\rangle &= N^{-1} (2S)^{-1/2} \sum_{\nu, \mathbf{j}_\nu} {}^+ T_{\nu\tau}^\hbar \exp \{i \hbar \cdot \mathbf{j}_\nu\} S_{\mathbf{j}_\nu}^+ |0\rangle \\ &= N^{-1} (2S)^{-1/2} \sum_{\nu, \mathbf{j}_\nu} {}^+ T_{\nu\tau}^\hbar \exp \{i \hbar \cdot \mathbf{j}_\nu\} |\mathbf{j}_\nu\rangle, \quad (11) \end{aligned}$$

wo  $|\mathbf{j}_\nu\rangle$  den Zustand bezeichnet, in dem auf dem  $\mathbf{j}_\nu$ -ten Gitterpunkt eine Spinabweichung um  $\hbar$  vorhanden ist. Die Exponentialfunktionen entsprechen den zweidimensionalen Blochschen Spinwellen in der Schichtebene. Die  $T_{\nu\tau}^\hbar$  beschreiben nun die verallgemeinerten Spinwellen in der Normalen-Richtung. Ihre genaue Form kann angegeben werden, wenn die  $x_\tau^\hbar$  bekannt sind, d. h. wenn man sie als Eigenwerte der zu (10) gehörenden Determinante ausrechnet, was im allgemeinen mit großen rechnerischen Schwierigkeiten verbunden ist. Das Problem ist weiterhin dadurch kompliziert, daß die Lösung von der Wellenzahl  $\hbar$  abhängt, was die schon von ABBEL festgestellte Kopplung der sich in der Schichtebene und der sich in der Normalenrichtung ausbreitenden Wellen bedeutet.

Deswegen ist es nur für einige Spezialfälle gelungen, für die  $x_\tau^\hbar$  und  $T_{\nu\tau}^\hbar$  analytische Ausdrücke zu bekommen. Es sind die in <sup>4</sup> erwähnten Fälle für Fe mit der Orientierung (100) [weiter kurz Fe(100)], Ni(111), einfache kubisches Gitter SC(100), der von ABBEL gelöste Fall SC(101) und neuerdings auch Co(0001). In allen diesen Fällen kann man für die  $x_\tau^\hbar$  und  $T_{\nu\tau}^\hbar$  analytische Ausdrücke bekommen, wenn man sich auf den kopplungsfreien Fall  $\hbar=0$  beschränkt [für SC(100) bekommt man die Unabhängigkeit von  $\hbar$  automatisch]. Es ist dann  $|\Gamma_1^0|=1$  und (10) nimmt dann die Form

$$(Z(\nu) - x_\tau^0) T_{\nu\tau}^0 + z(T_{\nu-1, \tau}^0 + T_{\nu+1, \tau}^0) = 0 \quad (12)$$

an, wo  $Z(\nu)$  nur für  $\nu=1, n$  von Null verschieden ist und dem  $z$  [d. h. der Anzahl der (einzig) nächsten Nachbarn] numerisch gleich ist. Führt man also  $x_\tau^0/z = \tilde{x}_\tau^0$  ein, hat man für die  $\tilde{x}_\tau^0$  dasselbe Gleichungssystem wie CORCIOVEI für SC(100) in <sup>8</sup>, und man kann deshalb auch seine Formel für  $x_\tau$  benutzen, was nun

$$x_\tau^0 = 2z \cos \left[ \left( \frac{\tau-1}{n} \right) \pi \right] \quad (13)$$

gibt. Deswegen ist auch die in <sup>9</sup> von BRODKORB und HAUBENREISSER für die  $T_{\nu\tau}^0$  angegebene Formel

$$T_{\nu\tau}^0 = \sqrt{\frac{2 - \delta_{1\tau}}{n}} \cos \left[ \frac{1}{2} \pi \frac{\tau-1}{n} (2\nu-1) \right] \quad (14)$$

ohne weiteres brauchbar.

Gewisse Folgen von (13) und (14) haben wir in <sup>4</sup> untersucht, damals noch ohne den Fall Co(0001). Jetzt sehen wir, daß sich an der Theorie für Co(0001),  $\hbar=0$  praktisch nichts ändert.

Bei  $\hbar=0$  kann man weiter sehen, daß das Spektrum der Moden für verschiedene  $\tau$  ( $=1, 2, \dots, n$ ) den rein akustischen Fall für  $\tau=1$ , den rein optischen für  $\tau=n$  und mehrere gemischte Fälle für  $\tau=2, 3, \dots, (n-1)$  enthält. Wir wollen das an der Folge der Vorzeichen der  $T_{\nu\tau}^0$  für  $\nu=1, 2, \dots, n$  für (z. B.)  $n=12$  demonstrieren, die wir in der Tab. 1 angeben.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
2	+	+	+	+	0	-	-	-	-	-	-	-
3	+	+	-	-	-	-	-	+	+	+	+	+
4	+	+	-	-	-	-	+	+	+	-	-	-
5	+	+	-	-	0	+	+	-	-	+	+	+
6	+	+	-	-	+	+	-	-	+	+	-	-
7	+	-	-	+	+	-	-	+	+	-	-	+
8	+	-	-	+	0	-	+	+	-	+	+	-
9	+	-	-	+	-	+	-	+	+	-	-	+
10	+	-	+	+	-	+	-	+	+	-	-	-
11	+	-	+	-	0	+	-	+	-	+	-	+
12	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-
Symmetrie	S	A	S	A	S	A	S	A	S	A		
Opt.												
Acust.												

Tab. 1. Vorzeichen der  $T_{\nu\tau}^0$  für verschiedene Moden bei  $n=12$  ( $\tau=1, 2, \dots, 12$ ) für  $\hbar=0$ .

A ≡ Antisymmetrie; S ≡ Symmetrie.

Man sieht, daß eine Hälfte symmetrisch (S) und die andere antisymmetrisch (A) ist. Weiter sieht man, daß für die reinen Fälle, d. h. den akustischen und den optischen, die  $T_{\nu\tau}^0$  der absoluten Größe nach für alle  $\nu$  gleich sind, und zwar für beliebiges gegebenes  $n$  bei den akustischen und nur für  $n \rightarrow \infty$  bei den optischen Schwingungen.

Es besteht also in dieser Hinsicht zumindest für den von uns untersuchten Fall kein Unterschied zwischen den primitiven und zusammengesetzten Gittern.

Für eine dünne Schicht, die nur aus zwei Atomlagen besteht, müßten also in allen hier untersuchten Fällen ein akustischer und ein optischer Zweig existieren.

Auf Grund dieser Erfahrungen ist es deswegen nicht überraschend, daß das Verhalten der Kobalt-

<sup>9</sup> W. BRODKORB u. W. HAUBENREISSER, Phys. Stat. Sol. **8**, K 21 [1965].

schichten dem solcher Schichten mit kubischer Struktur, wie Fe und Ni, ähnlich ist. Es bleibt noch die wichtige Frage, was geschieht, wenn wir zu den massiven Proben übergehen. Wir erwarten z. B. für Eisen nur die akustischen, für Kobalt sowohl die akustischen als auch die optischen Schwingungen. Praktisch hat man aber bis jetzt in beiden Fällen nur die akustischen beobachtet. Das hängt offensichtlich von der Möglichkeit der Anregung und den Beobachtungsmöglichkeiten der entsprechenden Moden ab. Diese nicht so einfache Frage möchten wir in einer anderen Arbeit untersuchen.

Es bleibt noch das Problem der  $T_{\nu\tau}^h$  für  $h \neq 0$ . (10) ist für  $Z(\nu) = 0$  eine gewöhnliche Differenzengleichung zweiter Ordnung mit konstanten Koeffizienten. Die allgemeine Lösung hat also die Form

$$T_{\nu\tau}^h = c_1 \exp\{i\vartheta_{\tau}^h \nu\} + c_2 \exp\{-i\vartheta_{\tau}^h \nu\}, \quad (15)$$

wo die  $c_1$  und  $c_2$  beliebige komplexe Zahlen sind und  $\vartheta_{\tau}^h$  mittels

$$x_{\tau}^h = 2z(1, 2) |\Gamma_1^h| \cos \vartheta_{\tau}^h \quad (16)$$

eingeführt ist; die  $x_{\tau}^h$  sind die Eigenwerte zu (10).

Statt (15) könnten wir natürlich auch  $T_{\nu\tau}^h$  in der zu (15) äquivalenten Form

$$T_{\nu\tau}^h = A_{\tau}^h \cos(\vartheta_{\tau}^h \nu + \beta_{\tau}^h)$$

mit den Integrationskonstanten  $A_{\tau}^h$ ,  $\beta_{\tau}^h$  einführen. Im weiteren bleiben wir aber bei (15).

Die Konstanten  $c_1$ ,  $c_2$  werden durch die Randbedingungen bestimmt. Setzen wir (15) in (10) ein, so haben wir

$$\begin{aligned} c_2 &= -\exp\{-i2\vartheta_{\tau}^h\} \frac{1 - |\Gamma_1^h| \exp\{-i\vartheta_{\tau}^h\}}{1 - |\Gamma_1^h| \exp\{i\vartheta_{\tau}^h\}} c_1 = C c_1 \\ &= -\exp\{i2\vartheta_{\tau}^h n\} \frac{1 - |\Gamma_1^h| \exp\{i\vartheta_{\tau}^h\}}{1 - |\Gamma_1^h| \exp\{-i\vartheta_{\tau}^h\}} c_1 = C c_1. \end{aligned} \quad (17)$$

(15) läßt sich also auch als

$$T_{\tau}^h = c_1 \{\exp\{i\vartheta_{\tau}^h \nu\} + C \exp\{-i\vartheta_{\tau}^h \nu\}\} \quad (18)$$

mit dem in (17) eingeführten  $C$  schreiben.

### III. Zusammenhang mit den Theorien von Abbel und Jelitto

(18) war die Ausgangsformel der Untersuchungen von ABBEL, dessen Zutritt zu dem Problem von dem unseren verschieden war [direkte Lösung der Blochschen Differenzengleichung mit (18) als Lösungsansatz]. Es ist also interessant, ein von ABBEL diskutiertes Beispiel zu nehmen und zu überprüfen, ob seine und unsere Methode zu gleichen Resultaten führen, wie es (18) vermuten läßt. Wir benutzen dazu den Fall des einfach kubischen Gitters SC(101). Die Gitterkonstante nehmen wir gleich eins. Dann ist  $z(1, 2) = 2$ ,

$$|\Gamma_1^h| = \left| \frac{1}{2} [\exp\{i(1/\sqrt{2})(h_x + h_z)\} + \exp\{i(1/\sqrt{2})(h_x - h_z)\}] \right| = \left| \cos \frac{h_z}{\sqrt{2}} \right|.$$

Setzen wir noch den Koordinatenursprung in die Mitte der Schicht, nehmen  $n$  als ungerade (gerade  $n$  brauchten noch eine kleine Überlegung) und rechnen das  $C$  aus, so bekommen wir

$$\begin{aligned} C &= \exp\{-i\vartheta_{\tau}^h(n-1)\} \frac{1 - \exp\{i\vartheta_{\tau}^h\} |\cos(h_z/\sqrt{2})|}{1 - \exp\{-i\vartheta_{\tau}^h\} |\cos(h_z/\sqrt{2})|} \\ &= \exp\{+i\vartheta_{\tau}^h(n-1)\} \frac{1 - \exp\{-i\vartheta_{\tau}^h\} |\cos(h_z/\sqrt{2})|}{1 - \exp\{+i\vartheta_{\tau}^h\} |\cos(h_z/\sqrt{2})|}. \end{aligned} \quad (19)$$

(19) entspricht der Gl. (7) bei ABBEL, wenn man die Korrespondenz zwischen  $n$  und  $D$ ,  $\vartheta_{\tau}^h$  und  $k_2$  und zwischen den Koordinatenachsen berücksichtigt. Unterschiedlich bleibt nur der Kosinus in (19), der bei ABBEL nicht im Absolutwert erscheint.

Diese Übereinstimmung mit den ABBELSchen Resultaten zeigt, daß in allen von uns untersuchten Fällen die Situation ähnlich ist und daß also u. a. auch für hexagonale Schichten die Oberflächenzustände theoretisch zu erwarten sind. Es muß dann

der Fall sein, wenn für  $x_{\tau}^h$

$$\frac{x_{\tau}^h}{2z(1, 2) |\Gamma_1^h|} > 1.$$

Es muß dann, entsprechend (16),  $\vartheta_{\tau}^h$  rein imaginär werden, was für die  $T_{\nu\tau}^h$  in (15) zu Exponentialfunktionen mit rein reellen Exponenten führt; dies entspricht den an der Oberfläche lokalisierten Zuständen. Wegen der Ähnlichkeit unserer Resultate und der Ergebnisse von ABBEL ist hier seine Analyse der Bedingungen für die Oberflächenzustände ohne

weiteres anwendbar, und wir wollen sie hier nicht mehr wiederholen. Wir bemerken nur, daß jetzt, wenn sich der Koordinatenursprung in der Mitte der Schicht befindet, das  $C$  die Form

$$C = -\exp\{\mp i \vartheta_{\tau}^h (n-1)\} \frac{1-2|\Gamma_1^h| \cos \vartheta_{\tau}^h + |\Gamma_1^h| \exp\{\pm i \vartheta_{\tau}^h\}}{1-2|\Gamma_1^h| \cos \vartheta_{\tau}^h + |\Gamma_1^h| \exp\{\mp i \vartheta_{\tau}^h\}} \quad (20)$$

annimmt, und für  $C$  muß  $C = \pm 1$  erfüllt sein. Schreiben wir nach ABBEL

$$C = -\exp\{i[\vartheta_{\tau}^h (n-1) - \alpha]\},$$

dann ist

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{2|\Gamma_1^h|(1-2|\Gamma_1^h| \cos \vartheta_{\tau}^h) \sin \vartheta_{\tau}^h + |\Gamma_1^h|^2 \sin 2\vartheta_{\tau}^h}{2(1-2|\Gamma_1^h| \cos \vartheta_{\tau}^h)^2 + 2|\Gamma_1^h|(1-2|\Gamma_1^h| \cos \vartheta_{\tau}^h + |\Gamma_1^h|^2 \cos 2\vartheta_{\tau}^h)}. \quad (21)$$

Weil aus  $C = \pm 1$  die Bedingung

$$\alpha = \vartheta_{\tau}^h (n-1) - m\pi, \quad m = 0, \pm 1, \dots \quad (22)$$

folgt, sind die möglichen Zustände durch die Schnittpunkte der Funktionen  $\alpha = \alpha(\vartheta_{\tau}^h)$ , die aus (21) und (22) folgen, bestimmt.

Man hat also zwei Möglichkeiten, die zum Auffinden der  $\vartheta_{\tau}^h$ , d. h. also zur Quantisierung der Spinwellen in der Normalenrichtung führen: entweder findet man zuerst die Eigenwerte  $x_{\tau}^h$  zum System (10) und bekommt  $\vartheta_{\tau}^h$  aus (16). Durch (17) kommt man dann zu der erwünschten Form (18). Oder man kann die  $x_{\tau}^h$ , also auch die  $\vartheta_{\tau}^h$ , als unbekannt lassen und dann graphisch als Lösung des Gleichungssystems (21) und (22) finden.

Beide Möglichkeiten sind aber kaum ohne leistungsfähige Rechenmaschinen denkbar, und auch dann ist die volle Berechnung der Abhängigkeit der  $x_{\tau}^h$  (oder der  $\vartheta_{\tau}^h$ ) von  $\mathbf{h}$  praktisch unmöglich.

Es bleibt noch der in der Einführung erwähnte Zusammenhang der hier dargestellten Theorie mit der oben erwähnten Theorie von JELITTO. Wie wir sahen, ist das Zentralproblem unserer Theorie die Lösung der zu (19) gehörenden Säkulargleichung. Bei JELITTO hat eine analoge Bedeutung seine Gl. (41), die zu der Energiematrix (39) gehört. Wir können also unsere Frage auf die Frage reduzieren, ob die beiden äquivalent sind. Die Antwort ist völlig bejahend. Denn wir bekommen, bis auf den Absolutwert bei den  $\Gamma_1^h$ , wieder, dieselbe Gleichung wie die Gl. (41) von JELITTO, wenn wir (in unserer Bezeichnung) statt  $x_{\tau}^h$  eine neue Größe

$$\varepsilon_{\tau}^h / JS = z_0 + 2z_1 - z_0 \gamma_{\mathbf{h}} - x_{\tau}^h$$

einführen. Die Gl. (10) geht dann für  $S = 1/2$  in die Gl. (41) von JELITTO über. Für  $S \neq 1/2$  stellt also unsere Gl. (10) zugleich eine Verallgemeinerung der Grundgleichung von JELITTO für beliebige Spinwerte dar. Weil unsere  $T_{\nu\tau}^h$  den  $c(f)$  bei JELITTO entsprechen, haben wir also für  $S = 1/2$  eine völlige Übereinstimmung beider Theorien.

#### IV. Schlußbemerkungen

Man kann also sagen, daß man unter den in dieser Arbeit benutzten Annahmen eine einheitliche Theorie für eine ganze Gruppe von vom experimentellen Standpunkt aus als interessant angenommenen idealisierten Fällen, wie SC (100), SC (101), FCC (111), BCC (100) und hexagonal (0001), aufbauen kann. Rechnerisch am schwierigsten ist im allgemeinen die dazu nötige Lösung des Säkularproblems. Für die Mehrheit der von uns erwähnten Fälle ist die analytische Lösung heute bekannt, andere Fälle müßte man numerisch untersuchen. Über einige unserer numerischen und rein mathematischen Untersuchungen [z. B. der Fall (111)] möchten wir in einer weiteren Veröffentlichung berichten.

Zum Schluß möchten wir unseren herzlichen Dank der Leitung und allen Mitarbeitern des Instituts für Magnetische Werkstoffe der Deutschen Akademie der Wissenschaften zu Berlin in Jena für die außerordentlich freundliche und hilfsbereite Gastfreundschaft zum Ausdruck bringen. Außerdem sind wir Herrn Dr. W. HAUBENREISER für die kritische Durchsicht des Manuskripts zu Dank verpflichtet.