

Flächenpolen bestimmter Indizierung. Die Winkelzählung beginnt am Nordpol mit  $\vartheta=0$  und an der linken Seite des Äquators mit  $\varphi=0$ . Die Unterscheidung der (1 1 1)- von den (1 1 5)-Richtungen sowie die Einzeichnung der Großkreise, deren Schnittpunkte die restlichen Kristallachsen liefern, wurde durch folgende Tatsachen leicht gemacht:

1. Jeder (1 0 0)-Pol ist von vier (1 1 5)-Polen umgeben, die untereinander den Abstand von  $22^{\circ}11'$  (bzw. von  $31^{\circ}35'$  in der Diagonalen) und gegen den (1 0 0)-Pol in der Mitte den Abstand von  $15^{\circ}47'$  besitzen.

2. Je zwei (1 0 0)-Pole, zwei (1 1 0)-Pole, vier (1 1 1)-Pole und vier (1 1 5)-Pole liegen auf einem Zonenkreis, der einen [1 1 0]-Pol als Zonenachse hat. (Die Hälfte davon erscheint auf der Projektion.)

3. Je vier (1 0 0)-Pole und vier (1 1 0)-Pole liegen auf einem Zonenkreis, der einen [1 0 0]-Pol

als Zonenachse hat. (Die Hälfte davon erscheint auf der Projektion.)

Als Schnittpunkte der Großkreise ergaben sich die Normalen der Würfel- und Dodekaederebenen.

Somit war die Lage sämtlicher wichtigen Netzebenennormalen in bezug auf ein körperfestes Koordinatensystem angegeben, d. h. die Orientierung des Einkristalls war vollständig bestimmt.

Man kommt natürlich i. a. mit weniger Meßwerten aus. So wurden in praktischen Fällen jeweils etwa acht Reflexe ausgemessen. Hierfür und für die dargestellte einfache Weise der vollständigen Orientierungsbestimmung benötigt man dann bei einiger Übung insgesamt rund eine halbe Stunde Zeit.

Wir danken Herrn Professor Dr. E. Kappler für die Bereitstellung der Institutsmittel. Unser Dank gebührt auch der Notgemeinschaft der Deutschen Wissenschaft für die Überlassung der Röntgenapparatur.

## NOTIZEN

### Die elektrostatische Methode und das kombinierte Näherungsverfahren

Von H. Preuß

Max-Planck-Institut für Physik, Göttingen

(Z. Naturforschg. 10a, 165—166 [1955]; eingeg. am 28. Januar 1955)

Von Hurley<sup>1</sup> wurde vor einiger Zeit die elektrostatische Methode zur Berechnung von chemischen Bindungsenergien und -abständen diskutiert. Die auf einen Kern a eines zweiatomigen Moleküls wirkende Kraft  $\mathfrak{F}_a$  ergab sich dort zu

$$\mathfrak{F}_a = \frac{\mathfrak{R}}{R^3} - \int \frac{r_a}{r_a^3} \varrho d\tau \quad (1)$$

mit  $R$  als Kernabstand ( $\mathfrak{R}$  = Vektor) und  $r_a$ ,  $r_a$  als Abstand und Vektor des Integrationspunktes vom Kern a. Die Dichteverteilung  $\varrho$  wurde aus der normierten Gesamt molekülfunktion  $\psi$  durch

$$\varrho = \sum_i \int \psi \psi^* d\tau_i \quad (2)$$

erhalten, indem im  $i$ -ten Integral über alle Koordinaten der Elektronen außer denen des  $i$ -ten integriert wird. Der erste Term in (1) stellt die Abstoßungskraft der Kerne dar.

<sup>1</sup> A. C. Hurley, Proc. Roy. Soc. (A) 226, 170, 179, 193 [1954].

<sup>2</sup> Bezuglich der Integralbezeichnungen s. z. B. H. J. Kopineck, Z. Naturforschg. 5a, 420 [1950].

Dieses Verfahren gestattet eine allgemeinere Formulierung für die auf den Kern a in Richtung der Kernverbindungslinie wirkende Kraft  $K_a$

$$K_a = \frac{1}{R^2} - \int \frac{\partial V(r_a)}{\partial r_a} \cos \vartheta_a \varrho d\tau, \quad (3)$$

wobei  $\vartheta_a$  der Winkel zwischen  $r_a$  und  $\mathfrak{R}$  ist und  $V(r_a)$  das Potential des Kerns a bedeutet.

Im Gleichgewichtsfall des Moleküls ist  $K_a=0$  für  $R=R_0$  und die Bindungsenergie  $E$  ergibt sich zu

$$E = \frac{1}{R_0} - \int_{R_0}^{\infty} \int \frac{\partial V(r_a)}{\partial r_a} \cos \vartheta_a \varrho d\tau dR. \quad (4)$$

Die Vorteile dieser Methode bestehen im alleinigen Auftreten von Überlappungs- und Übergangsintegralen<sup>2</sup>. Zur Aufstellung der Dichte  $\varrho$  muß allerdings schon eine gewisse Kenntnis über  $\psi$  vorliegen. Der Zusammenhang dieses Berechnungsverfahrens mit anderen Methoden ist von Hurley<sup>1</sup> ausführlich behandelt worden.

Hier soll nur darauf hingewiesen werden, daß diese Methode eine Erweiterung auf Vielelektronensysteme mit Hilfe des kombinierten Näherungsverfahrens<sup>3</sup> gestattet. Im letzten wird die geforderte Orthogonalität der Eigenfunktionen der Valenzelektronen auf denen der Rumpfelektronen durch eine Zusatzkraft ersetzt,

<sup>3</sup> H. Hellmann, J. chem. Phys. 3, 61 [1935]; Acta Physicochimica URSS 1, 913 [1935].



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

die auf die Valenzelektronen wirkt und diese nach außen drückt. Hellmann und Kassatotschkin<sup>4</sup> setzten für das Zusatzpotential die analytische Form

$$V(r) = \frac{A}{r} e^{-2\kappa r} \quad (5)$$

an und bestimmten  $A$  und  $\kappa$  so, daß die erhaltenen Energiewerte mit den entsprechenden Werten für das vorliegende freie Atom (Alkali) einigermaßen überein-

<sup>4</sup> H. Hellmann u. W. Kassatotschkin, Acta Physicochimica **5**, 23 [1936].

## Zur Theorie des Nernst-Effekts bei ferromagnetischen Metallen

Von K. Meyer

Theoret. Physik. Institut der Universität Jena  
(Z. Naturforschg. **10a**, 166 [1955]; eingeg. am 31. Januar 1955)

Bekanntlich gilt für den Hall-Effekt der Ferromagnetika

$$E_y = (R_0 H_z + R_1 M_z) J_x;$$

$R_0$  und  $R_1$  sind die beiden Hall-Konstanten,  $J_x$ ,  $E_y$ ,  $H_z$ ,  $M_z$  die Komponenten von Stromdichte, elektrischer Feldstärke, magnetischer Feldstärke im Innern der Probe und Magnetisierung in Richtung der  $x$ -,  $y$ -, bzw.  $z$ -Achse eines rechtwinkligen kartesischen Koordinatensystems. Nach Messungen von Genkin und Priporowa<sup>1</sup> scheint für den Nernst-Effekt eine ähnliche Beziehung zu bestehen:

$$E_y = - (Q_0 H_z + Q_1 M_z) \frac{\partial T}{\partial x}$$

( $T$  absolute Temperatur). Für die Hall-Konstante  $R_1$  wurde kürzlich von Karplus und Luttinger<sup>2</sup> eine Theorie angegeben, während das Verhalten von  $R_0$  mit Hilfe der üblichen Leitfähigkeitstheorie unter Verwendung eines Zweibändermodells mit hinreichender Genauigkeit erklärt werden kann<sup>3</sup>. Es soll darauf hingewiesen werden, daß sich die Konstante  $Q_1$  des isothermen Nernst-Effekts ohne Schwierigkeit aus der Theorie der Hall-Konstanten  $R_1$  gewinnen läßt. Es wird ein Zweibändermodell analog dem von Sondheimer und Wilson<sup>4</sup> zugrunde gelegt: Das Band 1 soll fast leer, das Band 2 fast besetzt sein.

Die Bedingungen, unter denen der isotherme Nernst-Effekt gemessen wird, sind  $J_x = 0$ ,  $\partial T / \partial x \neq 0$ ,  $J_y = 0$ ,  $\partial T / \partial y = 0$ <sup>5</sup>. Für die Komponenten der elektrischen Stromdichte erhält man

$$J_x = \sigma E_x + \frac{e^2 \kappa}{\sigma} \cdot F(\tau_1, \tau_2) \frac{\partial T}{\partial x} \quad (\text{l. c. } 6),$$

$$J_y = \sigma E_y + r M_z E_x \quad (\text{l. c. } 2),$$

wenn die Feldabhängigkeit der Konstanten nicht betrachtet und der von  $H_z$  herrührende Anteil weg-

<sup>1</sup> N. M. Genkin u. G. P. Priporowa, Zh. eksper. teor. Fiz. **26**, 323 [1954].

<sup>2</sup> R. Karplus u. J. M. Luttinger, Phys. Rev. **95**, 1154 [1954].

<sup>3</sup> E. M. Pugh u. N. Rostoker, Rev. Mod. Phys. **25**, 151 [1953].

stimmten. Die daraus zu bildende gesamte Kraft zwischen Kern  $a$  und Elektron

$$\frac{r_a}{r_a} \frac{\partial V(r_a)}{\partial r_a} = \left( \frac{1}{r_a^3} - \frac{A}{r_a^2} e^{-2\kappa r_a} + \frac{2A\kappa}{r_a} e^{-2\kappa r_a} \right) \frac{r_a}{r_a} \quad (6)$$

kann jetzt in (3) bzw. (4) eingeführt werden und gestattet somit in dieser Form eine Anwendung der erweiterten elektrostatischen Methode auf Vielelektronensysteme, wobei zur Bildung von  $q$  nach (2) nur die Valenzelektronen berücksichtigt zu werden brauchen.

gelassen wird. Dabei bedeuten  $\sigma$  die elektrische,  $\kappa$  die Wärmeleitfähigkeit,  $e$  die Ladung des Elektrons,  $r$  eine temperaturunabhängige Konstante,  $\tau_1$ ,  $\tau_2$  die Stoßzeiten in beiden Bändern,

$$F(\tau_1, \tau_2) = \frac{n_1}{m_1} \left( \frac{\partial \tau_1}{\partial \zeta_1} + \frac{5}{4} \frac{\tau_1}{\zeta_1} \right) - \frac{n_2}{m_2} \left( \frac{\partial \tau_2}{\partial \zeta_2} + \frac{5}{4} \frac{\tau_2}{\zeta_2} \right),$$

$n_1$  die Anzahl der Elektronen im Band 1,  $n_2$  die Anzahl der Löcher im Band 2,  $m_1$ ,  $m_2$  die effektiven Massen und  $\zeta_1$ ,  $\zeta_2$  die Fermi-Grenzenergien in beiden Bändern in der Bezeichnung von Wilson<sup>4</sup>. Beachtet man die Bedingungen  $J_x = 0$  und  $J_y = 0$ , so ergibt sich

$$Q_1 = - \frac{E_y}{M_z \frac{\partial T}{\partial x}} = - \frac{e^3 r \kappa}{\sigma^3} \cdot F(\tau_1, \tau_2),$$

während für die Hall-Konstante  $R_1$  gilt

$$R_1 = - \frac{r}{\sigma^2} \quad (\text{l. c. } 3).$$

Die Temperaturabhängigkeit von  $Q_1$  sollte also der von  $R_1$  ähnlich sein. Es interessiert noch das Verhältnis von  $Q_0$  und  $Q_1$ , wobei angenommen wird, daß  $Q_0$  durch die übliche Theorie der transversalen thermomagnetischen Effekte beschrieben werden kann. Zur rohen Abschätzung mag angenommen werden, daß der Beitrag des Bandes 1 zu  $F(\tau_1, \tau_2)$  dominiert (das braucht im realen Fall nicht erfüllt zu sein, dürfte aber im allgemeinen nur das Vorzeichen, nicht die Größenordnung von  $Q_1$  berühren), ferner möge gelten  $\tau_1 \sim \zeta_1^q$  (l. c. <sup>4</sup>),  $q$  in der Größenordnung 1; man hat weiter für ein Einbändermodell mit Elektronenleitung

$$Q_0 = \frac{\kappa}{\sigma} \cdot \frac{e^2}{mc} \cdot \frac{\partial \tau_1}{\partial \zeta_1} \quad (\text{l. c. } 4).$$

Sieht man diesen angegebenen Ausdruck als charakteristisch für die Größenordnung von  $Q_0$  an, so gilt

$$\left| \frac{Q_1}{Q_0} \right| \approx 2 |r| \cdot \frac{e n_1 c}{\sigma^2},$$

d. h. die beiden Konstanten  $Q_1$  und  $Q_0$  unterscheiden sich etwa um die gleiche Größenordnung wie die beiden Hall-Konstanten  $R_1$  und  $R_0$ .

<sup>4</sup> A. H. Wilson, The Theory of Metals, Cambridge 1953.

<sup>5</sup> L. Brillouin, Quantenstatistik, Berlin 1931.

<sup>6</sup> Diese Gleichung ergibt sich aus Gl. (8.53.1) bei Wilson l. c.<sup>4</sup> unter den hier angegebenen Voraussetzungen. Dabei wird Gebrauch von dem Wiedemann-Franzschen Gesetz gemacht.