

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 lieferten, 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 Netzebenenormalen 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 Hurley¹ 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{K}_a ergab sich dort zu

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

mit R als Kernabstand (\mathfrak{R} =Vektor) und r_a , \mathbf{r}_a als Abstand und Vektor des Integrationspunktes vom Kern a . Die Dichteverteilung ϱ wurde aus der normierten Gesamtmolekülfunktion ψ 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.

¹ A. C. Hurley, Proc. Roy. Soc. (A) **226**, 170, 179, 193 [1954].

² Bezüglich 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 Kernverbindungsline 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 ϑ_a der Winkel zwischen \mathbf{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 Übergangsintegralen². Zur Aufstellung der Dichte ϱ muß allerdings schon eine gewisse Kenntnis über ψ vorliegen. Der Zusammenhang dieses Berechnungsverfahrens mit anderen Methoden ist von Hurley¹ ausführlich behandelt worden.

Hier soll nur darauf hingewiesen werden, daß diese Methode eine Erweiterung auf Vielelektronensysteme mit Hilfe des kombinierten Näherungsverfahrens³ gestattet. Im letzten wird die geforderte Orthogonalität der Eigenfunktionen der Valenzelektronen auf denen der Rumpfelektronen durch eine Zusatzkraft ersetzt,

³ 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 Kassatotschkin⁴ setzten für das Zusatzpotential die analytische Form

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

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

⁴ 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 Priporowa¹ 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 Luttinger² eine Theorie angegeben, während das Verhalten von R_0 mit Hilfe der üblichen Leitfähigkeitstheorie unter Verwendung eines Zweibändermodells mit hinreichender Genauigkeit erklärt werden kann³. 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 Wilson⁴ 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 $J_x = 0$, $\partial T / \partial x \neq 0$, $J_y = 0$, $\partial T / \partial y = 0$ ⁵. 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-

gestrichen wird. 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 σ die elektrische, κ die Wärmeleitfähigkeit, e die Ladung des Elektrons, r eine temperaturunabhängige Konstante, τ_1, τ_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 ζ_1, ζ_2 die Fermi-Grenzenergien in beiden Bändern in der Bezeichnung von Wilson⁴. 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.⁴), q in der Größenordnung 1; man hat weiter für ein Einbändermodell mit Elektronenleitung

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

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 .

¹ N. M. Genkin u. G. P. Priporowa, Zh. eksper. teor. Fiz. 26, 323 [1954].

² R. Karplus u. J. M. Luttinger, Phys. Rev. 95, 1154 [1954].

³ E. M. Pugh u. N. Rostoker, Rev. Mod. Phys. 25, 151 [1953].

⁴ A. H. Wilson, The Theory of Metals, Cambridge 1953.

⁵ L. Brillouin, Quantenstatistik, Berlin 1931.

⁶ Diese Gleichung ergibt sich aus Gl. (8.53.1) bei Wilson l. c.⁴ unter den hier angegebenen Voraussetzungen. Dabei wird Gebrauch von dem Wiedemann-Franz'schen Gesetz gemacht.