Archiv von Heisenbergs Briefen

von: Werner Heisenberg
an: Pauli
Datum: 03.05.1928
Stichworte: Ferromagnetismus durch Austauschwechselwirkung
Ursprung: Pauli Archiv in Genf
Kennzeichen im Pauli Archiv in Genf: heisenberg_0017-050r
Meyenn-Nummer: 192

Curiepunkt? Göttingen –

1.) E_0 einführen
2.) allein I_{12} negativ Paramagnetismus?
3.) $n^2 - n + q^2 - q - qn$
Fehlen von Austausch-entartung

Institut für theoretische Physik der Universität

LEIPZIG C 1, den 3. V. 28.
Linnéstr. 5

Lieber Pauli!

Über die wichtigeren Probleme weiss ich heut gar nichts Neues; aber, um mich nicht dauernd mit Dirac herumzuärgern, hab ich mal was anderes, nämlich Ferromagnetismus getrieben, und davon möcht ich Dir jetzt erzählen. Zunächst allgemein zur Frage der Metalle (siehe auch Blochs Arbeit!): Man kann sich dreierlei Approximationen an die Wirklichkeit vorstellen:

1.) die „Pauli-Sommerfeldsche", d.h. freie Elektronen mit Fermi-Statistik, die Wechselwirkung der Elektronen untereinander ist vernachlässigt.

2.) Die Blochsche: Der Wirkung des Gitters ist durch Zellblockpotentiale Rechnung getragen, die Wechselwirkung der Elektronen ist ebenfalls vernachlässigt gegenüber den andern Kräften.

3.) Die, sagen wir, London-Heitlersche; damit meine ich folgendes: Der Austausch der valenz Elektronen irgend zweier Atome im Gitter werde à la L.-Heitl. berücksichtigt. Dabei werden aber in erster Linie nur die Zustände betrachtet, bei denen alle Elektronen im Grundzustand bleiben.

die Approximation 3. ~~statt~~ führt offenbar zu einer geringeren Termmannigfaltigkeit als 2. und 1. z. B. im Falle zweier Wasserstoffatome (Lo.-Heitl.) würden bei Methode 1 und 2 folgende vier Zustände in erster Näherung gleiche Energie haben:

Kern a	K. b
I 1	2
II 2	1
III 12	—
IV —	12

(1 bzw. 2 Nummer des Elektrons).

Bei Methode 3 dagegen überlegt man sich, dass nur die Energiewerte von I und II nahezu gleich werden, ebenso III und IV, dass aber Term III u. IV (zwei Elektronen am selben Kern) viel höher liegen als I und II. Es scheint mir vernünftig, diese Überlegung von Lo.- und Heitl. auch auf die Metalle zu übertragen, d. h. zunächst nur die Zustände, bei denen 1 Elektron pro Atom vorhanden ist (bzw. mehrere Valenzelektronen je nach Metall ~~B~~, also jedes Atom gleichviele Elektronen hat) und deren Austauschmöglichkeiten zu berücksichtigen.

Ich glaube nun, dass man (denn, wenn die beste Approxim. liefert ~~bei~~ Methode 3) unter geeigneten Umständen Ferromagnetismus bekommen kann. (Bei den Metallen, bei denen die Approximation 1 und 2 gut konvergiert, bekommt man ja sicher keinen F. M. nach deiner Arbeit). Also zunächst: wenn die Wechselwirkung der Elektronen klein gegen die übrigen Störungen ist, bekommt man sicher keinen F. M. Wenn sie dagegen entscheidend

Institut für theoretische Physik
der Universität

LEIPZIG C 1, den
Linnéstr. 5

wird, so dass Mat. 3 vernünftig wird, so geht die Rechnung so weiter: Man hat nun nach Lo. und Heitl. einfach n Elektronen, die auf n verschiedene[1] Quantenzellen verteilt werden. (Vgl. bes. die letzte Arbeit von Heitler ZS f. Phys. 47, 835, bes. Fussnote S. 849). Das gesamte Termsystem zerfällt in Gruppen von Teilsystemen à la Wigner. Zu jedem System gehört ein resultierendes Gesamtspinmoment aller Elektronen. Dies sei ~~[illegible]~~ j. (Wenn n geradzahlig ist, was man etwa der Einfachheit halber annimmt, wird j ganzzahlig). Es handelt sich jetzt darum, die Energie des gestörten Systems als Funktion von j aufzusuchen. Zwar haben auch die Systeme mit gleichem j ~~unter~~ ~~[illegible]~~ allgemein verschiedene Energien, aber uns interessiert nur die mittlere Energie, also der heitlersche „Energieschwerpunkt" aller Terme mit gleichem j. Die Energieformel heisst nach Heitler (ZS. 46, S. 63)

---

1) Die Argumentation deiner Arbeit über Suszeptibilität ist also nicht anwendbar.

$f^{\sigma} E^{\sigma} = \sum_{P} \chi_{P}^{\sigma} J_{P}$. (der ~~H~~ Normierungsfaktor f^{σ} ist bei Heitler weggelassen, H. ~~bekommt also nicht~~ meint mit E^{σ} nicht den Schwerpunkt, sondern die Summe der Energiewerte). Auf der rechten Seite ist über alle Permutationen zu S summieren, χ_{P}^{σ} bedeutet den Gruppencharakter, der zur „Darstellung σ", Permutation P gehört, J_{P} ist die Summe der Austauschenergien bei Permutation P, ~~P also~~ und aller anderen zur selben Klasse gehörigen Permutationen. Da nur je zwei Elektronen aufeinander wirken, ~~braucht nur~~ wird nur J_{E} und $J_{(12)}$ von Null verschieden. Es kommt natürlich nur auf $J_{(12)}$ an und man sieht, dass für sämtliche j-Werte als einzige zunächst unbekannte Konstante die <u>Summe aller Austauschglieder</u> eingeht. Für die Energieformel in Abhängigkeit von j ist also die Art, wie die Resonanzkräfte vom Abstand abhängen, <u>völlig gleichgültig</u>. (Im Gegensatz zur Arbeit von Ising!). Die Ausrechnung von E_{σ} ist nun einfach: Nach Pauli-Prinzip gehört zum Gesamtspin j die Partition $\frac{n}{2}-j, \frac{n}{2}+j$ (~~bei~~ n sei gerade); man braucht also nur die Werte von f_{σ} und $\chi_{(12)}^{\sigma}$ zur Partition σ: $(\frac{n}{2}-j, \frac{n}{2}+j)$.

Nach Wigner u. Heitler (ZS. 47, S. 855) heissen die:

Institut für theoretische Physik
der Universität

LEIPZIG C 1, den
Linnéstr. 5

$$f_{\frac{n}{2}-j,\, \frac{n}{2}+j} = \frac{n!\,(2j+1)}{(\frac{n}{2}-j)!\,(\frac{n}{2}+j+1)!} = \binom{n}{\frac{n}{2}-j} - \binom{n}{\frac{n}{2}-j-1}$$

(siehe auch ZS. 41, S. 256 Gl 31).

$$\chi^{(12)}_{\frac{n}{2}-j,\, \frac{n}{2}+j} = -\frac{(n-2)!\,(2j+1)}{(\frac{n}{2}-j)!\,(\frac{n}{2}+j+1)!}\left(n^2 - n + \xi^2 - \xi - n\xi\right) \quad \text{wo } \xi = \frac{n}{2}-j$$

$$= -\frac{''}{''}\left(\frac{3}{4}n^2 - \frac{3}{2}n + j(j+1)\right)$$

Also schliesslich

$$E_{(12)} = -\frac{\frac{3}{4}n^2 - \frac{3}{2}n + j(j+1)}{n(n-1)} \cdot J_{(12)} + J_E .$$

Es kommt nun natürlich alles aufs Vorzeichen von $J_{(12)}$ an. Für negative $J_{(12)}$ ~~ist~~ liegt $j = 0$ am tiefsten, also kein Ferromagnetismus; dies ist nach London u. Heitler der normale Fall; wenn es aber vorkommt[1], dass $J_{(12)}$ ~~negativ~~ positiv wird, so gibt es Ferromagnetismus: man kann dies schon daraus ersehen, dass E_σ mit j^2 wächst. Der Energiezuwachs bei Parallelstellung eines weiteren Elektrons ist proportional der Anzahl der bereits eingestellten (nämlich prop j).

Fügt man noch ein äusseres Feld hinzu, H, und nimmt an, dass die Richtung von j im ganzen Metall „entartet" sei, dann wird die Zustandssumme:

1) Das Londonsche Gegenargument gilt wohl nur für Atome mit s-Termen (ohne Knoten).

$$\sum = \sum_{|m|}{}^{m} \sum^{n}{}^{j} e^{+\alpha m + \beta j(j+1)} \cdot f_{\frac{n}{2}-j \mid \frac{n}{2}+j}$$

wo $\alpha = \frac{H}{kT}$; $\beta = \frac{\text{Const}}{kT}$. Es wird

$$\sum = \sum_{-\frac{n}{2}}^{+\frac{n}{2}}(m) \sum_{|m|}^{\frac{n}{2}}(j)\, e^{+\alpha m + \beta j(j+1)} \left[\binom{n}{\frac{n}{2}-j} - \binom{n}{\frac{n}{2}+j-1} \right]$$

dies wird durch ~~ein~~ „partielle Integration"

$$= \sum_{-\frac{n}{2}}^{+\frac{n}{2}}{}_{m}\, e^{\alpha m + \beta m(m+1)} \binom{n}{\frac{n}{2}-m} + \underbrace{\sum_{-\frac{n}{2}}^{+\frac{n}{2}}{}_{m} \sum_{|m|}^{\frac{n}{2}}{}_{j} \left(e^{\beta j(j+1)} - e^{\beta j(j-1)} \right) \binom{n}{\frac{n}{2}-j}}_{S}$$

Die zweite Summe S ~~kann~~ kann bei ~~klein~~ hinreichend kleinen Werten β vernachlässigt werden, da sie den „Diff quot" von $e^{\beta j(j+1)}$ enthält. (Jedenfalls weiss ich nicht, wie ich sie berechnen soll). Zur Auswertung der ersten Summe nimmt man etwa an, dass die Summanden ein steiles Maximum in der Nähe des schliesslichen Mittelwertes $m = m_0$ aufweisen werden, dann wird $m(m+1)$ entwickelt $=$

$$(\overline{m - m_0} + m_0)(\overline{m - m_0} + m_0 + 1) \approx (m - m_0)(2m_0 + 1) + m_0(m_0+1) = m(2m_0+1) + \text{Const.}$$

Es folgt

$$\sum = \sum_{-\frac{n}{2}}^{+\frac{n}{2}}{}_{m}\, e^{[\alpha + \beta(2m_0+1)]m} \binom{n}{\frac{n}{2}-m} = \left(e^{\frac{\alpha + \beta(2m_0+1)}{2}} + e^{-\frac{\alpha+\beta(2m_0+1)}{2}} \right)^{n}$$

Also $\frac{\partial}{\partial\alpha} \log \sum = n \frac{\partial}{\partial \alpha} \log \operatorname{Cof} \frac{\alpha + \beta(2m_0+1)}{2}$

$$\boxed{m_0 = \frac{n}{2} \operatorname{Tg} \frac{\alpha + \beta(2m_0+1)}{2}}$$ d. h. die Weissche Formel.

So, einen neuen Bogen fang ich nicht mehr an, obwohl ich noch eine Reihe von Bedenken gegen diese Theorie nachtragen könnte. Also schreibt mal wieder!

viele grosse Grüsse v. Heisenberg.