7. Übung (Abgabe Di. 14. Dezember 2010 zu Beginn der Vorlesung oder spätestens bis 16:00 im Briefkasten im Sekretariat bei Frau Badow)

---

25. Quenching am Beispiel des *p*-Orbitals

Die orthonormierten *p*-Orbitale des Wasserstoffatoms sind definiert als:

$$\psi_{210} = \frac{r}{4\sqrt{2\pi}\, a_0^{5/2}}\, e^{-r/2a_0} \cos\theta \text{ und } \psi_{21\pm1} = \frac{r}{8\sqrt{\pi}\, a_0^{5/2}}\, e^{-r/2a_0} \sin\theta\, e^{\pm i\phi}, \text{ mit } r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}.$$

Es gilt: $\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi^*_{n'l'm'} \psi_{nlm} r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi = \delta_{n'n}\delta_{l'l}\delta_{m'm}$ und $L_z \psi_{21m} = m\psi_{21m}$. Die Entartung der Energie-Niveaus wird in einem durch ein tetragonales Kristallfeld erzeugten Potential der Form

$$\varphi_{Kristall}(x,y,z) = \alpha\left(x^2 + y^2 - 2z^2\right) = \alpha r^2\left[\sin^2(\theta)\cos^2(\phi) + \sin^2(\theta)\sin^2(\phi) - 2\cos^2(\theta)\right]$$

aufgehoben. Die der tetragonalen Symmetrie angepassten Eigenfunktionen sind nun:

$$\psi_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{21+1} + \psi_{21-1}\right),\ \psi_y = \frac{1}{\sqrt{2}\, i}\left(\psi_{21\pm1} - \psi_{21\pm1}\right),\ \psi_z = \psi_{210}.$$

(a) Zeigen Sie zunächst, dass $\varphi_{Kristall}$ die Laplace-Gleichung $\Delta\varphi_{Kristall} = 0$ erfüllt.

(b) Zeigen Sie nun, dass die Entartung aufgehoben wird, indem Sie die Energie-Verschiebung in 1. Ordnung Störungstheorie betrachten: $\Delta E_i = \langle \psi_i | e\varphi_{Kristall} | \psi_i \rangle$, $i = x,y,z$.

(c) Beweisen Sie schließlich, dass der Erwartungswert von L_z null wird: $\langle \psi_i | L_z | \psi_i \rangle = 0$ für $i = x,y,z$.

<u>Hinweis</u>: In Teilaufgabe (b) reicht es zu zeigen, dass die Integrale für die verschiedenen ψ_i *nicht mehr gleich sind. Nutzen Sie dazu die Symmetrie der trigonometrischen Funktionen.*

(3 Punkte)

26. Wärmekapazität verdünnter magnetischer Legierungen

Zeigen Sie, dass der magnetische Anteil der Wärmekapazität einer paramagnetischen Legierung gegeben ist durch:

$$C_{para} = Nk_B \frac{x^2}{\cosh^2 x}, \quad x = \frac{\mu B_0}{kT},$$

wobei μ das magnetische Moment und N die Anzahl der paramagnetischen Ionen bezeichnet.
<u>Hinweis</u>: Benutzen Sie für die Herleitung ein Zwei-Niveau-Modell wie in der Vorlesung beim Curie-Gesetz.

(2 Punkte)

27. Magnetisierung nahe bei T_C

Für $T \to T_C$ ($T < T_C$) geht die Magnetisierung stetig gegen null ($M \to 0$). Zeigen Sie, dass für Spin $J = 1/2$ in der Molekularfeld-Näherung gilt:

$$M(T) \cong \sqrt{3}\, N\mu \frac{(T_C - T)^{\frac{1}{2}}}{T_C}, \quad \text{für } \frac{T_C - T}{T_C} << 1.$$

(a) Beweisen Sie zunächst, dass $\tanh(x) = x - \frac{1}{3}x^3$ für $x \to 0$.

(b) Berechnen Sie nun die Magnetisierung für $J = 1/2$ in der Molekularfeldnäherung für $T \to T_C$, indem Sie den Ansatz $M = N\mu B_J(x)$ verwenden ($x = \mu B_a/k_B T$) und in der Brillouin-Funktion $B_J(x)$ das äußere Feld B_a durch das Molekularfeld $B_{eff} = \mu_0\lambda M$ ersetzen.

Bitte wenden!

7. Übung (Abgabe Di. 14. Dezember 2010 zu Beginn der Vorlesung oder spätestens bis 16:00 im Briefkasten im Sekretariat bei Frau Badow)

(2 Punkte)

28. Magnetisierung in der Nähe von T = 0 K

Für *T* $\rightarrow$ *0 K* geht die Magnetisierung stetig gegen die Sättigungsmagnetisierung M_s. Zeigen Sie, dass für Spin $J = 1/2$ die Molekularfeld-Näherung (fälschlicherweise) voraussagt, dass die spontane Magnetisierung exponentiell vom Sättigungswert abweicht, d.h.

$$[M_s - M(T)] \propto e^{-\frac{\Delta E_{MF}}{kT}}, \quad \text{für } T \rightarrow 0\,K.$$

Hinweis: Beweisen Sie zunächst, dass $\tanh(x) = 1 - 2e^{-2x}$ *für* $x \rightarrow \infty$. *Gehen Sie dann ähnlich vor wie in Aufgabe 27.*

(2 Punkte)

Bitte wenden!