7. Übung (Abgabe Di. 13. Dezember 2011 zu Beginn der Vorlesung oder spätestens bis 16:00 im Briefkasten im Sekretariat bei Frau Badow)

---

24. Van-Vleck-Paramagnetismus

Der Van-Vleck-Paramagnetismus beschreibt, wie in der Vorlesung gezeigt, einen Effekt in zweiter Ordnung Störungstheorie, wobei der Störungsterm $H_{int} = -\mu_z B_0$ ist, mit dem magnetischen Dipolmoment $\mu_z = -\mu_B (L_z + g_0 S_z)$ und $\vec{B}_0 = B_0 \vec{e}_z$. In erster Ordnung gilt $\langle 0 | H_{int} | 0 \rangle = 0$, es existiert jedoch ein angeregter Zustand $|s\rangle$, der über H_{int} angeregt werden kann: $\langle s | H_{int} | 0 \rangle \neq 0$ Aus der Quantenmechanik ist bekannt, dass in diesem Fall der ungestörte Grundzustand $|0\rangle$ übergeht in einen gestörten $|0'\rangle$, der eine Beimischung des angeregten Zustandes $|s\rangle$ enthält: $|0'\rangle = |0\rangle - \dfrac{\langle s | H_{int} | 0 \rangle}{E_s - E_0} |s\rangle$, wobei E_i die Energie des Zustandes $|i\rangle$ ist. Zeigen Sie, dass der gestörte Grundzustand jetzt ein magnetisches Moment enthält, d.h. das für den Erwartungswert $\langle \mu_z \rangle = \langle 0' | \mu_z | 0' \rangle \neq 0$ gilt und leiten Sie daraus die Suszeptibilität χ her, die natürlich den gleichen Wert haben muss, wie diejenige, welche in der Vorlesung aus der Energieverschiebung hergeleitet wurde. Betrachten Sie dafür wieder N gleiche Ionen im Volumen V.

<u>Hinweis</u>: Benutzen Sie für die Herleitung die üblichen Beziehungen zwischen Magnetisierung M *und magn. Dipolmoment* μ_z *sowie zwischen* M *und der Suszeptibilität* χ.

(4 Punkte)

25. Quenching am Beispiel des *p*-Orbitals

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

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

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:

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

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

(b) Zeigen Sie weiter, 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 nun, 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.*

(6 Punkte)

26. Wärmekapazität verdünnter magnetischer Legierungen

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

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

wobei μ das magnetische Moment und *N* die Anzahl der paramagnetischen Ionen bezeichnet.

<u>*Hinweis*</u>*: Benutzen Sie ein Zwei-Niveau-Modell wie in der Vorlesung bei der Herleitung des Curie-Gesetzes, wobei die Energieaufspaltung der beiden Niveaus* $\delta E = \pm\mu B_0$ *betragen soll. Die innere Energie* U *ergibt sich aus der Anzahl der besetzten Energieniveaus multipliziert mit der Energie des jeweiligen Niveaus.*

(4 Punkte)