Zusammenfassung vom 26.11.2010

thermische Besetzung der Niveaus (*2-Niveau-Modell*)

$$\frac{N_1}{N} = \frac{e^{\frac{\mu_B B_0}{kT}}}{e^{\frac{\mu_B B_0}{kT}} + e^{-\frac{\mu_B B_0}{kT}}}$$

$$\frac{N_2}{N} = \frac{e^{-\frac{\mu_B B_0}{kT}}}{e^{\frac{\mu_B B_0}{kT}} + e^{-\frac{\mu_B B_0}{kT}}}$$

N_i = *Anzahl besetzte Zustände im Energie-Niveau i*

$N = N_1 + N_2$ = *Anzahl Ionen im Volumen V*

Magnetisierung (*2-Niveau-Modell*)

$$\Rightarrow \quad M = \frac{1}{V}(N_1 - N_2)\mu = \frac{N}{V}\mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B B_0}{kT}\right)$$

$\mu = \mu_B$ = *magnet. Moment*

$$\Rightarrow \quad M = \frac{N}{V}\frac{\mu_B^2 B_0}{kT}$$

für $x = \frac{\mu_B B_0}{kT} << 1$

Magnetisierung (*allgemein*)

$$M = \frac{N}{V} g(JLS)\mu_B J B_J(x) \qquad x = g(JLS)\mu_B \frac{J B_0}{kT}$$

Brillouin-Funktion

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J}\coth\left[\frac{(2J+1)x}{2J}\right] - \frac{1}{2J}\coth\left[\frac{x}{2J}\right]$$

$$\Rightarrow \quad B_J(x) = \frac{J+1}{3J}x$$

($x << 1$)

paramagnetische Suszeptibilität *(Curie-Gesetz)*

$$\chi = \mu_0 \frac{M}{B_0} = \mu_0 \frac{N}{V} \frac{J(J+1)g^2(JLS)\mu_B^2}{3kT} = \mu_0 \frac{N}{V} \frac{p^2\mu_B^2}{3kT} = \frac{C}{T}$$

(x << 1)

Curie-Konstante

$$C = \mu_0 \frac{N}{V} \frac{p^2\mu_B^2}{3k}$$

effektive Anzahl Bohr'sche Magnetonen

$$p = g(JLS)\sqrt{J(J+1)}$$

Van-Vleck-Paramagnetismus (*J = 0 bei nicht voller Schale*)

$$\Delta E_n = \sum_{n' \neq n} \frac{\left|\langle n | H_{int} | n' \rangle\right|^2}{E_n - E_{n'}} = \sum_{n' \neq n} \frac{\left|\langle n | \mu_B \vec{B}_0 \cdot (\vec{L} + g_0 \vec{S}) | n' \rangle\right|^2}{E_n - E_{n'}}$$

➔ $H_{int} = \mu_B \vec{B}_0 \cdot (\vec{L} + g_0 \vec{S})$

➔ $\chi = 2\mu_0\mu_B^2 \frac{N}{V} \sum_{n \neq 0} \frac{\left|\langle 0 | L_z + g_0 S_z | n \rangle\right|^2}{E_n - E_0} > 0 \qquad \vec{B}_0 = B_0 \vec{e}_z$

Bemerkung: ➔ *Korrektur zum Langevin Paramagnetismus.*

➔ *tritt auf, wenn ein angeregter Zustand |s> existiert, der über H_{int} angeregt werden kann: $\langle s|H_{int}|0\rangle \neq 0$, wobei $E_s - E_0 >> kT$.*

➔ *der ungestörte Grundzustand |0> geht dann in einen gestörten Grundzustand|0'> über, der eine Beimischung von |s> enthält:*

$$|0'\rangle = |0\rangle + \langle s|H_{int}|0\rangle / (E_s - E_0)\, |s\rangle.$$

Zusammenfassung vom 26.11.2010

Quenching des Bahndrehimpulses
(*für 3d-Übergangsmetalle*)

- *experimentelle Werte von* p *stimmen in* 3d-*Übergangsmetallen sehr schlecht mit den Werten anhand der Hund'schen Regeln überein*
- *gute Übereinstimmung nur dann, wenn* $\vec{L} = 0$ *gesetzt wird, also gilt :* $\vec{J} = \vec{S}$
- *Quenching des Bahndrehimpulses*

Ursachen

- *in* 3d-*Metallen sind die* 3d-*Elektronen die Valenzelektronen*
- *spüren das Kristallfeld der Nachbar-Ionen*
- *da* $\Delta E_{Kristallfeld} > \Delta E_{Spin\text{-}Bahn}$, *Spin-Bahn-Kopplung vernachlässigbar*
- *Spin-Multiplett bleibt entartet, aber die* $2l+1$ *Niveaus des Bahndrehimpulses L spalten auf*