Zusammenfassung vom 25.11.2011

Russel-Saunders-Kopplung
(Vernachlässigung der Spin-Bahn-Kopplung)

$$\vec{L} = \sum_i \vec{L}_i \qquad \vec{S} = \sum_i \vec{S}_i \qquad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

$\vec{L}_i$, $\vec{S}_i$ = *Bahndrehimpuls und Spin des i-ten Elektrons*

sind Erhaltungsgrößen

➔ H *vertauscht mit* L^2, L_z, S^2, S_z, J^2 *und* J_z

➔ *diese Operatoren besitzen die Eigenwerte* $l(l+1)$, m_l, $s(s+1)$, m_s, $j(j+1)$ *und* m_j

Hund'sche Regeln

➔ *Bestimmung des Grundzustands von freien Ionen mit teilweise gefüllter Schale*

➔ *nicht gut für ganz schwere Elemente*

1. Hund'sche Regel $S = \left|\sum_{i=1}^{n} S_{z,i}\right| = \text{maximal}$

n = *Anzahl Valenzelektronen*

$S_{z,i}$ = *z-Komponente von* $\vec{S}_i$ *des i-ten Elektrons*

2. Hund'sche Regel $L = \left|\sum_{i=1}^{n} L_{z,i}\right| = \text{maximal}$

$L_{z,i}$ = *z-Komponente von* $\vec{L}_i$ *des i-ten Elektrons*

(unter Berücksichtigung der 1. Hund'schen Regel)

3. Hund'sche Regel

$J = |L - S|$ für $n \le 2l+1$ *(Schale weniger als halb voll)*

$J = L + S$ für $n > 2l+1$ *(Schale mehr als halb voll)*

Beispiel zu den Hund'schen Regeln

Dy^{3+}: [Xe] $4f^9\ 5s^2p^6$ ➔ $l = 3$, $n = 9$ *(Schale mehr als halb voll)*

➔ **1. Hund'sche Regel:** **S = maximal**

$m_s \backslash m_l$	-3	-2	-1	0	1	2	3
+½	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑
-½	↓	↓					

$m_s \backslash m_l$	-3	-2	-1	0	1	2	3
+½	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑
-½		↓				↓	

➔ S = 5/2

➔ **2. Hund'sche Regel:** **L = maximal**

$m_S \backslash m_l$	-3	-2	-1	0	1	2	3
+½	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑
-½						↓	↓

➔ L = 5

➔ **3. Hund'sche Regel:** $J = |L - S|$ für $n \leq 2l+1$ *(Schale weniger als halb voll)*

$J = L + S$ für $n > 2l+1$ *(Schale mehr als halb voll)*

➔ $J = L + S = 15/2$

➔ ${}^{2S+1}L_J = {}^6H_{15/2}$

Zusammenfassung vom 25.11.2011

spektroskopische Notation $^{2S+1}L_J$ **L = S (= 0), P (= 1), D (= 2), F (= 3), G (= 4), H (= 5), I (= 6), J (= 7)**

Wigner-Eckart-Theorem

$$\langle JLSJ_z | L_z + g_0 S_z | JLSJ'_z \rangle = g(JLS) \langle JLSJ_z | J_z | JLSJ'_z \rangle = g(JLS) m_j \delta_{J_z, J'_z}$$

$|JLSJ_z\rangle$ ***passende Basis***

Landé g-Faktor

$$g(JLS) = \tfrac{1}{2}(g_0 + 1) - \tfrac{1}{2}(g_0 - 1)\frac{L(L+1) - S(S+1)}{J(J+1)}$$

$$\Rightarrow \quad g(JLS) \cong 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \qquad (g_0 \cong 2)$$

totales magn. Moment
(*in der* |JLSJ$_z$> *-Basis*)

$$L_z + g_0 S_z = g(JLS) J_z$$

$$\Rightarrow \quad \mu_z = -g(JLS)\mu_B \langle JLSJ_z | J_z | JLSJ_z \rangle$$

Langevin Paramagnetismus
(*Ionen mit nicht vollen Schalen*)

$$\Delta E_n = \mu_B \vec{B}_0 \cdot \langle n | \vec{L} + g_0 \vec{S} | n \rangle = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0$$

$$\Rightarrow \quad \Delta E_n = m_j g(JLS) \mu_B B_0 \qquad \vec{B}_0 = B_0 \vec{e}_z, \quad |n\rangle = |JLSJ_z\rangle$$

Zusammenfassung vom 25.11.2011

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

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

$$\rightarrow \quad B_J(x) = \frac{J+1}{3J}x \qquad (x << 1)$$