

Zusammenfassung vom 02.12.2011

Pauli-Paramagnetismus

- Elektronen in Metallen besitzen ein magnetisches Moment $\mu = 1 \mu_B$, da sie einen Spin $\pm 1/2$ tragen
- naive Überlegung führt zu eine Temperaturabhängigkeit wie beim Curie-Gesetz
- Experiment zeigt jedoch einen **temperaturunabhängigen** Beitrag der freien Elektronen in (nicht magnetisch ordnenden) Metallen

- Erklärung**
- nur der Bruchteil T/T_F der Elektronen mit einer Energie $\Delta E \cong kT$ kann seinen Spin umorientieren (wegen Pauli-Prinzip)
 - jedes Elektron spürt gleich große Zeeman-Aufspaltung $\Delta E = \pm \mu_B B_0$
 - Verschiebung der Zustandsdichten für Spin $\pm 1/2$ als Ganzes um $\pm \mu_B B_0$

Elektronendichte: $n_{\pm} = \frac{1}{2} \int_{\pm\mu_B B_0}^{\infty} dE' D(E' \mp \mu_B B_0) f(E')$ $n_{\pm} = N_{\pm}/V =$ *Dichte der Elektronen mit Spin $\pm 1/2$*

mit $D(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} = \frac{3n}{2E}$ $D(E) =$ *Zustandsdichte der Elektronen*

mit $E = E' \mp \mu_B B_0$

$\rightarrow n_{\pm} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dE D(E) f(E \pm \mu_B B_0)$

mit $f(E \pm \mu_B B_0) \cong f(E) \pm \mu_B B_0 \frac{df(E)}{dE}$ *und* $\frac{df(E)}{dE} \cong -\delta(E - E_F)$

$\rightarrow n_{\pm} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dE D(E) f(E) \mp \frac{1}{2} \mu_B B_0 \int_0^{\infty} dE D(E) \delta(E - E_F)$

$\rightarrow n_{\pm} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dE D(E) f(E) \mp \frac{1}{2} \mu_B B_0 D(E_F)$

Pauli-Spinmagnetisierung: $M = -(n_+ - n_-) \mu_B = \mu_B^2 B_0 D(E_F) = \frac{3n\mu_B^2}{2E_F} B_0$

Pauli-Suszeptibilität: $\chi_{\text{Pauli}} = \mu_0 \frac{dM}{dB_0} = \mu_0 \mu_B^2 D(E_F) = \frac{3n\mu_0 \mu_B^2}{2E_F}$

Landau-Diamagnetismus: $\chi_{\text{Landau}} = -\frac{1}{3}\chi_{\text{Pauli}}$

Paramagnetismus der freien Elektronen: $\rightarrow \chi_{\text{freieEl}} = \frac{2}{3}\chi_{\text{Pauli}} = \frac{2}{3}\mu_0\mu_B^2 D(E_F) = \frac{n\mu_0\mu_B^2}{E_F}$

Ferromagnetismus: *kritische Temperatur: Curie-Temperatur T_C*

- $\rightarrow T > T_C$: paramagnetisch, $T < T_C$: ferromagnetisch
- \rightarrow alle magnetischen Momente besitzen eine Komponente in der gleichen Richtung
- \rightarrow es existiert *spontane makroskopische Magnetisierung* (auch ohne äußeres Feld)

Hamilton-Operator für H_2 -Molekül: (ohne Spin)

$H(1,2) = H(1) + H(2) + H(A, B) + H_{\text{ww}}(1,2)$ $\mathbf{r}_{A,B}$ = Ort der Kerne A, B
 $\mathbf{r}_{1,2}$ = Ort der Elektronen 1,2

mit $H(i) = \frac{\vec{p}_i^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(\vec{r}_A - \vec{r}_i)} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(\vec{r}_B - \vec{r}_i)}$ *Einelektron-Operator*

$H_{\text{ww}}(1,2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}$

$H(A, B) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(\vec{r}_A - \vec{r}_B)}$

Elektron-Elektron-Wechselwirkung

Kern-Kern-Wechselwirkung

Wellenfunktion $\psi(1,2) = [\varphi_A(1) + \varphi_B(1)][\varphi_A(2) + \varphi_B(2)]$ $\varphi_X(\mathbf{i}) = \text{Einelektron-Wellenfunktion des Elektrons } i \text{ am Kern } X$

$$= \varphi_A(1)\varphi_B(2) + \varphi_B(1)\varphi_A(2) + \varphi_A(1)\varphi_A(2) + \varphi_B(1)\varphi_B(2)$$

Näherung von Heitler und London

$\varphi_A(1)\varphi_A(2)$ und $\varphi_B(1)\varphi_B(2)$ werden vernachlässigt, da ionische Zustände mit hoher Coulomb-Energie durch $H_{ww}(1,2)$

$$\psi_s(1,2) = \varphi_A(1)\varphi_B(2) + \varphi_B(1)\varphi_A(2)$$

→ **Singulett-Zustand ($S=0$) für Spin**

$$\psi_t(1,2) = \varphi_A(1)\varphi_B(2) - \varphi_B(1)\varphi_A(2)$$

→ **Triplet-Zustand ($S=1$) für Spin**

folgt aus der Antisymmetrie der Gesamtwellenfunktion