

## Übungsblatt 6

### Themen für Kurzvorträge

- **Valenzbindungsnaheerung für das H<sub>2</sub><sup>+</sup> Ion (GM 3.4.2.2)**

#### 1. Wiederholungs-Aufgaben

- Was ist die Austauschwechselwirkung und welche „Zutaten“ werden hierfür benötigt?
- Welche beiden Näherungen haben wir zur Wechselwirkung des H<sub>2</sub>-Molekül und dessen Elektronen kennengelernt? Was sind hier die Unterschiede?
- Was ist das Coulomb-Integral? Beschreiben Sie kurz die physikalische Bedeutung
- Was ist das Austausch-Integral? Beschreiben sie kurz die physikalische Bedeutung
- Welcher Elementkristall hat die höchste Curie Temperatur?

#### 2. Heisenberg Exchange Interaction

In der Vorlesung haben wir das Heisenberg-Modell vorgestellt

$$H_{ex} = J \cdot \vec{S} \cdot \vec{I}$$

Wobei  $\vec{S}$  und  $\vec{I}$  zwei Elektronenspins  $\frac{1}{2}$  sind. Zusätzlich setzen wir  $\hbar = 1$ .

- Berechnen Sie die Eigenenergien des Spinsystems und geben Sie die jeweiligen Eigenzustände an.

**Hinweise:** Verwenden Sie  $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$  und schreiben Sie die Gleichung in Bezug auf die Leiteroperatoren  $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$ , (verwenden Sie  $S_x I_x + S_y I_y = \frac{1}{2}[S_+ I_- + S_- I_+]$ ). Der Leiteroperator ändert den jeweiligen Spinzustand, z. B.  $S_+ |\downarrow\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$ . Wenden Sie als nächstes den Hamilton-Operator auf die Zustände  $|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle$  an. Nicht alle davon werden Eigenzustände sein, aber verwenden Sie die in der Vorlesung besprochenen Zustände, um die richtigen Energien und Grundzustände zu finden.

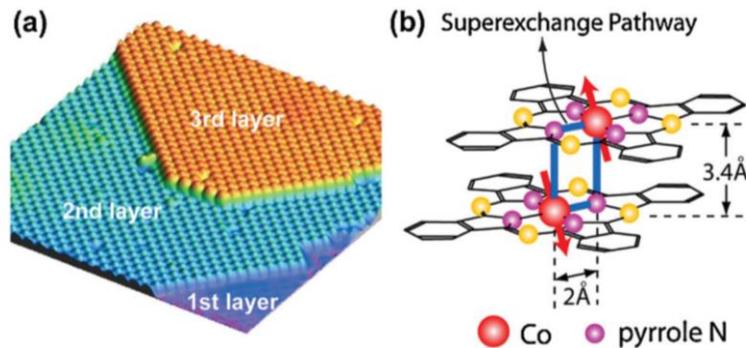
- Wie sind die Energien im Vergleich zum Grundzustand eines reinen Zeeman-Hamilton Operators?

$$H_{Zeeman} = g_e \mu_B B_z \cdot (S_z + I_z)$$

Zeichnen Sie ein qualitatives Diagramm, das den Übergang zwischen den in a) berechneten Energien bis zum Grenzwert zeigt, bei dem  $E_{Zeeman} \gg E_{Ex}$  ist. Was passiert mit dem Grundzustand?

- Die folgende Abbildung zeigt ein Rastertunnelmikroskopbild geordneter Schichten magnetischer Moleküle, genannt Kobaltphthalocyanin [nach PRL 103, 257202 (2009)]. Die (Super-)Austauschwechselwirkung zwischen vertikal gestapelten Molekülen wurde mit  $J \sim 18$  meV bestimmt. Welche Stärke müsste ein Magnetfeld haben, um diesen Wert für Spins mit  $S = 1/2$  und einem Moment von  $1 \mu_B$  zu erreichen? Wie groß ist der magnetische Dipolbeitrag

unter der Annahme, dass beide Spins aus der Ebene zeigen?



### 3. Pauli-Paramagnetismus

- In der Vorlesung haben wir den Term für  $\chi_{Pauli}$  hergeleitet, indem wir die Spindichte als einfaches Rechteck im Zustandsdichte-Diagramm angenähert haben. Leiten Sie eine korrekte Rechnung für den resultierenden Magnetismus  $M = (n_+ - n_-) \cdot \mu_B$  her, indem Sie die Umverteilung der Spindichten als Integral verwenden.
- Um zu sehen, warum der Pauli-Paramagnetismus Temperatur-unabhängig ist, kann man diesen in eine dem Curie-Gesetz ähnliche Form schreiben. Verwenden Sie dafür die Fermi-„Temperatur“  $E_F = k_B T_F$ . Begründen Sie, warum der Pauli-Paramagnetismus immer noch Temperatur-unabhängig ist, und vergleichen Sie experimentelle Temperaturen mit  $T_F$ .
- Wie groß ist  $T_F$  bei reinem Kupfer (Tipp: Suchen Sie in Ihrem Lieblingsbuch...)? Wie groß ist dann der „Anteil der Temperaturabhängigkeit“ bei Raumtemperatur? Berechnen Sie daraus  $\chi_{Pauli}$ . Warum ist Kupfer trotzdem diamagnetisch?