

10. Übung

Aufgabe 35. (8 Punkte) **Fermi-Flächen in 2-D** Es sei ein zweidimensionales Rechteckgitter mit Gitterkonstanten a und $b = 2a$ gegeben.

- Zeichnen Sie die ersten vier Brillouin-Zonen.
- Zeichnen Sie die Fermi-Flächen im periodischen Zonenschema für den Fall, dass der Fermi-Wellenvektor in $[1\ 1]$ -Richtung gerade bis zum Rand der ersten Brillouin-Zone geht.

Aufgabe 36. (10 Punkte) **Diamagnetismus des Wasserstoff-Atoms** Die Wellenfunktion von Wasserstoff im Grundzustand $1s$ ist:

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

mit $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.529 \text{ \AA}$.

- Zeigen Sie, dass das mittlere Abstandsquadrat gegeben ist durch $\langle r^2 \rangle = 3a_0^2$.
- Berechnen Sie nun die molare diamagnetische Suszeptibilität χ_{dia}^H .

Hinweis: Die Ladungsdichte ist $\rho(r) = -e|\Psi(r)|^2$.

Aufgabe 37. (10 Punkte) **Grundzustand und Magnetismus von Übergangs- und Seltene-Erd-Elementen**

- Beweisen Sie, dass für die Brillouin-Funktion gilt: $B_J(x) = 1$ für $x \rightarrow \infty$.
- Bestimmen Sie in Russel-Saunders-Kopplung (Hund'sche Regeln) für die freien Ionen Mn^{3+} , Pr^{3+} , Eu^{3+} , Eu^{2+} , Tm^{3+} und Tm^{2+} den Grundzustand $^{2S+1}L_J$, die effektive Anzahl Bohr'scher Magnetonen p sowie das Sättigungsmoment $M_{sat} = M(x \rightarrow \infty)$, wobei $x = \frac{\mu_B B_0}{k_B T}$. Zeichnen Sie jeweils ein Kästchendiagramm.
- Begründen Sie, warum die Werte für Eu^{3+} und Mn^{3+} stark von den experimentellen Werten $p_{exp}^{\text{Eu}^{3+}} = 3.4$ und $p_{exp}^{\text{Mn}^{3+}} = 4.9$ abweichen.

Aufgabe 38. (7 Punkte) **Divalenter Isolator** Bei divalenten Atomen wird in der Näherung für freie Elektronen in zwei und drei Dimensionen auch die zweite Brillouin Zone teilweise besetzt. Durch ein gitterperiodisches Atompotential kommt es am Rande der BZ aber zu einer energetischen Aufspaltung gegenüber der freien Elektronennäherung. Wie groß muss diese Aufspaltung ΔE am Rande der BZ sein, so dass in zwei Dimensionen bei quadratischer Struktur doch alle Elektronen in der ersten BZ bleiben und das Material einen Isolator anstatt eines Metalles bildet? Geben Sie die Aufspaltungen in relativen Einheiten der freien Elektronenenergie am Rande der 1. BZ an!