

14. Übungsblatt zur Einführung in die Festkörperphysik

Ausgabe: 24.01.2022

Wintersemester 2021/22

Abgabe: 31.01.2022, 08:15 im Moodle

Prof. Dr. D. Suter

Aufgabe 1: Kristallfeldaufspaltung von Energieniveaus (8 Punkte)

Übergangsmetalle und seltene Erden zeigen aufgrund ihrer teilweise gefüllten d- bzw. f-Schalen und den damit verbundenen großen Bahndrehimpulsen und Gesamtspins mit die stärksten magnetischen Eigenschaften. Während in der Betrachtung des isolierten Wasserstoffatoms die verschiedenen d-Orbitale eine Entartung aufweisen, wird diese bei dem Übergang von freien Ionen zum Kristallgitter aufgehoben. Da es sich bei den 3d-Schalen um die äußersten Schalen handelt, führt die Wechselwirkung mit dem inhomogenen Kristallfeld bzw. die Überlappung der Elektronenwolken mit den positiven Ionenrümpfen zu einer Anhebung des jeweiligen Energieniveaus.

- Fertigen Sie Skizzen für die d-Orbitale d_{xy} , d_{yz} , d_{xz} , $d_{x^2-y^2}$ und d_{z^2} in der Wasserstoffnäherung an. Zeichnen Sie dabei auch die Raumachsen für die entsprechenden Orbitale mit ein.
- Welche Aufspaltung ergibt sich für die verschiedenen d-Orbitale in einem oktaedrischen Kristallfeld? (Eine Zeichnung mit den Energieniveaus reicht). Geben Sie auch die energetischen Abstände zu dem ursprünglichen Niveau E_0 in Abhängigkeit von der Aufspaltungsenergie Δ_0 an.
- Wie Sie in der Vorlesung gelernt haben, kann die Besetzung der einzelnen Orbitale mittels der Hundschen Regeln bestimmt werden. Bestimmen Sie Anzahl an d-Elektronen für Fe^{3+} und skizzieren Sie mithilfe der Hundschen Regeln die Besetzung der einzelnen Orbitale im Grundzustand. Unterscheiden Sie dabei die Besetzungen in einem schwachen und einem starken oktaedrischen Feld (High- und Low Spin Konfiguration).
Hinweis: Überlegen Sie sich, wie die Stärke der Aufspaltung die Verteilung der Elektronen auf die einzelnen Niveaus beeinflusst.
- Wie ändert sich die Aufspaltung der einzelnen Niveaus im oktaedrischen Kristallfeld, wenn die Atome auf der z-Achse einen größeren Abstand zum zentralen Atom haben als die Atome auf der x- und y-Achse?

Aufgabe 2: Curie-Weiss Gesetz (5 Punkte)

Oberhalb der magnetischen Ordnungstemperatur lässt sich die magnetische Suszeptibilität einer ferro- bzw. antiferromagnetischen Substanz durch ein erweitertes Curie-Weiss-Gesetz

$$\chi \propto \frac{C}{T - \Theta}$$

beschreiben.

- Erklären Sie die Bedeutung der Parameter χ , C und Θ . Skizzieren Sie die Temperaturabhängigkeit von χ für eine paramagnetische Substanz und erläutern sie anschließend inklusive Zeichnung die Unterschiede im Vergleich zu ferro- bzw. antiferromagnetischen Substanzen. Gehen Sie dabei insbesondere auch auf das Vorzeichen von Θ ein.

- b) Das Curie-Gesetz kann als Analogon zum idealen Gasgesetz der Thermodynamik angesehen werden. Diskutieren Sie die gemeinsamen Merkmale dieser beiden Gesetze und erläutern Sie die Analogie zwischen dem Curie-Weiss-Gesetz und der van der Waals-Gleichung realer Gase.

Aufgabe 3: Ferro- und Ferrimagnetismus (5 Punkte)

Obwohl die ferromagnetische Kopplung eine parallele Orientierung der magnetischen Momente bevorzugt, sind in einem Ferromagneten nicht alle Momente parallel orientiert. Die spontane Polarisierung des ferromagnetischen Materials entsteht zunächst nur lokal, d.h. die Momente orientieren sich auf einer Skala von μm parallel zueinander. Das Verhalten von ferromagnetischen Materialien unter Einfluss eines äußeren Magnetfeldes wollen wir uns im folgenden nochmal etwas genauer anschauen.

- a) Erläutern Sie den Aufbau der magnetischen Domänen in einer ferromagnetischen Substanz. Erklären Sie dabei auch, welche Effekte zur Ausbildung der Domänenstruktur führen.
- b) Wie ändert sich die Domänenstruktur eines einkristallinen Ferromagneten unter dem Einfluss eines äußeren Magnetfeldes? Zeichnen Sie die Magnetisierungskurve inklusive des Übergangs von einer unmagnetisierten Probe zur Erstmagnetisierung und markieren Sie die Sättigungsmagnetisierung M_S , die Remanenz M_r und das Koerzitivfeld B_k . Beschreiben und zeichnen Sie zudem die Hystereskurve für harte und weiche Magneten inklusive dem idealen und dem realen Verlauf (Ideal = ohne Verluste).

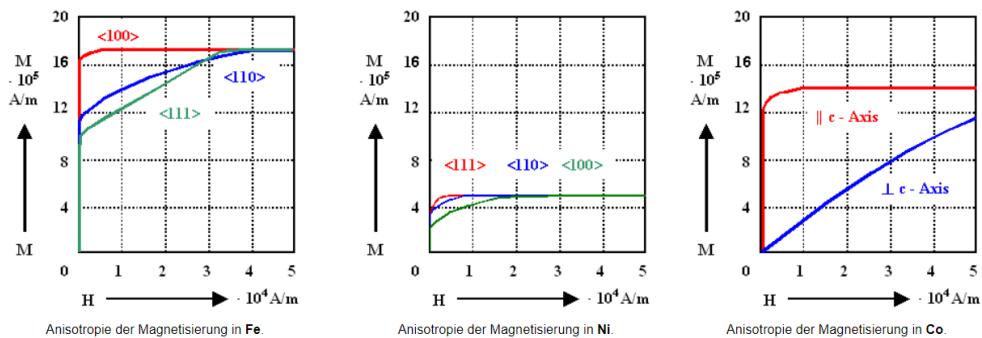


Abbildung 1: Magnetisierungskurven für Eisen, Nickel und Cobalt.

- c) Abbildung 1 zeigt die Magnetisierungskurven von einkristallinem Fe, Ni und Co. Ermitteln Sie anhand der Kurven die magnetischen Momente in Einheiten des Bohrschen Magneton. Die atomare Dichte der Materialien können Sie mithilfe folgender Angaben berechnen: **Fe:** bcc mit $a = 1.86 \text{ \AA}$, **Ni:** fcc mit $a = 3.52 \text{ \AA}$, **Co:** hcp mit $a = 2.51 \text{ \AA}$ und $c = 4.07 \text{ \AA}$.
- d) Erläutern Sie die physikalische Ursache für den Ferrimagnetismus. Überlegen Sie anschließend, warum in dem Ferrimagneten NiFe_2O_4 nur die Ni^{2+} -Atome zur Magnetisierung beitragen und berechnen Sie basierend darauf die Sättigungsmagnetisierung (Die atomare Dichte vom Nickel beträgt in NiFe_2O_4 $\rho_A = 1.379 \cdot 10^{28} \text{ cm}^{-3}$).
Hinweis: NiFe_2O_4 kristallisiert in der inversen Spinellstruktur.