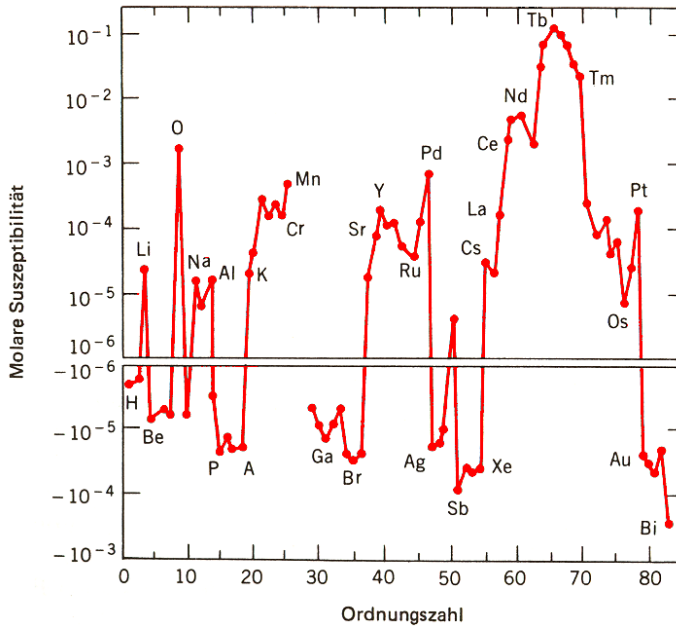


10 / 1

Magnetische Eigenschaften der Elemente



10 / 2

Magnetische Eigenschaften freier Atome

Magnetisches Dipolmoment ist proportional zum Bahndrehimpuls:

$$\vec{m} = \gamma \cdot \vec{J} = -g \mu_B \cdot \vec{J}$$

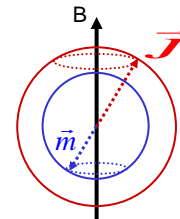
Gesamtdrehimpuls $\equiv \hbar \vec{J}$

Lande-Faktor $\equiv g$

Bohrsches Magneton $\mu_B \equiv \frac{e_0 \hbar}{2m_e} = 9.274015 \cdot 10^{-24} \text{ JT}^{-1}$

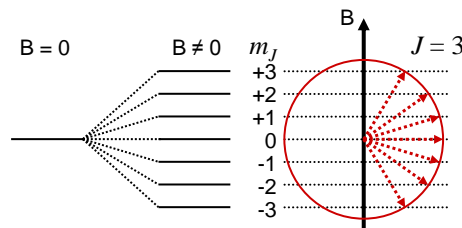
Elektronenspin: $g_s = 2.0023 \approx 2$

Freies Atom mit L-S Kopplung: $g = \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} + 1$

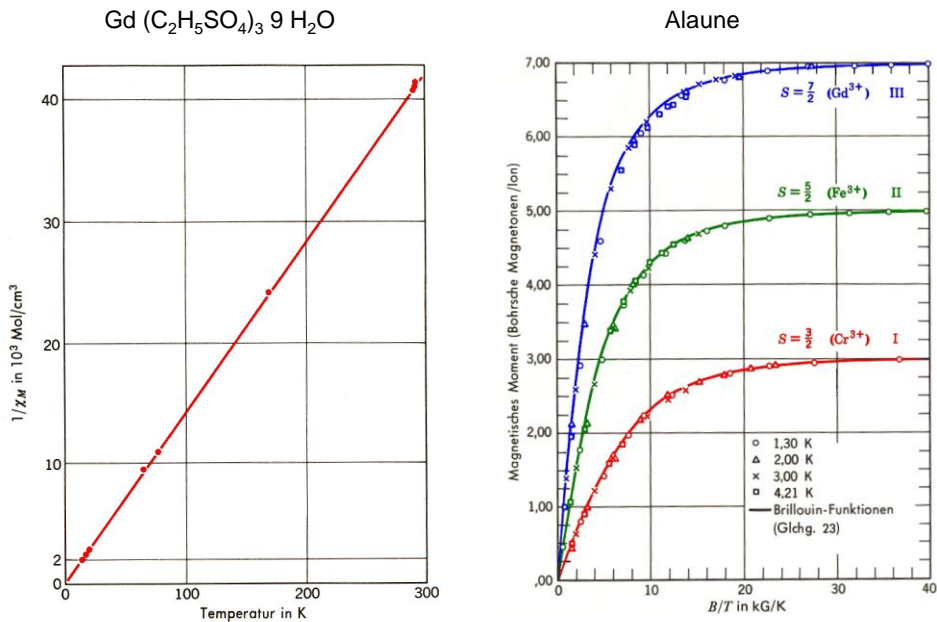


Zusatzbeitrag zur Energie: $U = -\vec{m} \cdot \vec{B}_a = m_J g \mu_B J \cdot B_a$; $-J, -J+1, \dots, J$

→ Aufspaltung der Energieniveaus:



10 / 3 Paramagnetismus



10 / 4 Grundzustand bei L-S Kopplung

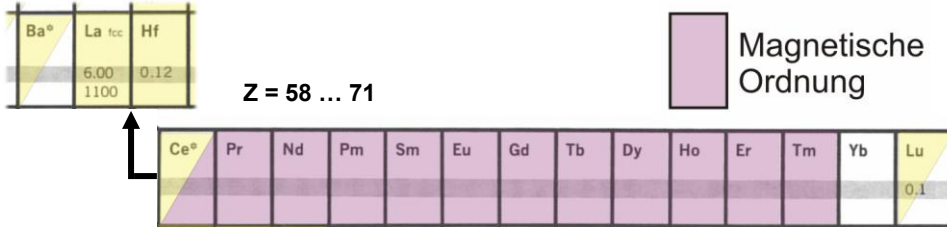
Der energetisch am tiefsten liegende Zustand ist durch folgende empirische Regeln bestimmt (Hundsche Regeln):

- Voll aufgefüllte s, p, d, f Unterschalen liefern stets $\vec{L} = 0$ und $\vec{S} = 0$.
- In teilweise gefüllter Unterschale liegen die Terme mit maximalem S (d.h. höchster Multiplizität) am tiefsten.
- Für Terme mit maximalem S werden die Elektronen so auf die Unterzustände m_l verteilt, dass $|\vec{L}_z| = \sum m_l \hbar = m_{L,\max} \hbar$ maximal wird. Die Drehimpuls-Quantenzahl L ist dann gleich $|m_{L,\max}|$.
- Ist die Unterschale weniger als halbgefüllt ist der Term mit $J = |L - S|$ Grundzustand, ist die mehr als halbgefüllt, der Term mit $J = L + S$.

Damit ergibt sich der durch das Termsymbol $^{2S+1}L_J$ bezeichnete Grundzustand.

10 / 5

Seltenen Erden



Elektronenkonfiguration:

- äußere Schalen: $[Xe] = 5s^2 5p^6$ (\rightarrow chemische Bindung)
- innere 4f-Schale: $4f^0$ (La) ... $4f^{14}$ (Lu)
- \rightarrow 4f-Schale in Festkörper wie in Atom

10 / 6

Grundzustand der seltenen Erden

	n	l_z							S	L	J	$^{2S+1}X_J^*$
		3	2	1	0	-1	-2	-3				
Ce ³⁺	1	↓							1/2	3	5/2	² F _{5/2}
Pr ³⁺	2	↓	↓						1	5	4	³ H ₄
Nd ³⁺	3	↓	↓	↓					3/2	6	9/2	⁴ I _{9/2}
Pm ³⁺	4	↓	↓	↓	↓				2	6	4	⁵ I ₄
Sm ³⁺	5	↓	↓	↓	↓	↓			5/2	5	5/2	⁶ H _{5/2}
Eu ³⁺	6	↓	↓	↓	↓	↓	↓		3	3	0	⁷ F ₀
Gd ³⁺	7	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓	7/2	0	7/2	⁸ S _{7/2}
Tb ³⁺	8	↑↓	↑	↑	↑	↑	↑	↑	3	3	6	⁷ F ₆
Dy ³⁺	9	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	↑	↑	5/2	5	15/2	⁶ H _{15/2}
Ho ³⁺	10	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	↑	2	6	8	⁵ I ₈
Er ³⁺	11	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	3/2	6	15/2	⁴ I _{15/2}
Tm ³⁺	12	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	1	5	6	³ H ₆
Yb ³⁺	13	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	1/2	3	7/2	² F _{7/2}
Lu ³⁺	14	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	0	0	0	¹ S ₀

4f – Schale (Grundzustand)

* L = 0 1 2 3 4 5 6
X = S P D F G H I

10 / 7

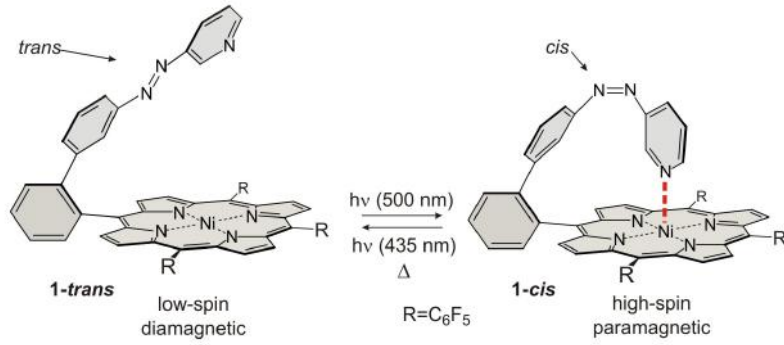
Magnetismus der seltenen Erden

Ion	Konfiguration	Grundterm	p (berechnet) = $= g[J(J + 1)]^{1/2}$	p (exp) (Näherung)
Ce ³⁺	4f ¹ 5s ² p ⁶	² F _{5/2}	2,54	2,4
Pr ³⁺	4f ² 5s ² p ⁶	³ H ₄	3,58	3,5
Nd ³⁺	4f ³ 5s ² p ⁶	⁴ I _{9/2}	3,62	3,5
Pm ³⁺	4f ⁴ 5s ² p ⁶	⁵ I ₄	2,68	-
Sm ³⁺	4f ⁵ 5s ² p ⁶	⁶ H _{5/2}	0,84	1,5
Eu ³⁺	4f ⁶ 5s ² p ⁶	⁷ F ₀	0	3,4
Gd ³⁺	4f ⁷ 5s ² p ⁶	⁸ S _{7/2}	7,94	8,0
Tb ³⁺	4f ⁸ 5s ² p ⁶	⁷ F ₆	9,72	9,5
Dy ³⁺	4f ⁹ 5s ² p ⁶	⁶ H _{15/2}	10,63	10,6
Ho ³⁺	4f ¹⁰ 5s ² p ⁶	⁵ I ₈	10,60	10,4
Er ³⁺	4f ¹¹ 5s ² p ⁶	⁴ I _{15/2}	9,59	9,5
Tm ³⁺	4f ¹² 5s ² p ⁶	³ H ₆	7,57	7,3
Yb ³⁺	4f ¹³ 5s ² p ⁶	² F _{7/2}	4,54	4,5

10 / 8

Magnetismus der Eisengruppe

Ion	Konfiguration	Grundterm	p (berechnet) = $= g[J(J + 1)]^{1/2}$	p (berechnet) = $= 2[S(S + 1)]^{1/2}$	p (exp) ^a
Ti ³⁺ , V ⁴⁺	3d ¹	² D _{3/2}	1,55	1,73	1,8
V ³⁺	3d ²	³ F ₂	1,63	2,83	2,8
Cr ³⁺ , V ²⁺	3d ³	⁴ F _{3/2}	0,77	3,87	3,8
Mn ³⁺ , Cr ²⁺	3d ⁴	⁵ D ₀	0	4,90	4,9
Fe ³⁺ , Mn ²⁺	3d ⁵	⁶ S _{5/2}	5,92	5,92	5,9
Fe ²⁺	3d ⁶	⁵ D ₄	6,70	4,90	5,4
Co ²⁺	3d ⁷	⁴ F _{9/2}	6,63	3,87	4,8
Ni ²⁺	3d ⁸	³ F ₄	5,59	2,83	3,2
Cu ²⁺	3d ⁹	² D _{5/2}	3,55	1,73	1,9



S. Venkataramani, et al., Science 2011

