

Einführung in die Theorie des Magnetismus Projekte

1 D1–„Bundle“ – Roman Schnalle

1.1 Spinwellentheorie für Ferromagneten

Erwerben Sie einen benoteten ECTS-Schein für die *Einführung in die Theorie des Magnetismus*, indem Sie die Spinwellentheorie für Ferromagneten ausgehend von der Transformation von Holstein und Primakov darstellen. Der Hamiltonoperator sei vom Heisenberg-Typ. Vergleichen Sie die Ergebnisse mit den bekannten exakten Ergebnissen im Ein- und Zwei-Magnonen-Raum.

1.2 Spinwellentheorie für antiferromagnetische Moleküle

Sie halten einen Vortrag über Ihr Projekt im Seminar der Arbeitsgruppe.

In Ihrer Diplomarbeit geht es darum, zu untersuchen, welche Erkenntnisse man mit Hilfe der Spinwellentheorie für antiferromagnetisch gekoppelte Moleküle erhalten kann. Studieren Sie dazu die Vorarbeiten zur Spinwellentheorie im Antiferromagneten und neuere Arbeiten, z. B. von Olivier Cepas und Timothy Ziman (cond-mat/0412244). Wenden Sie die Spinwellentheorie auf Beispielsysteme wie Ringe (vgl. Anderson) an. Untersuchen Sie die Qualität der Näherung und welche thermodynamischen Observablen damit modelliert werden können.

2 D2–„Bundle“

2.1 Thermodynamische Observable

Erwerben Sie einen benoteten ECTS-Schein für die *Einführung in die Theorie des Magnetismus*, indem Sie die Energieeigenwerte eines antiferromagnetisch gekoppelten Rings aus $N = 6$ Spins mit Spinquantenzahl $s = 1/2$ sowie die zugehörigen magnetischen Quantenzahlen M berechnen. Wiederholen und stellen Sie das Heisenberg-Modell kurz dar. Erläutern Sie die Symmetrien. Berechnen Sie die Magnetisierung, die magnetische Suszeptibilität und die Wärmekapazität und stellen Sie diese als Funktion von T und B dar.

2.2 Einfluß eines alternierenden magnetischen Feldes (staggered field) auf thermodynamische Observable

Sie halten einen Vortrag über Ihr Projekt im Seminar der Arbeitsgruppe.

In Ihrer Diplomarbeit geht es darum, zu untersuchen, wie sich ein alternierendes Magnetfeld auf thermodynamische Observable auswirkt. Erarbeiten Sie dazu zuerst, wie es zu einem alternierenden Magnetfeld kommt (Affleck/Oshikawa). Untersuchen Sie den Einfluß an kleinen Systemen wie z. B. Spinringen.

Untersuchen Sie dann verschiedene Szenarien an der Kupfer-Dreieckskette (J. Schnack *et al.*, Phys. Rev. B 70 (2004) 174420) und vergleichen Sie mit den experimentellen Resultaten.

3 B1–„Bundle“ – Christian Buß

3.1 Spin-Spin-Korrelationsfunktionen

Erwerben Sie einen benoteten ECTS-Schein für die *Einführung in die Theorie des Magnetismus*, indem Sie ausarbeiten, was sich hinter dem Begriff „Frustration“ antiferromagnetischer Spinsysteme verbirgt. Diskutieren Sie diesen Begriff anhand kleiner Spinsysteme, z. B. Dreieck sowohl für den klassischen als auch für den quantenmechanischen Fall.

Wie die Spins eines magnetischen Systems gegeneinander ausgerichtet sind, mißt man mit der Spin-Spin-Korrelationsfunktion. Wie ist diese Funktion definiert? Stellen Sie deren Werte für Spins, die nächste Nachbarn sind, für einfache klassische Systeme, Dreieck, Quadrat und Kuboktaeder, dar.

Berechnen Sie diese Funktion quantenmechanisch für die gleichen Systeme, Dreieck, Quadrat und Kuboktaeder, unter Zuhilfenahme des Lanczos-Verfahrens oder der Projektionsmethode. Die Spinquantenzahl sei $s = 1/2$.

3.2 Lanczos- und Projektionsmethode

Erwerben Sie einen benoteten ECTS-Schein für die *Numerische Physik*, indem Sie darstellen, wie Projektionsmethode und Lanczosverfahren funktionieren. Beweisen Sie deren Grundlagen, also, daß das Projektionsverfahren zu monoton fallenden Energieeigenwerten führt und daß man im Lanczosverfahren nur drei Vektoren braucht.

Berechnen Sie die Spin-Spin-Korrelationsfunktion für nächste-Nachbar-Spins quantenmechanisch für die antiferromagnetisch gekoppelten Systeme, Dreieck, Quadrat und Kuboktaeder, unter Zuhilfenahme des Lanczos-Verfahrens oder der Projektionsmethode. Die Spinquantenzahl sei $s = 1/2$.

3.3 Dichtematrix-Renormierungsgruppentechnik am Beispiel des antiferromagnetischen Ikosaeders

In Ihrer Bachelorarbeit untersuchen Sie die relativen Grundzustände des antiferromagnetisch gekoppelten Ikosaeders. Dazu verwenden Sie die Dichtematrix-Renormierungsgruppentechnik (DMRG). Erarbeiten Sie zuerst die Grundlagen der DMRG unter Zuhilfenahme der Diplomarbeit von Matthias Exler. Studieren und modifizieren Sie das Programm von Herrn Exler, so daß sie das Ikosaeder beschreiben können. Berechnen Sie die Grundzustände für verschiedene Werte der Spinquantenzahl s und vergleichen Sie mit vorhandenen Ergebnissen aus Lanczos-Diagonalisierungen. Stellen Sie die $(T = 0)$ -Magnetisierungskurven dar und untersuchen Sie den in cond-mat/0501558 diskutierten metamagnetischen Phasenübergang für große Spinquantenzahlen $s = 3, 7/2, 4, 9/2, 5, \dots$

4 B2–„Bundle“ – Katrin Jahns

4.1 Anisotropie

Erwerben Sie einen benoteten ECTS-Schein für die *Einführung in die Theorie des Magnetismus*, indem Sie ausarbeiten, was sich hinter dem Begriff „Anisotropie“ verbirgt. Diskutieren Sie anhand kleiner Spinsysteme, wie sich verschiedene Formen der Anisotropie sowohl im klassischen als auch im quantenmechanischen Fall auswirken.

Lesen Sie nach und erläutern Sie, wie man sich das sogenannte Magnetisierungstunneln in dem magnetischen Molekül Mn_{12} vorstellt.

4.2 Klassisches Monte-Carlo für Spinsysteme

Erwerben Sie einen benoteten ECTS-Schein für die *Numerische Physik*, indem Sie darstellen, was sich hinter „Monte-Carlo“ verbirgt. Was versteht man unter dem Metropolis-Algorithmus?

Berechnen Sie mit dem Metropolisalgorithmus die thermodynamischen Observablen Suszeptibilität und Wärmekapazität für ein klassisches Kuboktaeder, das eine antiferromagnetische Kopplung zwischen nächsten Nachbarn aufweist und bei dem für jeden Spin eine radial nach außen gerichtete Anisotropieachse vorliegt. Der Anisotropieterm für Spin i laute $D(\vec{e}_r(i) \cdot \vec{s}(i))^2$. Simulieren Sie das System für verschiedene Verhältnisse D/J .

4.3 Klassische Monte-Carlo für Fe_{30} -Schichtsysteme

In Ihrer Bachelorarbeit untersuchen Sie die thermodynamischen Eigenschaften von Fe_{30} -Schichtsystemen mit Hilfe klassischer Monte-Carlo-Rechnungen. Dabei diskutieren Sie verschiedene Szenarien der Spin-Kopplung als auch der Anisotropie. Die Ergebnisse sollen mit Messungen der Suszeptibilität und der Wärmekapazität verglichen werden.

5 P1–„Bundle“ – Kirsten Wedderhoff

5.1 Spinwellentheorie für Ferromagneten

Erwerben Sie einen benoteten ECTS-Schein für die *Einführung in die Theorie des Magnetismus*, indem Sie die Spinwellentheorie für Ferromagneten ausgehend von der Transformation von Holstein und Primakov darstellen. Der Hamiltonoperator sei vom Heisenberg-Typ. Vergleichen Sie die Ergebnisse mit den bekannten exakten Ergebnissen im Ein- und Zwei-Magnonen-Raum.

5.2 Niedrigste Energien im Ein- und Zwei-Magnonen-Raum

Erwerben Sie einen benoteten ECTS-Schein für die *Numerische Physik*, indem Sie darstellen, wie Projektionsmethode und Lanczosverfahren funktionieren. Beweisen Sie deren Grundlagen, also, daß das Projektionsverfahren zu monoton fallenden Energieeigenwerten führt und daß man im Lanczosverfahren nur drei Vektoren braucht.

Berechnen Sie die Grundzustandsenergien für eine ferromagnetisch gekoppelte Leiter im 0-, 1- und 2-Magnonen-Raum numerisch unter Berücksichtigung der Translationssymmetrie und vergleichen Sie mit dem Resultat der Spinwellentheorie.

6 P2–„Bundle“ – Hötzer/Pobandt

6.1 Antiferromagnetisch gekoppeltes Heisenberg-Quadrat

Erwerben Sie einen benoteten ECTS-Schein für die *Einführung in die Theorie des Magnetismus*, indem Sie die Energieeigenwerte eines antiferromagnetisch gekoppelten Quadrats aus $N = 4$ Spins mit Spinquantenzahl s sowie die zugehörigen magnetischen Quantenzahlen M berechnen. Wiederholen und stellen Sie das Heisenberg-Modell kurz dar. Erläutern Sie die Symmetrien. Erklären Sie, was man unter Kopplung von Spins versteht und wenden Sie dies zur Vereinfachung des Hamiltonoperators an. Berechnen Sie die Magnetisierung, die magnetische Suszeptibilität und die Wärmekapazität und stellen Sie diese als Funktion von T und B für verschiedene $s = 1/2, 1, 3/2, 2$ dar.

7 Bestimmung von Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Erwerben Sie einen benoteten ECTS-Schein für die *Numerische Physik*, indem Sie darstellen, was Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind. Bestimmen Sie die Clebsch-Gordan-Koeffizienten für die Kopplung zweier beliebiger Spins durch exakte Diagonalisierung des Gesamtspinquadrats. Erstellen sie eine Tabelle für die Kopplung von Spins mit den Quantenzahlen $s = 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2, 3, 7/2$. Es gibt 21 Kombinationsmöglichkeiten. Vergleichen Sie Ihre Koeffizienten mit denen, die Mathematica bereitstellt.

8 Marshall-Peierls sign rule, Lieb-Schultz-Mattis

Erwerben Sie einen benoteten ECTS-Schein für die *Einführung in die Theorie des Magnetismus*, indem Sie erklären, was sich hinter der Vorzeichenregel von Marshall und Peierls verbirgt. Erläutern Sie ebenfalls, was die Theoreme von Lieb, Schultz und Mattis über bipartite Spinsysteme aussagen. Erläutern Sie die Argumentationen.

9 Magnetische Solitonen nach Mattis – Bettina Schöke

Erwerben Sie einen benoteten ECTS-Schein für die *Einführung in die Theorie des Magnetismus*, indem Sie dem Buch von Mattis folgend erläutern, was man unter magnetischen Solitonen versteht.

10 Allgemeine theoretische Aussagen – Stefan Stiene

Erwerben Sie einen benoteten ECTS-Schein für die *Einführung in die Theorie des Magnetismus*, indem Sie erläutern, was die Aussagen des Mermin-Wagner-Theorems und der Haldane-Vermutung sind.

11 Klassische Spindynamik – Christian Taubitz

Erwerben Sie einen benoteten ECTS-Schein für die *Einführung in die Theorie des Magnetismus*, indem Sie ausgehend von der Dissertation von Christian Schröder [1] darstellen, was klassische Spindynamik ist. Diskutieren Sie die grundlegenden Gleichungen. Stellen Sie die klassischen Grundzustände typischer Spinsysteme vor. Was verbirgt sich hinter den Begriffen „kollinear“ und „koplanar“?

12 Mögliche Diplomarbeiten bei Herrn Gemmer

12.1 Einteilchen Diffusion in Hubbard-artigen Modellen

Betrachtet werden sollen eindimensionale Potenziale bestehend aus einer Kette von Potenzialmulden (lattice-sites). Es soll festgestellt werden ob, und unter welchen Bedingungen, die Einteilchen Dynamik nach der Schrödingergleichung in einem solchen System effektiv durch eine Diffusionsgleichung beschrieben werden kann. Vorgesehen sind Analysen nach der Theorie der HAM (Hilbert space Average Method) und numerische Integrationen der zeitabhängigen Schrödingergleichung.

12.2 Diffusion in „freien“ wechselwirkenden Mehrteilchen-Systemen

Betrachtet werden sollen mehrere an einen eindimensionalen Ring gebundene, wechselwirkende, Teilchen. Die Dynamik des Systems ist strikt gegeben durch die Schrödingergleichung. Es soll analysiert werden ob und unter welchen Bedingungen die Dynamik eines Teilchens effektiv durch eine Diffusionsgleichung beschrieben werden kann. Vorgesehen sind Analysen nach der Theorie der HAM (Hilbert space Average Method) und numerische Integrationen der zeitabhängigen Schrödingergleichung.

12.3 Energietransport in Fermi-Pasta-Ulam Systemen

Als FPU Systeme bezeichnet man Ketten von Massepunkten mit nichtlinearen Kopplungen. Man stellt die Frage ob diese Systeme „selbstthermalisierend“ sind also von selbst in einen Makrogleichgewichtszustand hineinlaufen, bzw., wie in ihnen Energie transportiert wird. Diese System sind klassisch gut untersucht, hier sollen Quantenversionen untersucht werden. Vorgesehen sind Analysen nach der Theorie der HAM (Hilbert space Average Method) und numerische Integrationen der zeitabhängigen Schrödingergleichung.

12.4 Selbstthermalisierung in Spinsystemen (Betreuung evtl. zusammen mit Herrn Schmidt)

Betrachtet werden sollen Systeme aus gleichartigen gekoppelten Spins. Einzelne Beispiele von quantenversionen solcher Systeme zeigen dass die freie reversible Gesamtdynamik zu einem thermodynamischen Gleichgewicht für den einzelnen Spin führt. Untersucht werden sollen solche Systeme und ihre klassischen Gegenparts im Hinblick auf Selbstthermalisierung. Vorgesehen sind Analysen nach der Theorie der HAM (Hilbert space Average Method) und numerische Integrationen der zeitabhängigen Schrödingergleichung, sowie Analysen der klassischen Spindynamik.

13 D3–„Bundle“

13.1 Klassische Spindynamik

Erwerben Sie einen benoteten ECTS-Schein für die *Einführung in die Theorie des Magnetismus*, indem Sie ausgehend von der Dissertation von Christian Schröder darstellen, was klassische Spindynamik ist. Diskutieren Sie die grundlegenden Gleichungen. Stellen Sie die klassischen Grundzustände typischer Spinsysteme vor. Was verbirgt sich hinter den Begriffen „kollinear“ und „koplanar“?

13.2 Selbstthermalisierung in Spinsystemen (Betreuung evtl. zusammen mit Herrn Schmidt)

Betrachtet werden sollen Systeme aus gleichartigen gekoppelten Spins. Einzelne Beispiele von quantenversionen solcher Systeme zeigen dass die freie reversible Gesamtdynamik zu einem thermodynamischen Gleichgewicht für den einzelnen Spin führt. Untersucht werden sollen solche Systeme und ihre klassischen Gegenparts im Hinblick auf Selbstthermalisierung. Vorgesehen sind Analysen nach der Theorie der HAM (Hilbert space Average Method) und numerische Integrationen der zeitabhängigen Schrödingergleichung, sowie Analysen der klassischen Spindynamik.

Literatur

- [1] C. Schröder, *Numerische Simulationen zur Thermodynamik magnetischer Strukturen mittels deterministischer und stochastischer Wärmebadankopplung*, Ph.D. thesis, University of Osnabrück (1999), download from <http://elib.uni-osnabrueck.de/dissertations/physics/Chr.Schroeder/>