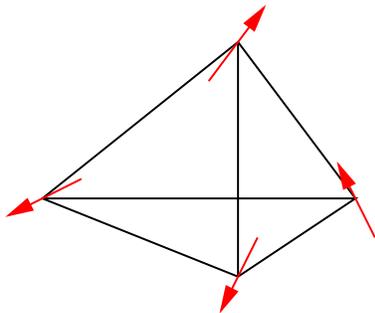


Aufgabenblatt 12

12.1 Eigenwerte

Als ein realistisches Eigenwertproblem betrachten wir im folgenden das Heisenberg-Modell, in dem die magnetischen Eigenschaften eines Spinsystems beschrieben werden sollen. Unser Beispielsystem besteht aus 4 Spins, von denen jeder mit allen anderen mit gleicher Stärke wechselwirkt. Die Spins haben dabei die Quantenzahl $s = 5/2$ (kleines Problem) bzw. $s = 7/2$ (großes Problem).



Der Hamiltonoperator für dieses Spinsystem lautet

$$\tilde{H} = \frac{2J}{\hbar^2} \sum_{i < j} \tilde{\vec{s}}_i \cdot \tilde{\vec{s}}_j, \quad J > 0. \quad (1)$$

Dabei nummerieren i und j die Spins, und J ist die Stärke der Wechselwirkung (Austauschkopplung). Ein freundlicher Kommilitone hat für diesen Hamiltonoperator in einer Orthonormalbasis seiner Wahl die Matrixelemente von \tilde{H}/J ausgerechnet (lineare Dimension $(2s + 1)^4$). Diese stehen als Datei auf meiner Webseite bereit.

- Informieren Sie sich auf www.netlib.org/lapack über die Parameter, die an die Eigenwertroutine `DSYEV` übergeben werden müssen. Entsprechende Informationen finden Sie wieder unter „Individual Routines“.
- Erstellen Sie ein Programm in C/C++ (oder der Programmiersprache Ihrer Wahl), das die zu diagonalisierende Matrix einliest und die Eigenwerte durch Aufruf der Routine `DSYEV` bestimmt.

Um in Ihrem Programm LAPACK-Funktionen verwenden zu können, müssen Sie (auf cp1) zunächst wieder die Header-Dateien `f2c.h` und danach `clapack.h` einbinden. Beim Kompilieren müssen dann die drei Bibliotheken `liblapack.a`, `libblas.a` und `libf2c.a` korrekt in Ihr Programm integriert („gelinkt“) werden. Kopieren Sie dazu

wie zuvor die drei Dateien in dasselbe Verzeichnis, in dem sich auch Ihr Programm befindet, und kompilieren Sie das Programm mit:

```
gcc -o <Name> <Source Code> -L. -llapack -lblas -lf2c -lm -Wall
```

- c. In diesem Spezialfall kann man die numerisch erhaltenen Eigenwerte mit einer analytischen Lösung vergleichen. Gemäß dieser treten nur die folgenden Eigenwerte auf:

$$E(S) = J[S(S+1) - 4s(s+1)] . \quad (2)$$

Dabei ist $S = 0, 1, 2, \dots, 4s$ die Quantenzahl des Gesamtspins. Die Eigenwerte sind oft mehrfach entartet. Vergleichen Sie Ihre Eigenwerte mit dem analytischen Ergebnis.

Zusatzaufgabe: Ermitteln Sie anhand der numerischen Lösung die Entartungen der Eigenwerte.

- d. Berechnen Sie die innere Energie $U(T)$ und die Wärmekapazität $C(T)$ als Funktion der Temperatur T und stellen Sie diese graphisch dar. Die Größen sind wie folgt definiert:

$$Z(T) = \sum_i \exp \left\{ -\frac{E_i}{k_B T} \right\} , \quad (3)$$

$$U(T) = \frac{1}{Z(T)} \sum_i E_i \exp \left\{ -\frac{E_i}{k_B T} \right\} , \quad (4)$$

$$C(T) = \frac{k_B}{(k_B T)^2} \left[\frac{1}{Z(T)} \sum_i E_i^2 \exp \left\{ -\frac{E_i}{k_B T} \right\} - U^2(T) \right] . \quad (5)$$

Führen Sie diese Rechnungen einheitenlos durch. Die Matrixelemente sind ja schon einheitenlos gegeben. Nutzen Sie analog E_i/J , U/J , $k_B T/J$ und C/k_B als einheitenlose Größen (Das bedeutet nichts anderes, als dass Sie in den Rechnungen $k_B = 1$ setzen.). Verwenden Sie für die Berechnung der Exponentialfunktionen den Trick aus Aufgabe 4.3, d.h. ziehen Sie jeweils den Term mit der Grundzustandsenergie vor die Summe.

- e. Lassen Sie von der Routine `DSYEV` auch die Eigenvektoren berechnen. Überprüfen Sie exemplarisch für zwei Vektoren Ihrer Wahl, ob sie orthonormal sind.
- f. **Zusatzaufgabe:** Schreiben Sie eine Lanczos-Routine und stellen Sie die gefundenen approximativen Eigenwerte als Funktion des Lanczos-Schrittes dar. Testen Sie die Routine anhand der beiden Beispiele.