Universität Bielefeld Fakultät für Physik	Symmetrien in der Physik WS 2014/2015	Prof. Dr. Jürgen Schnack jschnack@uni-bielefeld.de

Aufgabenblatt 13

13.1 Quadrupolare Ordnung

Thermodynamische Phasen sind durch Ordnungsparameter gekennzeichnet. Bei einem Phasenübergang ändert sich der Ordnungsparameter (u.U. unstetig, d.h. sprunghaft). Der Phasenübergang zwischen flüssiger und gasförmiger Phase kann zum Beispiel durch den Ordnungsparameter Dichte, d.h. einen Skalar, beschrieben werden.
Eine ferromagnetische Phase kann durch einen vektoriellen Ordnungsparameter, die Magnetisierung, beschrieben werden. Eine solche geordnete Phase bricht die Zeitumkehrinvarianz, da die Zeitumkehr aus Drehimpulsen ihr Negatives macht.
In neuerer Zeit haben exotische Quantenphasen ein größeres Interesse hervorgerufen. Dazu gehören Phasen, deren Ordnungsparameter sphärische Tensoren vom Rang 2 sind. Das Kapitel *Spin Nematic Phases in Quantum Spin Systems* von Karlo Penc und Andreas Läuchli aus dem Buch *Introduction to Frustrated Magnetism* von Claudine Lacroix, Philippe Mendels und Frederic Mila beschäftigt sich mit solchen Phasen. Sie finden das zugehörige pdf in stud.ip.

a. Lesen Sie die ersten Seiten (331-336) des Kapitels. Sie sollten die verwendeten Objekte mit Hilfe der Vorlesungsmitschrift verstehen können.

b. Zeigen Sie, dass die Basis (13.3.) zeitumkehrinvariant ist.

c. Wie lauten die Erwartungswerte von $\underset{\sim}{s}^z$ bezüglich der drei Basiszustände (13.3.)?

d. Zeigen Sie, dass $\underset{\sim}{Q}^{\alpha\beta} = 0$ für $s = 1/2$.

e. Was ergeben die Kommutatoren von $\underset{\sim}{Q}$ (13.6) mit $\underset{\sim}{s}^z$? Machen Sie sich den Unterschied zwischen den Komponenten von $\underset{\sim}{Q}$ (13.6) und den Komponenten eines sphärischen Tensors zweiter Stufe, wie sie in der Vorlesung definiert wurden, klar. Betrachten Sie als Analogie dazu den Unterschied zwischen den Kugelflächenfunktionen zu $l = 2$ sowie den zugehörigen Orbitalen.

f. Sie dürfen gern mehr als die ersten Seiten des Kapitels lesen.

13.2 Anwendung des Wigner-Eckart-Theorems für zwei wechselwirkende Drehimpulse

Nehmen Sie für die folgenden Aufgaben den Artikel R. Schnalle, J. Schnack, *Calculating the energy spectra of magnetic molecules: application of real- and spin-space symmetries*, Int. Rev. Phys. Chem. **29** (2010) 403-452 als Referenz. Sie finden ihn als pdf in stud.ip.

a. Laut Wigner-Eckart-Theorem gilt

$$\langle\, \alpha\, S\, M \mid \underset{\sim}{T}_q^{(k)} \mid \alpha'\, S'\, M' \,\rangle \quad = \quad (-1)^{S-M} \langle \alpha\, S || \underset{\sim}{\mathbf{T}}^{(k)} || \alpha'\, S' \rangle \begin{pmatrix} S & k & S' \\ -M & q & M' \end{pmatrix} \; . \tag{1}$$

Berechnen Sie damit die reduzierten Matrixelemente

$$\langle s || \underset{\sim}{\mathbf{s}}^{(0)} || s \rangle \quad , \quad \langle s || \underset{\sim}{\mathbf{s}}^{(1)} || s \rangle \; . \tag{2}$$

b. Im folgenden sollen die Eigenwerte eines Produktes zweier Drehimpulsoperatoren s_1 und s_2, wie sie im Heisenbergmodell oder der Spin-Bahn-Wechselwirkung auftreten, berechnet werden. Für einen sphärischen Tensor, der als Produkt zweier anderer Tensoren geschrieben werden kann, ergibt sich das reduzierte Matrixelement in diesem einfachen Fall zu

$$\langle s_1\, s_2\, S || \left\{ \underset{\sim}{\mathbf{T}}^{(k_1)} \otimes \underset{\sim}{\mathbf{T}}^{(k_2)} \right\}_q^{(k)} || s_1\, s_2\, S' \rangle \tag{3}$$

$$= \quad \left[(2S+1)\,(2S'+1)\,(2k+1) \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} s_1 & s_1' & k_1 \\ s_2 & s_2' & k_2 \\ S & S' & k \end{pmatrix}$$
$$\times \langle s_1 || \underset{\sim}{\mathbf{T}}^{(k_1)} || s_1 \rangle \langle s_2 || \underset{\sim}{\mathbf{T}}^{(k_2)} || s_2 \rangle \; , \tag{4}$$

vgl. Gleichung (19) im angegebenen Artikel.

Berechnen Sie damit die (Ihnen bekannten) Eigenwerte von

$$\underset{\sim}{H} \quad = \quad -2J\, \underset{\sim}{\mathbf{s}}_1 \cdot \underset{\sim}{\mathbf{s}}_2 = 2\sqrt{3} J \left\{ \underset{\sim}{\mathbf{s}}_1^{(1)} \otimes \underset{\sim}{\mathbf{s}}_2^{(1)} \right\}^{(0)} \; . \tag{5}$$

Erarbeiten Sie sich die unterschiedlichen Wigner-Symbole aus der Literatur.