

Universität Bielefeld Fakultät für Physik	Theoretische Physik III WS 2023/2024	Prof. Dr. Jürgen Schnack jschnack@uni-bielefeld.de
--	---	---

Aufgabenblatt 10

10.1 Antiferromagnetischer Dimer

Mit dieser Aufgabe möchte ich Ihnen die Möglichkeit geben, an einem übersichtlichen Quantensystem alle wesentlichen Observablen im kanonischen Ensemble zu berechnen. Wir betrachten zwei wechselwirkende quantenmechanische paramagnetische Momente mit Spinquantenzahl s . Die Wechselwirkung werde durch das Heisenberg-Modell beschrieben, d.h.

$$\tilde{H} = -\frac{2J}{\hbar^2} \tilde{s}_1 \cdot \tilde{s}_2 . \quad (1)$$

Dabei sei $J/k_B = -10$ K die antiferromagnetische Kopplung und $g\mu_B/k_B = 1.3434$ K/T ($T \equiv$ Tesla).

- Wiederholen Sie, wie man zwei Spins zu einem Gesamtspin koppelt.
- Wie lauten die Energieeigenwerte des Hamiltonoperators für beliebige Spinquantenzahlen $s_1 = s_2 = s$? Schauen Sie dazu in der Vorlesungsmitschrift nach und vollziehen Sie nach, wie der Hamiltonoperator durch quadratische Ergänzung vereinfacht werden kann.
- Wie lauten die Eigenzustände von \tilde{H} im Falle $s_1 = s_2 = 1/2$? Stellen Sie diese in der Produktbasis aus den Eigenzuständen zu s_1^z und s_2^z dar.
- Welche Operatoren vertauschen mit \tilde{H} und untereinander, d.h. bilden einen Satz kommutierender Observabler?
- Berechnen Sie die Magnetisierung

$$\mathcal{M}(T, B) = \langle \langle -\frac{g\mu_B}{\hbar} \tilde{S}^z \rangle \rangle \quad (2)$$

im homogenen Magnetfeld $\vec{B} = B\vec{e}_z$ für den Fall $s_1 = s_2 = 1/2$. Dabei ist \tilde{S}^z die z -Komponente des Gesamtspins. Beachten Sie, dass Sie den Zeeman-Term

$$\tilde{H}_{\text{Zeeman}} = \frac{g\mu_B}{\hbar} B \tilde{S}^z \quad (3)$$

zum Heisenberg-Hamiltonoperator hinzunehmen müssen. Warum geht das so einfach? Diskutieren Sie dazu die Eigenwerte des Gesamthamiltonoperators.

- f. Stellen Sie $\frac{\mathcal{M}(T,B)}{g\mu_B}$ als Funktion von B für $T = 0$, $T = 1$ K und $T = 10$ K im Bereich von $B = 0, \dots, 50$ T graphisch dar. Hier können Sie endlich mal richtige Einheiten verwenden! Interpretieren Sie das Ergebnis. Stellen Sie zu diesem Zweck die Energieniveaus als Funktion des Magnetfeldes dar.
- g. Berechnen Sie jetzt die Magnetisierung $\mathcal{M}(T, B)$ im homogenen Magnetfeld $\vec{B} = B\vec{e}_z$ für den Fall $s_1 = s_2 = 1$. Das ist nicht wirklich komplizierter, ergibt aber eine noch interessante Magnetisierungskurve, d.h. $\frac{\mathcal{M}(T,B)}{g\mu_B}$ als Funktion von B .
- h. Berechnen Sie, eventuell mit Mathematica o. ä., die Entropie $S(T, B)$ des Dimers im homogenen Magnetfeld \vec{B} . Stellen Sie einige Isentropen graphisch dar.

Bevor Sie „wild“ losrechnen, schauen Sie sich die Formeln genau an. Sie brauchen **NIE** \hbar oder k_B als Zahlen zu verwenden.

- **Zusatzaufgabe:** Die folgenden Beweise sind eine schöne Wiederholung aus der Quantenmechanik. Der Gesamtspin ist $\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$, der Hamiltonoperator sei $\tilde{H} = \alpha\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 + \gamma B S^z$. Zeigen Sie explizit, dass $[\tilde{H}, S^z] = [\tilde{H}, S^2] = 0$.
- **Zusatzaufgabe:** Noch eine schöne Aufgabe, diesmal aus der Linearen Algebra. Berechnen Sie für den Fall $s_1 = s_2 = 1/2$ die Matrixdarstellung des Hamiltonoperators (1) in der Produktbasis. Konstruieren Sie die unitäre Matrix U , mit der $U^\dagger H U$ diagonal wird.
- **Zusatzaufgabe:** Warum konnte man noch mal die z -Achse des Koordinatensystems einfach in Richtung des homogenen Feldes legen?