Übungsaufgaben — Theoretische Physik IV

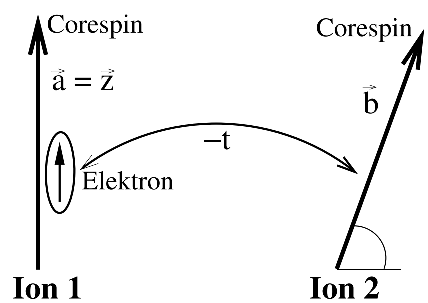
SS 06 — Prof. Dr. C. Gros

11. Übung — Abgabe: Di., 11.07.06
(in der Vorlesung)

Aufgabe 37

Ferromagnetischer Doppelaustausch **5 Punkte**

Wir betrachten zwei Gitterplätze, auf denen sich je ein Orbital eines Mn^{4+}-Ions befindet, in dem sich ein Elektron aufhalten kann. Die Orbitale auf Platz 1 und Platz 2 seien zueinander orthogonal. Die äußersten Valenz-Elektronen (an das Ion gebundene Elektronen) der Mn^{4+}-Ionen tragen einen Spin (Corespin), der wie ein lokales magnetisches Feld wirkt. Der Corespin ist an beiden Gitterplätzen unterschiedlich ausgerichtet, d.h. Richtung $\vec{a}$ im Ion 1 und Richtung $\vec{b}$ im Ion 2.



Wir betrachten nun ein einzelnes bewegliches Elektron in diesem System. Durch die Hund'schen Regeln der Atomphysik koppelt der Spin des beweglichen Elektrons an den lokalen Corespin der Mn^{4+}-Ionen. Das wird durch den Operator

$$\hat{V} \;=\; -J\,\Big(\,|1,+a\rangle\langle 1,+a| \,-\, |1,-a\rangle\langle 1,-a| \,+\, |2,+b\rangle\langle 2,+b| \,-\, |2,-b\rangle\langle 2,-b|\,\Big)$$

beschrieben ($J > 0$), wobei $|1,\pm a\rangle$ bzw. $|2,\pm b\rangle$ bedeutet, dass sich das Elektron am Platz 1 bzw. 2 befindet und sein Spin parallel/antiparallel zum lokalen Corespin (a- bzw. b-Richtung) zeigt. Das heißt zum Beispiel, dass der Spinanteil im Zustand, $|1,+a\rangle$, Eigenvektor zum positiven Eigenwert von, $\vec{S}\cdot\vec{a}$, ist. Die Vektoren $\vec{a}$ und $\vec{b}$ sind dabei normiert ($|\vec{a}| = |\vec{b}| = 1$).

Das Elektron kann unter Spinerhaltung zwischen den beiden Orbitalen hin- und herhüpfen, was durch den Operator

$$\hat{T} \;=\; -t\,\Big(\,|1,+a\rangle\langle 2,+a| \;+\; |1,-a\rangle\langle 2,-a| \;+\; |2,+a\rangle\langle 1,+a| \;+\; |2,-a\rangle\langle 1,-a|\,\Big)$$

($t > 0$) beschrieben werden kann. Der gesamte Hamiltonoperator ist durch $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ gegeben. *Achtung:* $|2,\pm a\rangle \neq |2,\pm b\rangle$!!

a) Aufstellen des Hamiltonoperators: Wir drehen den ersten Corespin (a-Achse) in die z-Richtung. Die x-Achse wird so gedreht, dass der Vektor des zweiten Corespins durch $\vec{b} = (\sin\theta, 0, \cos\theta)$ relativ zur a-Richtung beschrieben werden kann. Finden Sie die Matrix-Elemente des Hamilton-Operators in der Basis $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^{4}$ mit $|\phi_1\rangle = |1,+a\rangle$, $|\phi_2\rangle = |1,-a\rangle$, $|\phi_3\rangle = |2,+b\rangle$, $|\phi_4\rangle = |2,-b\rangle$. Berechnen Sie dazu $\langle 2,\pm a|2,\pm b\rangle$ als Funktion von θ unter Verwendung folgender Formeln (Vergleiche mit Übungsaufgabe 29 - Notation leicht abgeändert!):

$$
\begin{aligned}
|+b\rangle &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|+a\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|-a\rangle \\
|-b\rangle &= \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|+a\rangle - \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|-a\rangle .
\end{aligned}
$$

b) **Störungsrechnung:** Betrachten Sie den Fall großer Kopplung $J \gg t$, und fassen Sie den Operator $\hat{T}$ als kleine Störung von $\hat{V}$ auf.
Wie lauten die ungestörten Eigenzustände. Wie lauten die Energiekorrekturen erster Ordnung (lineare Energiekorrekturen) der Grundzustände?

c) Für welchen Winkel zwischen den beiden Corespins tritt in linearer Näherung die niedrigste Energie auf?

d) Welche Ladung tragen die beiden Mn-Ionen im Grundzustand in 1.Ordnung Störungstheorie.

Hinweis: Der Grundzustand des ungestörten Operators ist entartet, der Eigenraum des Grundzustandes sei $|\psi_m^{(0)}\rangle$. Es genügt, die Matrixelemente von

$$
H_{mn}^{(0)} = \delta_{mn} E_0^{(0)} + \langle \psi_m^{(0)} | \hat{T} | \psi_n^{(0)} \rangle
$$

zu betrachten, wobei $E_0^{(0)}$ die Grundzustandsenergie des ungestörten Systems ist.

Aufgabe 38

Paritätsoperator **2 Punkte**

Finden Sie die Eigenzustände des Paritätsoperators U_p. Wann kommutiert U_p mit einem Hamiltonian H? Berechnen Sie den Mittelwert von x und p in den Eigenzuständen von U_p.

Aufgabe 39

Symmetrien **3 Punkte**

Sei V ein durch

$$
V = A\vec{S}\cdot\vec{r} + B\vec{S}\cdot\vec{p} + C\left(\vec{r}\cdot\vec{p} + \vec{p}\cdot\vec{r}\right)
$$

definiertes Potential, wobei $\vec{S}$, $\vec{r}$ und $\vec{p}$ der Spin-, Orts-, und Impulsoperator ist. Welche Bedingungen müssen die Konstanten A, B und C erfüllen, damit das Potential V unter

a) der Zeitumkehr (U_T)

b) der Parität (U_P)

c) U_T und U_P

d) $U_T \cdot U_P$

invariant ist?