

I.1 Matrixdarstellung des Heisenberg-Modells

Das Heisenberg-Modell wurde 1928 von Werner Heisenberg als Modell für Ferromagnetismus eingeführt und 1931 von Bethe im 1-dimensionalen Fall gelöst („Bethe-Ansatz“, erst 1966 von Yang + Yang bestätigt).

Wir schreiben es (mit einer von Bethe und z.B. Baxter um den Faktor 2 abweichenden Normierung) analog

zum Ising-Modell:
$$H_0 = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j$$

wobei $\langle i,j \rangle$ die Summe über alle nächst-Nachbar-Paare von Spins bezeichnet und $\vec{\sigma}_i = (\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z)$

mit $\sigma_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$; $\sigma_i^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$; $\sigma_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Beachte: in der Literatur wird meist $\vec{S}_i \equiv \vec{\sigma}_i$ verwendet (obwohl in unserer Nomenklatur $\vec{S}_i = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}_i$).

Verallgemeinertes NN-Heisenberg-Modell:

$$H_0 = \sum_{\langle i,j \rangle} [-J_x \sigma_i^x \sigma_j^x - J_y \sigma_i^y \sigma_j^y - J_z \sigma_i^z \sigma_j^z]$$

$$\begin{aligned} J_x = J_y = 0 &\leadsto \text{Ising-Modell} \\ J_x = J_y \neq 0 &\leadsto \text{XXY-Modell} \end{aligned}$$

In allen Fällen lässt sich ein Magnetfeld

ankoppeln:
$$H = H_0 - \mu_B \vec{B} \sum_i \vec{\sigma}_i$$

Zur leichteren Handhabung formt man die nichtdiagonalen Elemente noch um. Mit

$$2\sigma^{(+)} := \sigma^x + i\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad 2\sigma^{(-)} := \sigma^x - i\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \sigma_i^{(+)} \sigma_j^{(-)} &= \frac{1}{4} (\sigma_i^x + i\sigma_i^y) (\sigma_j^x - i\sigma_j^y) \\ &= \frac{1}{4} [\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y - i(\sigma_i^x \sigma_j^y - \sigma_i^y \sigma_j^x)] \end{aligned}$$

$$\sigma_i^{(-)} \sigma_j^{(+)} = \frac{1}{4} [\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y + i(\sigma_i^x \sigma_j^y - \sigma_i^y \sigma_j^x)]$$

folgt:
$$\begin{aligned} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j &= \sigma_i^z \sigma_j^z + \sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y \\ &= \sigma_i^z \sigma_j^z + 2(\sigma_i^{(+)} \sigma_j^{(-)} + \sigma_i^{(-)} \sigma_j^{(+)}) \end{aligned}$$

Damit erhalten wir für das isotrope Heisenberg-Modell (bei dem die Quantisierungsachse z ggf. durch ein Magnetfeld festgelegt wird):

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [\sigma_i^z \sigma_j^z + 2(\sigma_i^{(+)} \sigma_j^{(-)} + \sigma_i^{(-)} \sigma_j^{(+)})] - B \sum_i \sigma_i^z$$

Bei der Anwendung auf einen der Basisvektoren

$$\{ \sigma_i^z \} = | \sigma_1^z \rangle \otimes | \sigma_2^z \rangle \otimes \dots \otimes | \sigma_N^z \rangle; \quad \sigma_i \in \{ \uparrow, \downarrow \} \equiv \{ 1, -1 \}$$

liefert jeder elementare Operator ein Vielfaches eines Basisvektors mit Faktor $c \in \{ -1, 0, 1 \}$

$$\sigma_j^z | \sigma_1^z \dots, \uparrow, \dots, \sigma_N^z \rangle = | \sigma_1^z \dots, \uparrow, \dots, \sigma_N^z \rangle$$

$$\sigma_j^z | \sigma_1^z \dots, \downarrow, \dots, \sigma_N^z \rangle = - | \sigma_1^z \dots, \downarrow, \dots, \sigma_N^z \rangle$$

$$\sigma_j^{(+)} | \sigma_1^z \dots, \uparrow, \dots, \sigma_N^z \rangle = 0 | \sigma_1^z \dots, \uparrow, \dots, \sigma_N^z \rangle = \vec{0}$$

$$\sigma_j^{(+)} | \sigma_1^z \dots, \downarrow, \dots, \sigma_N^z \rangle = | \sigma_1^z \dots, \uparrow, \dots, \sigma_N^z \rangle \quad \text{nicht-diagonal}$$

$$\begin{aligned} \sigma_j^{(-)} |\sigma_{11}^z, \dots, \uparrow, \dots, \sigma_N^z\rangle &= |\sigma_{11}^z, \dots, \downarrow, \dots, \sigma_N^z\rangle \text{ nicht-diagonal} \\ \sigma_j^{(-)} |\sigma_{11}^z, \dots, \downarrow, \dots, \sigma_N^z\rangle &= 0 |\sigma_{11}^z, \dots, \downarrow, \dots, \sigma_N^z\rangle = \vec{0} \end{aligned}$$

Beispiel: 2 Spins (offene Randbedingungen)

$$H \rightarrow -J \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} \uparrow\uparrow & \uparrow\downarrow & \downarrow\uparrow & \downarrow\downarrow \end{array} \\ \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 & \uparrow\uparrow \\ 0 & -1 & 2 & 0 & \uparrow\downarrow \\ 0 & 2 & -1 & 0 & \downarrow\uparrow \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \downarrow\downarrow \end{array} \right) \end{array} \text{ Block-diagonal!}$$

Allgemein haben 2×2 -Matrizen der Form

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix} \text{ die Eigenvektoren } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ zum EW } A+B$$

$$\text{und } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \text{ zum EW } A-B.$$

Unser Modell hat also die Energie-Eigenwerte

$$E_1 = E_2 = E_3 = -J \text{ (Spin-Triplett) und } E_4 = 3J$$

(Spin-Singulett); die Vielfachheiten hätte man aus der $SU(2)$ -Invarianz von H direkt folgern können. Es kommt auf das Vorzeichen von J an, welches die Grundzustandsenergie ist; nur für das antiferromagnetische Modell ($J < 0$) ist der Grundzustand eindeutig.

Allgemeine Bestimmung von Energie-EW und EV?
Schwierig!

4 Weltlinien - Quanten - Monte - Carlo - Methode (world line QMC)

Weltlinien-QMC ist ein konzeptionell relativ einfacher Zugang für Modelle wechselwirkender Quanten-Spins oder Fermionen, der erste Simulationen erlaubt und Basis für effizientere Algorithmen (Schleifen-, Wurm-Algorithmen) ist.

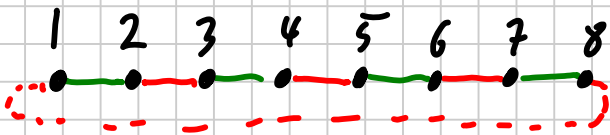
Grundidee von Weltlinien-Verfahren ist es nun, den Hamilton-Operator so aufzuteilen, dass jeder der Teile in kommutierende 2-Platz-Terme zerfällt. Bei Modellen, in denen H maximal nächste Nachbarn auf einem hyperkubischen Gitter verbindet, sind das

$$2d \text{ Teile: } H = H_1^x + H_2^x + H_1^y + H_2^y + \dots$$

Wichtig: Notwendige Voraussetzung ist, dass die Systemlänge in jeder Richtung gerade ist: $L^d = 2n_d$

Speziell im vorliegenden 1-d-Fall:

$$H = \underbrace{\sum_{n=1}^{L/2} H^{(2n)}}_{H_1} + \underbrace{\sum_{n=1}^{L/2} H^{(2n-1)}}_{H_2}$$



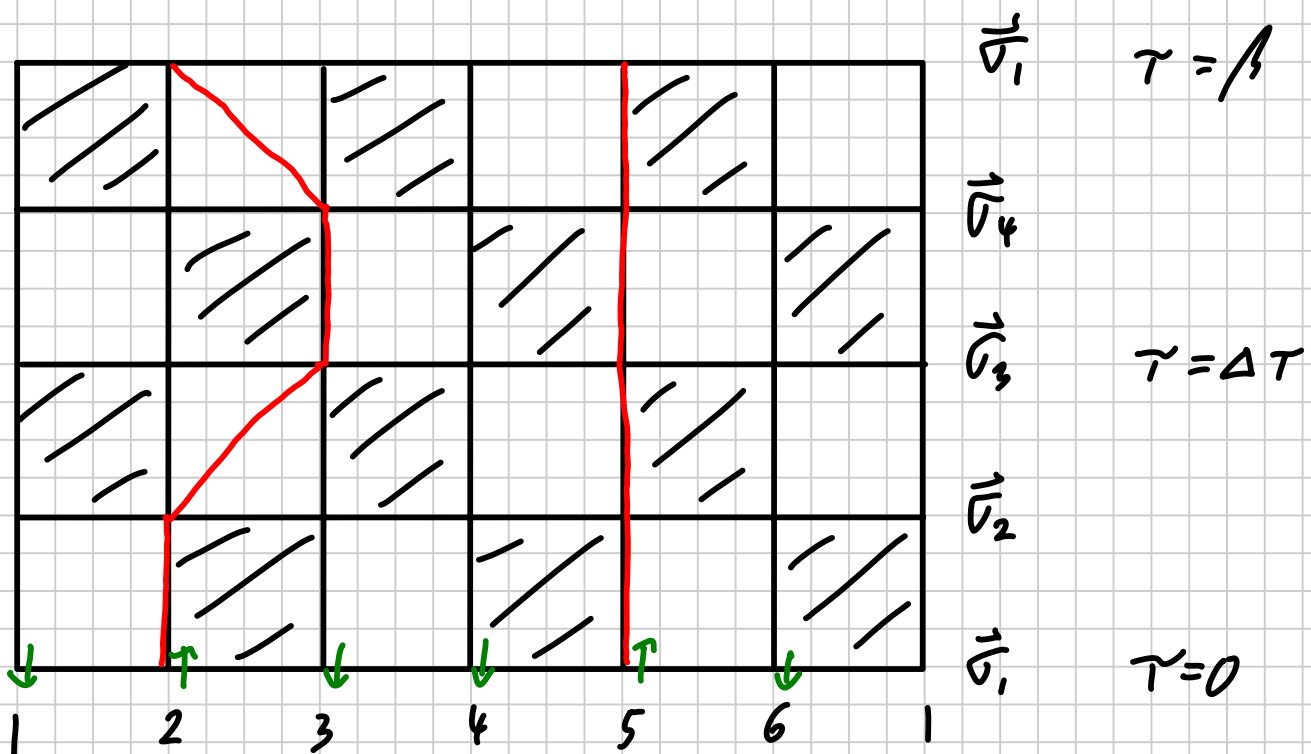
Diese Aufteilung wird nun in einer Trotter-Zerlegung der Zustandssumme benutzt ($\Delta\tau = \beta/M$):

$$\begin{aligned}
Z &= \text{Sp} [e^{-\beta H}] = \text{Sp} [(e^{-\Delta\tau H})^M] \\
&\approx \text{Sp} [(e^{-\Delta\tau H_1} e^{-\Delta\tau H_2})^M] \\
&= \sum_{\vec{\sigma}_1, \dots, \vec{\sigma}_{2M}} \langle \vec{\sigma}_1 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_{2M} \rangle \langle \vec{\sigma}_{2M} | e^{-\Delta\tau H_2} | \vec{\sigma}_{2M-1} \rangle \dots \\
&\quad \langle \vec{\sigma}_3 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_2 \rangle \langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta\tau H_2} | \vec{\sigma}_1 \rangle
\end{aligned}$$

mit dem Gesamtspinvektor $\vec{\sigma}_\tau$ zur imaginären Zeit τ :

$$\vec{\sigma}_\tau = (\sigma_{1,\tau}, \sigma_{2,\tau}, \dots, \sigma_{L,\tau})$$

Graphische Repräsentation: Weltlinien – Evolution von \uparrow -Zuständen (bei Fermion-Simulationen: von besetzten Zuständen) in der imaginären Zeit:



$L=6$ Spins, davon 2 up-Spins ($S^z = -1$),

$M=2$ Diskretisierungsschritte der imaginären Zeit.