

Bevor wir praktische Methoden zur Lösung von Eigenwert-Problemen behandeln, wollen wir noch einen scheinbaren Widerspruch auflösen. Für eine $N \times N$ Zufallsmatrix Z (z.B. alle z_{ij} unabhängige gleichverteilte Zufallszahlen aus Intervall $[0,1)$) erwarten wir mit Wahrscheinlichkeit $P_1=1$, dass alle N Nullstellen von $p(\lambda)$ verschieden sind (da die Unterräume mit $\lambda_i = \lambda_j$ für ein Paar $i \neq j$ vom Maß 0 sind). Laut der letzten Vorlesung existiert dann eine vollständige Basis von Eigenvektoren $\{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N\}$. Andererseits ist $Z^+ Z - Z Z^+ \neq 0$, mit $W^+ P_2 = 1$ ist Z also nicht-normal, d.h. nicht diagonalisierbar!

Lösung: Die EV $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N$ sind i.A. nur Rechts-EV und nicht-orthogonal. Jeder Rechts-EV \vec{x}_i^R ist i.A. nur zu Links-EV \vec{x}_j^L zu verschiedenem EW orthogonal:

$$\lambda_i \vec{x}_i^L \cdot \vec{x}_j^R = \vec{x}_i^L{}^T A \vec{x}_j^R = \vec{x}_i^L{}^T \vec{x}_j^R \lambda_j = \lambda_j \vec{x}_i^L \cdot \vec{x}_j^R$$

$$\Rightarrow (\lambda_i - \lambda_j) \vec{x}_i^L \cdot \vec{x}_j^R = 0 \quad \forall i, j$$

Beispiele:

(i) $A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \Rightarrow \lambda_1 = \lambda_2 = 2$, einziger EV $\vec{x}_1^R = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

(ii) $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \Rightarrow \lambda_1 = 1; \lambda_2 = 2; \vec{x}_1^R = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{x}_2^R = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\vec{x}_1^L = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \vec{x}_2^L = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

II.3 Reduktion des Hilbertraums (vor ED)

Ein effizienter Einsatz von ED-Methoden auf physikalische Probleme setzt in der Regel eine Reduktion des Hilbertraums, also der Dimension der jeweils zu diagonalisierenden Hamilton-Matrizen voraus. Dazu werden die Basisvektoren nach Symmetrien oder anderen Erhaltungsgrößen klassifiziert bzw. wird eine neue geeignete Basis gesucht.

Grandprinzip: Falls der Operator \hat{P} mit dem Hamiltonoperator \hat{H} vertauscht, $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$, so gibt es eine gemeinsame Eigenbasis. Konsequenz: \hat{H} koppelt keine \hat{P} -Eigenzustände zu verschiedenen \hat{P} -Eigenwerten; folglich kann \hat{H} in den einzelnen \hat{P} -Eigenräumen separat diagonalisiert werden. Bei mehreren Symmetrien $\hat{P}, \hat{Q}, \hat{R}, \dots$, kann die Dimension für die ED-Schritte weiter reduziert werden.

Außer der Reduktion des numerischen Aufwands hilft die Symmetrieklassifikation auch bei der physikalischen Interpretation und bei der Grenzwertbildung $N \rightarrow \infty$.

Symmetrien des Heisenberg-Modells (in Ising-Basis):

- z-Komponente des Gesamtspins $m_z = \sum_{i=1}^N \sigma_i^z$ EW: $\{-N, -N+2, \dots, N\}$
- Spin-Umkehr $\sigma_i^z \rightarrow -\sigma_i^z \quad \forall 1 \leq i \leq N$ EW: ± 1
- Spiegelung $\sigma_i^z \leftrightarrow \sigma_{N-i}^z \quad \forall 1 \leq i \leq N$ EW: ± 1
- Translation $\sigma_i^z \rightarrow \sigma_{i+1}^z \quad \parallel$ (nur bei periodischen Randbedingungen) EW: $e^{2\pi i k/N}, 0 \leq k < N$
- Diagonalspiegelung (nur $d \geq 1$), z.B. $\sigma_{ij}^z \rightarrow \sigma_{ji}^z$ EW: ± 1

Dabei hilft die Spinumkehr höchstens im $m_z = 0$ -Sektor.

1. Beispiel: Heisenberg-Modell, $N=2$

Hier Spiegelung $\hat{=}$ Translation, daher egal, ob offene oder periodische Randbedingungen

$m_z=2$: einziger Repräsentant $|2,1\rangle = \uparrow\uparrow$
 damit automatisch \hat{H} -EV $\hat{H}|2,1\rangle = -2J|2,1\rangle$
 auch EV bezüglich Spiegelung (und Translation)

$m_z=0$: Repräsentanten $\uparrow\downarrow$ und $\downarrow\uparrow$
 hier Spin-Umkehr $\hat{=}$ Spiegelung ($\hat{=}$ Translation)

automatisch \rightarrow symm Lösung ($q=0$): $|0,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow)$
 EV, da einz. Repräsentant zu (m_z, q) antisymm. " ($q=\pi$): $|0,2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$

$$H = \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 4 & 2 \end{pmatrix} \begin{matrix} \uparrow\downarrow \\ \downarrow\uparrow \end{matrix}$$

$$\begin{aligned} H|0,1\rangle &= 6J|0,1\rangle \\ H|0,2\rangle &= -2J|0,2\rangle \end{aligned}$$

$$m_z=-2: |-2,1\rangle = \downarrow\downarrow; H|-2,1\rangle = -2J|-2,1\rangle$$

Damit ergibt sich für die unitäre Transformationsmatrix ($J=1$):

$$U' H U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 4 & 0 \\ 0 & 4 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{6}{\sqrt{2}} & -\frac{2}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{6}{\sqrt{2}} & \frac{2}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

2. Beispiel: Heisenberg-Modell, $N=4$

$m_z = 0$:

(i) alternierend

$\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow$

$\downarrow \uparrow \downarrow \uparrow$

$p=0: \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
 $p=\pi: \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
 $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

$|0,1\rangle$

$|0,2\rangle$

mögliche
Kopplungen

(ii) phasensepariert

$\uparrow \uparrow \downarrow \downarrow$

$\downarrow \uparrow \uparrow \downarrow$

$\downarrow \downarrow \uparrow \uparrow$

$\uparrow \downarrow \downarrow \uparrow$

$p=0$

$\frac{1}{2}$

1

1

1

1

$|0,3\rangle$

$p=\frac{\pi}{2}$

$\frac{1}{\sqrt{2}}$

1

0

-1

0

$|0,4\rangle$

0

1

0

-1

$|0,5\rangle$

$p=\pi$

$\frac{1}{2}$

1

-1

1

-1

$|0,6\rangle$