

II Exakte Diagonalisierung

Das in Kapitel I betrachtete Ising-Modell ist untypisch für quantenmechanische Modelle, da die natürliche Basis $\{\sigma_i^z\}$ bereits Eigenbasis ist, also alle Energieeigenwerte im Prinzip direkt angegeben werden können. Schon bei der minimalen Erweiterung, dem **transversalen Ising-Modell** (mit Magnetfeld senkrecht zur Quantisierungsachse, z.B. B_x), gilt dies nicht mehr.

Im Allgemeinen sind Hamilton-Operatoren von Vielteilchensystemen in naheliegenden Basen des Hilbertraums also nicht diagonal, so dass schon die Bestimmung der Grundzustandsenergie höchst nichttrivial ist, umso mehr die Bestimmung aller Eigenenergien und Eigenvektoren oder von thermischen Erwartungswerten, z.B. via $Z = \text{Tr}\{e^{-\beta H}\} \rightarrow \sum_i e^{-\beta E_i}$ mit Eigenzuständen i .

Allgemeinster Ansatz: **exakte Diagonalisierung von endlichen Systemen**. Dabei unterscheidet man die **vollständige Diagonalisierung** von einer **teilweisen Diagonalisierung**, typischerweise unter Benutzung des **Lanczos-Algorithmus**, bei dem nur extreme Eigenwerte und ggf. Eigenvektoren bestimmt werden. Eine weitere wichtige Unterscheidung bei Eigenwertproblemen (für hermitesche Matrizen) ist die zwischen **dicht** und **dünn besetzten Matrizen**; letztere ergeben sich insbesondere für Gittermodelle mit kurzreichweitiger Wechselwirkung.

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:

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

$$J_x = J_y = 0 \quad \leadsto \text{Ising-Modell}$$

$$J_x = J_y \neq 0 \quad \leadsto \text{XXY-Modell}$$

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: $\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j = \sigma_i^z \sigma_j^z + \sigma_i^+ \sigma_j^x + \sigma_i^- \sigma_j^y$

$$= \sigma_i^z \sigma_j^z + 2(\sigma_i^{(+)} \sigma_j^{(-)} + \sigma_i^{(-)} \sigma_j^{(+)})$$

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 $c \in \{ -1, 0, 1 \}$

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

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

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

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

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

Beispiel: 2 Spins (offene Randbedingungen)

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

Allgemein haben 2×2 -Matrizen der Form

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

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

Unser Modell hat also die Energie-Eigenwerte

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

(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!

II.2 Mathematischer Exkurs: Eigenwertprobleme

Literatur: • Stoer, Bulirsch, Numerische Mathematik 2, Springer
• Press, Teukolsky, Vetterling, Flannery,
Numerical Recipes (in C), Cambridge University Press

Einführung: Eine $N \times N$ -Matrix A hat den (Rechts-) Eigenvektor (EV) $\vec{x} \neq \vec{0}$ zum Eigenwert (EW) λ , falls gilt:

$$A\vec{x} = \lambda\vec{x} \Leftrightarrow (A - \lambda \mathbb{1}_N)\vec{x} = \vec{0}$$

$$\Rightarrow |A - \lambda \mathbb{1}| := \det(A - \lambda \mathbb{1}) = 0$$

Notwendige Bedingung für die Existenz eines EV zum EV λ_0 ist also eine Nullstelle des charakteristischen Polynoms $p(\lambda)$ an der Stelle λ_0 . Umgekehrt existiert für jede solche Nullstelle λ_i mindestens 1 zugehöriger EV. Folglich existiert z.B. im Fall von N verschiedenen Nullstellen eine vollständige Basis von ^{Rechts-}EVs (bei mehrfachen Nullstellen können dagegen i.A. [↑]zusätzlich Hauptvektoren auftreten).
i.A. nicht orthogonal

Definitionen: Eine $N \times N$ -Matrix $A = (a_{ij})$ heißt

reell, falls $a_{ij}^* = a_{ij} \quad \forall 1 \leq i, j \leq N$

symmetrisch, " $A^T = A \Leftrightarrow a_{ji} = a_{ij}$ "

hermitesch, " $A^\dagger = A \Leftrightarrow a_{ji}^* = a_{ij}$ "

orthogonal, " $A^T A = A A^T = \mathbb{1}$

unitär, " $A^\dagger A = A A^\dagger = \mathbb{1}$

normal, " $A^\dagger A = A A^\dagger$

Dabei heisst $A^T = (a_{ji})$ die Transponierte von A ,
 $A^* = (a_{ji}^*)$ die hermitesch konjugierte von A .

Offensichtlich gilt für reelle Matrizen: symmetrisch $\hat{=}$ hermitesch, orthogonal $\hat{=}$ unitär. Neben hermiteschen und unitären Matrizen sind z.B. auch schiefhermitesche Matrizen ($a_{ji}^* = -a_{ij}$) normal.

Unitäre Matrizen lassen die Länge $|\vec{x}| = \sqrt{\vec{x} \cdot \vec{x}}$ eines Vektors invariant: $|\vec{x}|^2 = \vec{x}^T \vec{x} = \vec{x}^T A^T A \vec{x} = (A \vec{x}) \cdot (A \vec{x}) = |A \vec{x}|^2$

Weiterhin heisst eine $N \times N$ -Matrix $A = (a_{ij})$

singulär, falls $\det |A| = 0$

diagonal, " $A = \text{diag} \{d\} \Leftrightarrow a_{ij} = d_i \delta_{ij} \quad \forall i, j$

tridiagonal, " $a_{ij} = 0$ für $|i-j| > 1$

obere Dreiecksmatrix, falls $a_{ij} = 0$ für $i > j$

Hessenbergmatrix, falls $a_{ij} = 0$ für $i > j+1$

Für eine nichtsinguläre $N \times N$ -Matrix T heisst die Abbildung $A \rightarrow T^{-1} A T$ eine Ähnlichkeitstransformation.

A und $T^{-1} A T$ heissen ähnlich.

Wichtige allgemeine Aussagen:

(i) Die EW einer Dreiecksmatrix sind die Diagonalelemente (Beweis: $p(\lambda) = \prod (a_{ii} - \lambda)$).

(ii) Eine Ähnlichkeitstransformation lässt das char. Polynom (und damit alle Eigenwerte) invariant:

$$\begin{aligned} \det |T^{-1}AT - \lambda \mathbb{1}| &= \det |T^{-1}AT - T^{-1}\lambda \mathbb{1}T| \\ &= \det |T^{-1}(A - \lambda \mathbb{1})T| \\ &= (\det |T|)^{-1} \det |A - \lambda \mathbb{1}| \det |T| \\ &= \det |A - \lambda \mathbb{1}| \end{aligned}$$

(iii) Satz von Schur: Jede $N \times N$ -Matrix A ist unitär ähnlich zu einer oberen Dreiecksmatrix R , d.h. für jedes A existiert eine unitäre Matrix U

$$\text{mit } U^{\dagger}AU = R; \quad R = \begin{pmatrix} * & & * \\ 0 & \ddots & \\ & & * \end{pmatrix}$$

(iv) Jede $N \times N$ -Matrix A ist ähnlich zu ihrer Jordan-Normalform, einer Block-Diagonalmatrix mit Blöcken der Gestalt $C_{\lambda}^{\eta} = \begin{pmatrix} \lambda & 1 & 0 \\ 0 & \ddots & \\ 0 & & \lambda \end{pmatrix}$

(v) Eine $N \times N$ -Matrix A ist genau dann normal, wenn es eine unitäre Matrix U gibt mit

$$U^{-1}AU = U^{\dagger}AU = D = \text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\},$$

d.h. (nur) normale Matrizen haben eine vollständige Basis von orthonormalen Eigenvektoren, den Spalten von U .

(vi) Alle EW einer hermiteschen Matrix A sind reell (Beweis: $(U^+AU)^+ = U^+A^+U = U^+AU$ ist wieder hermitesch, insbesondere für U nach (v); jede hermitesche Diagonalmatrix ist jedoch reell).

In der Physik interessieren wir uns vorwiegend für EWs und EVs von hermiteschen Matrizen; viele Lösungsverfahren sind jedoch allgemeiner (z. B. Tridiagonalmatrix \rightarrow Hessenbergmatrix).

Selbst für hermitesche $N \times N$ -Matrizen ist das EW-Problem höchst nichttrivial: für $N \geq 5$ gibt es keine allgemeine analytische Lösung, d. h. kein Verfahren, das in endlich vielen Schritten exakte Eigenwerte liefert.

Vollständige Eigenbasis \leftrightarrow diagonalisierbar?

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 $Z^T Z - Z Z^T \neq 0$, mit $W^T P_2 = 1$ 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.

Grundprinzip: 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 $d > 1$), z.B. $\sigma_{ij}^z \rightarrow \sigma_{ji}^z$ EW: ± 1

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