Exakte Diagonalisierung

Problembeschreibung

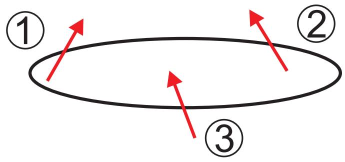

Abbildung 1: Spinkette mit drei Spins

Mit Hilfe der exakten Diagonalisierung soll die Lösung des isotropen Spin-1/2-Heisenberg-Modells bestimmt werden. Das Modell enthalte N Spins, die Randbedingungen seien periodisch (siehe Abb. 1, für $N = 3$). Der Hamiltonian für dieses Problem ist

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{i=1}^{N} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \qquad (\vec{S}_{N+1} \equiv \vec{S}_1) \\ &= -J \sum_{i=1}^{N} \left(S_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2} \left(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+ \right) \right) \end{aligned}$$

Aufgaben & Anleitung

1. Bestimme die Hamiltonmatrix $\underline{\underline{H}}$ für $N = 3$ in der initialen Basis:

$$\begin{aligned} &|1\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \quad |2\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \quad |3\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \quad |4\rangle = |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\ &|5\rangle = |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \quad |6\rangle = |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \quad |7\rangle = |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \quad |8\rangle = |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned} \tag{1}$$

2. Untersuche die Symmetrien des in Abb. 1 skizzierten Systems. Welchen Einfluss haben die Symmetrieen auf die Struktur der Hamiltonmatrix?

3. Bestimme die Eigenpaare (Eigenpaar $\equiv$ Eigenvektor und Eigenwert) der Matrix analytisch.
Hinweis: Durch Ausnutzung der Symmetrien lässt sich Matrix in Blockdiagonalform bringen.

4. Bestimme das Eigenpaar, das zum größten Eigenwert gehört, mit Hilfe des von-Mises-Verfahrens.
Hinweis: Das von-Mises-Verfahren stellt nicht das effektivste Verfahren zur Bestimmung des größten Eigenpaars eines Matrixproblems dar, ist jedoch als einfaches Unterraumverfahren recht instruktiv. Reell symmetrische Matrizen besitzen eine Eigenbasis $\{\underline{u}_i\}$, in welcher jeder Vektor mit

$$\underline{x} = \sum_i c_i \underline{u}_i$$

darstellbar ist. Multipliziert man das von links mit $\underline{\underline{H}}^k$ (wobei hier die k-te Potenz der Matrix $\underline{\underline{H}}$ gemeint ist), so erhält man

$$\begin{aligned} \underline{\underline{H}}^{k-1} \cdot \underline{\underline{H}} \cdot \underline{x} &= \underline{\underline{H}}^{k-1} \cdot \sum_i \epsilon_i \, c_i \, \underline{u}_i = \ldots \\ &= \sum_i \epsilon_i^k \, c_i \, \underline{u}_i \\ &= \epsilon_m^k \left(c_m \, \underline{u}_m + \sum_{i \neq m} \left(\frac{\epsilon_i}{\epsilon_m} \right)^k c_i \, \underline{u}_i \right) \end{aligned} \tag{2}$$

für einen beliebigen Eigenwert ϵ_m. Wenn nun ϵ_m der betragsmäßig größte Eigenwert ist, verschwindet der zweite Summand mit $k \to \infty$. Es ist sofort klar, dass die Berechnung der Folge $\underline{\underline{H}}^k \cdot \underline{x}$ (über k) nicht sinnvoll ist, weil je nach Betrag von ϵ_m der Faktor ϵ_m^k nicht konvergiert. Daher wird $\underline{\underline{H}}^k \cdot \underline{x}$ für jedes k erneut normiert. Man erhält folgende Rechenvorschrift

$$
\begin{aligned}
\underline{y}^{(k)} &= \underline{\underline{H}} \cdot \underline{x}^{(k-1)} \\
\rho^{(k)} &= \underline{x}^{(k-1)} \cdot \underline{y}^{(k)} \\
\underline{x}^{(k)} &= \frac{\underline{y}^{(k)}}{\parallel \underline{y}^{(k)} \parallel}
\end{aligned}
$$

die man bis zur Konvergenz iteriert ($|\rho^{(k)} - \rho^{(k-1)}| < \epsilon$). Man erhält im Ergebnis das Eigenpaar $\{\rho, \underline{x}\}$ zum betragsmäßig größten Eigenwert.
Dieses Vorgehen ist jedoch nicht eindeutig. Existieren zwei betragsmäßig gleich Eigenwerte unterschiedlichen Vorzeichens ($\epsilon_i = -\epsilon_j$ wobei $i \neq j$), so schlägt das Verfahren fehl. Es ist dann sinnvoll das gesamte Eigenwertspektrum zu verschieben ($\underline{\underline{H}} \to \underline{\underline{H}} + \lambda \underline{\underline{1}}$), sodass alle Eigenwerte positiv (oder negativ) sind. Man wählt dann sinnigerweise $|\lambda| > \rho(\underline{\underline{H}})$ wobei $\rho(\underline{\underline{H}})$ der Spektralradius der Matrix $\underline{\underline{H}}$ ist, welcher sich leicht abschätzen lässt.

5. Bestimme die restlichen Eigenpaare mit dem von-Mises-Verfahren.
   Hinweis: Da die Matrix reell symmetrisch ist, sind die Eigenvektoren orthogonal aufeinander. Hat man nun bereits Eigenvektoren, kann man die restlichen durch Orthogonalisierung von Gleichung (2) bestimmen. Von Gleichung (2) zieht man nun immer den zum m-ten Eigenvektor gehörigen Anteil ab, fordert also, dass der Vektor $\underline{\underline{H}}^k \cdot \underline{x}$ senkrecht auf $\underline{u}_m$ ist

$$
\begin{aligned}
\epsilon_m^k \left(c_m \, \underline{u}_m + \sum_{i \neq m} \left(\frac{\epsilon_i}{\epsilon_m} \right)^k c_i \, \underline{u}_i \right) - \epsilon_m^k c_m \, \underline{u}_m &= \sum_{i \neq m} \left(\frac{\epsilon_i}{\epsilon_m} \right)^k c_i \, \underline{u}_i \\
&= \frac{1}{\epsilon_m^k} \sum_{i \neq m} \epsilon_i{}^k \, c_i \, \underline{u}_i
\end{aligned}
$$

   Mit der Summe $\sum_{i \neq m} \epsilon_i{}^k \, c_i$ fährt man nun wie in Aufgabe 4 fort. So erhält man sukzessive alle anderen Eigenpaare.

6. Vergleiche die Ergebnisse von Aufgabe 3 mit denen von Aufgabe 4 und 5.

7. Die Spins sollen nun an ein äußeres Magnetfeld angekoppelt werden. Ergänze den Hamiltonian und berechne den Erwartungswert der Magnetisierung $\langle M \rangle$ für verschiedene Magnetfelder h und Temperaturen T.
   Hinweis: Der Hamiltonian ist um $-h \sum_i S_i^z$ zu ergänzen:

$$
H_B = H - h \sum_i S_i^z
$$

Zusätzliche Anregungen

8. Wie ändern sich die Ergebnisse, wenn man offene Randbedingungen für die Spinkette annimmt?

9. Was ergibt sich für eine verlängerte Spinkette (mehr als drei Spins)?