Übungen zur Quantentheorie der Vielteilchensysteme

Aufgabe 20 — Perron-Frobenius-Theorem für reelle, symmetrische Matrizen
Es sei H mit Elementen H_{ij} eine reelle und symmetrische Matrix mit

$$H_{ij} \leq 0 \quad \forall i, j \,.$$

Es gelte zudem, dass alle $i \neq j$ durch nichtverschwindende Matrixelemente verbunden sind, d.h. dass für jedes $i \neq j$ eine Folge $(i_1, ..., i_R)$ gefunden werden kann, so dass $i_1 = i$ und $i_R = j$ und $H_{i_k i_{k+1}} \neq 0$ für $k = 1, ..., R-1$. Durch wiederholtes Anwenden von H werden also alle "Zustände" i von allen Startzuständen j erreicht (Ergodizität).

Zeigen Sie das Perron-Frobenius-Theorem: Der kleinste Eigenwert E_0 von H ist nicht entartet, und der zugehörige Eigenvektor $\boldsymbol{v}_0$ kann so gewählt werden, dass $v_i > 0$ für alle i.

a) Um das Theorem zu beweisen, betrachten Sie zunächst einen beliebigen Eigenvektor $\boldsymbol{u}$, und nehmen Sie an, dass $u_j = 0$ für ein j. Argumentieren Sie mit Hilfe der Eigenwertgleichung $\sum_k H_{jk} u_k = \lambda u_j$, dass dann auch $u_k = 0$ ist für alle k, die durch nichtverschwindende Matrixelemente mit j verbunden sind! Folgern Sie daraus, dass somit letztlich $u_i = 0$ für alle i gelten muss!

b) Es sei $\boldsymbol{u}$ ein beliebiger Eigenvektor von H zum Eigenwert λ. Weiter sei $u_i \geq 0$ für alle i. Begründen Sie mit a), dass dann $u_i > 0$ für alle i.

c) Betrachten Sie jetzt einen normierten Eigenvektor $\boldsymbol{v}$ zum kleinsten Eigenwert λ_0. Definieren Sie den Vektor $\boldsymbol{u}$ durch $u_i = |v_i|$. Zeigen Sie, dass einerseits

$$\lambda_0 = \sum_{ij} v_i H_{ij} v_j \geq \sum_{ij} u_i H_{ij} u_j$$

und dass aber andererseits wegen des Ritz Prinzips

$$\lambda_0 = \sum_{ij} v_i H_{ij} v_j \leq \sum_{ij} u_i H_{ij} u_j$$

gelten muss, und schließen Sie, dass $H\boldsymbol{u} = \lambda_0 \boldsymbol{u}$! Argumentieren Sie mit b), dass $u_i > 0$ und damit $v_i \neq 0$ für alle i!

d) Zu zeigen ist jetzt, dass $v_i > 0$ für alle i. Nehmen Sie an, dass $v_j > 0$ für ein j und $v_k < 0$ für ein k $(j \neq k)$ und führen Sie diese Annahme zum Widerspruch:

Begründen Sie dazu, dass unter obiger Annahme eine Folge $(i_1, ..., i_R)$ mit $i_1 = j$ und $i_R = k$ gefunden werden kann mit $H_{i_r i_{r+1}} \neq 0$ für alle r und mit $v_{i_r} > 0$ und $v_{i_{r+1}} < 0$ für ein bestimmtes r! Dann ist

$$v_{i_r} H_{i_r i_{r+1}} v_{i_{r+1}} > 0 \quad \text{und} \quad u_{i_r} H_{i_r i_{r+1}} u_{i_{r+1}} < 0$$

für dieses r. Begründen Sie, dass dann

$$\lambda_0 = \sum_{ij} v_i H_{ij} v_j > \sum_{ij} u_i H_{ij} u_j \ !$$

Warum führt das zum Widerspruch?

e) Nehmen Sie an, dass λ_0 entartet ist, so dass zwei orthogonale Eigenvektoren zu λ_0 gefunden werden können, und zeigen Sie, dass diese Annahme zum Widerspruch führt!

Aufgabe 21 — Lieb-Mattis-Theorem
Betrachten Sie das antiferromagnetische Spin-$1/2$-Heisenberg-Modell

$$H = H_{xy} + H_{zz} = \sum_{ij} J_{ij}(S_{ix}S_{jx} + S_{iy}S_{jy}) + \sum_{ij} J_{ij} S_{iz} S_{jz}$$

auf einem bipartiten Gitter mit $N_A = N_B$ (d.h. dass das Gitter in zwei Untergitter A und B mit gleicher Anzahl von Plätzen zerlegt werden kann, so dass jeder nächste Nachbar eines Platzes in A ein Platz in B ist und umgekehrt). Es sei weiter

$$\begin{aligned} J_{ij} &> 0 \qquad \text{für nächste Nachbarn, also antiferromagnetische Kopplung, und} \\ J_{ij} &= 0 \qquad \text{sonst .} \end{aligned}$$

Dann gilt: Der Grundzustand von H ist nicht entartet und ein Spin-Singulett, d.h. $S_{\text{tot}} = 0$.

Beweisen Sie das Lieb-Mattis-Theorem!

a) Begründen Sie dazu zunächst, dass durch

$$S_{ix} \to -S_{ix} \ , \qquad S_{iy} \to -S_{iy} \ , \qquad S_{iz} \to +S_{iz} \qquad \forall i \in \mathsf{A}$$

eine unitäre Transformation U definiert ist mit $H \mapsto UHU^\dagger = H' = -H_{xy} + H_{zz}$ und mit $\boldsymbol{S}_{\text{tot,z}} \mapsto U\boldsymbol{S}_{\text{tot,z}}U^\dagger = \boldsymbol{S}_{\text{tot,z}}$, wobei $\boldsymbol{S}_{\text{tot,z}} = \sum_i \boldsymbol{S}_{iz}$. Zu zeigen ist also, dass der Grundzustand von H' nicht entartet und ein Singulett ist.

b) Die Zustände

$$|n\rangle \equiv |m_1, m_2, ..., m_L\rangle = |m_1\rangle \cdots |m_L\rangle$$

mit $\sum_i m_i = M_{tot} = 0$ bilden eine ONB des $M_{\text{tot}} = 0$-Unterraums. Hier ist $L = N_A + N_B = 2N_A$ und $S_{iz}|m_i\rangle = m_i|m_i\rangle$. Die Quantenzahl n numeriert die verschiedenen Basiszustände durch.

Begründen Sie, dass es ausreicht zu zeigen, dass der Grundzustand von H' in diesem Unterraum nicht entartet und ein Singulett ist!

c) Begründen Sie, dass H_{zz} diagonal in dieser Basis ist! E_{max} sei die maximale Eigenenergie von H_{zz}. Zeigen Sie, dass

$$\langle n|H''|m\rangle \leq 0$$

für alle Basiszustände und für $H'' = H' - E_{\text{max}}$!

d) Damit kann das Perron-Frobenius-Theorem angewendet werden ("Ergodizität" ist gegeben, da durch die $J_{ij} > 0$ zwischen nächsten Nachbarn alle Plätze letztlich mit allen gekoppelt sind). Zeigen Sie auf diese Weise, dass H' im $M_{\rm tot} = 0$-Unterraum einen nicht-entarteten Grundzustand

$$|E_0\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

mit $c_n > 0$ besitzt!

e) Nehmen Sie an, dass im $M_{\rm tot} = 0$-Unterraum ein Zustand

$$|\Psi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle$$

existiert mit $a_n > 0$, der ein Eigenzustand von $\boldsymbol{S}_{\rm tot}^2$ zum Eigenwert $S_{\rm tot} = 0$, also ein Singulett ist. Begründen Sie, dass dann auch $|E_0\rangle$ ein Singulett ist! (Betrachten Sie das Skalarprodukt der beiden Zustände).

f) Damit muss nur noch die Existenz von $|\Psi\rangle$ gezeigt werden. Betrachten Sie dazu ein anderes System mit Hamiltonian

$$H''' = J \left(\sum_{i \in A} \boldsymbol{S}_i \right) \left(\sum_{j \in B} \boldsymbol{S}_j \right) = J \sum_{i \in A, j \in B} \boldsymbol{S}_i \boldsymbol{S}_j$$

mit $J > 0$, und begründen Sie, dass der Grundzustand von H''' im $M_{\rm tot} = 0$-Unterraum,

$$|\Psi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle \ ,$$

nicht entartet ist und dass $a_n > 0$ angenommen werden kann!

g) Zu zeigen ist jetzt nur noch, dass $|\Psi\rangle$ ein Singulett ist. Definieren Sie $\boldsymbol{S}_A = \sum_{i \in A} \boldsymbol{S}_i$ und $\boldsymbol{S}_B = \sum_{j \in B} \boldsymbol{S}_j$, drücken Sie H''' durch $\boldsymbol{S}_A$ und $\boldsymbol{S}_{\rm B}$ aus, und zeigen Sie so, dass die Eigenenergien von H''' durch

$$E = \frac{J}{2} \left[S_{\rm tot}(S_{\rm tot} + 1) - S_A(S_A + 1) - S_B(S_B + 1) \right]$$

gegeben sind, wobei S_A und S_B die Spin-Quantenzahlen der Spins $\boldsymbol{S}_A$ und $\boldsymbol{S}_B$ sind, und $|S_A - S_B| \leq S_{\rm tot} \leq S_A + S_B$! Für welches $S_{\rm tot}$ ist E bei gegebenen S_A, S_B minimal? Wie müssen also S_A und S_B gewählt werden, damit E minimal ist? Beachten Sie dabei $N_A = N_B$! Begründen Sie so, dass der Grundzustand $|\Psi\rangle$ ein Singulett ist!