# SP P7

25)

$$|\uparrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle \to |\uparrow\downarrow\rangle$$

i) $\hat{\varrho} = \left(|\uparrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\uparrow| + |\downarrow\downarrow\rangle\langle\downarrow\downarrow|\right)\frac{1}{2}$

ii) $\hat{\varrho} = \big( |\uparrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\uparrow| - |\uparrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\downarrow| - |\uparrow\downarrow\rangle\langle\uparrow\uparrow| + |\uparrow\downarrow\rangle\langle\uparrow\downarrow|$

$+ |\downarrow\uparrow\rangle\langle\downarrow\uparrow| - |\downarrow\uparrow\rangle\langle\downarrow\downarrow| - |\downarrow\downarrow\rangle\langle\downarrow\uparrow| + |\downarrow\downarrow\rangle\langle\downarrow\downarrow| \big)\frac{1}{4}$

a)

$\hat{\varrho}_1 = tr_2\{\hat{\varrho}\}$

i)

~~$\hat{\varrho}_1 = \langle\uparrow\uparrow|\hat{\varrho}|\uparrow\uparrow\rangle + \langle\downarrow\downarrow$~~

$$\hat{\varrho}_1 = \langle\uparrow_2|\hat{\varrho}|\uparrow_2\rangle + \langle\downarrow_2|\hat{\varrho}|\downarrow_2\rangle$$

$$\overset{!}{=} \frac{1}{2}\left( |\uparrow_1\rangle\langle\uparrow_1| + |\downarrow_1\rangle\langle\downarrow_1|\right)$$

$$\hat{\varrho}_2 = \langle\uparrow_1|\hat{\varrho}|\uparrow_1\rangle + \langle\downarrow_1|\hat{\varrho}|\downarrow_1\rangle$$

$$\overset{!}{=} \frac{1}{2}\left( |\uparrow_2\rangle\langle\uparrow_2| + |\downarrow_2\rangle\langle\downarrow_2|\right)$$

$(\varrho_{ij})_{\mathcal{B}} = \langle b_i|\hat{\varrho}|b_j\rangle$ ; $\mathcal{B} = (b_1, b_2, b_3, b_4) = \left(|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\right)$

$\Rightarrow (\hat{\varrho}_i)_{\mathcal{B}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$ ; $(\hat{\varrho}_1)_{\mathcal{B}_1} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ , $(\hat{\varrho}_2)_{\mathcal{B}_2} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

a ii)

$\cancel{\hat{e}_1 = \frac{1}{4}\left( |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + \right.}$

$$\underline{\hat{e}_1} = \frac{1}{4}\Big( |\uparrow_1\rangle\langle\uparrow_1| + |\uparrow_1\rangle\langle\uparrow_1| \quad {\scriptstyle +0+0)}$$

$$+ |\downarrow_1\rangle\langle\downarrow_1| + |\downarrow_1\rangle\langle\downarrow_1| \Big) = \underline{\frac{1}{2}\left( |\uparrow_1\rangle\langle\uparrow_1| + |\downarrow_1\rangle\langle\downarrow_1| \right)}$$

$$(+0+0)$$

$$\underline{\hat{e}_2} = \frac{1}{4}\Big( |\uparrow_2\rangle\langle\uparrow_2| - |\uparrow_2\rangle\langle\downarrow_2| - |\downarrow_2\rangle\langle\uparrow_2| + |\downarrow_2\rangle\langle\downarrow_2|$$

$$+ |\uparrow_2\rangle\langle\uparrow_2| - |\uparrow_2\rangle\langle\downarrow_2| - |\downarrow_2\rangle\langle\uparrow_2| + |\downarrow_2\rangle\langle\downarrow_2| \Big)$$

$$= \underline{\frac{1}{2}\left( |\uparrow_2\rangle\langle\uparrow_2| - |\uparrow_2\rangle\langle\downarrow_2| - |\downarrow_2\rangle\langle\uparrow_2| + |\downarrow_2\rangle\langle\downarrow_2| \right)}$$

$$(\hat{e}_{ii})_{\mathcal{B}} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad (\hat{e}_1)_{\mathcal{B}_1} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad (e_2)_{\mathcal{B}_2} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

b) aus Formelsammlung: $f(\hat{A}) = \sum_i f(\lambda_i) \, |\varphi_i \rangle\langle \varphi_i|$ wenn $\hat{A} = \sum_i \lambda_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$

i)

$$\log((\hat{\rho}_1)_B) = \left(\sum_i \log(\lambda_i) \, |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\right)_B = \log\left(\tfrac{1}{2}\right)\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix}\right]$$

$$= \log\left(\tfrac{1}{2}\right)\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow S_1 = -\operatorname{tr}\left(\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} \log\left(\tfrac{1}{2}\right)\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}\right) = -\frac{2}{2}\log\left(\tfrac{1}{2}\right) = \log(2)$$

$S_2 =$ analog $S_1 = \log(2)$

$$S = -\operatorname{tr}\left\{\begin{pmatrix}1/2 & & & \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & 1/2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\log(\tfrac{1}{2}) & & & \\ & \log(0) & & \\ & & \log(0) & \\ & & & \log(\tfrac{1}{2})\end{pmatrix}\right\} =$$

Nebenrechnung

$$\left[\lim_{x\to 0} x \log(x) = \lim_{x\to 0} \frac{1}{1/x}\log(x) \overset{\text{L'Hôpital}}{=} -\lim_{x\to 0} \underbrace{\frac{1}{\frac{1}{x^2}}}_{=x} \frac{1}{x} = 0\right]^*$$

$$= -2 \cdot \frac{1}{2}\log\left(\tfrac{1}{2}\right) = \log(2)$$

SP P7

25 b ii)

S: $(\hat{\varrho})_{\mathcal{B}} = \frac{1}{4} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{A} \simeq \frac{1}{4} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}}_{A'}$

~ o ~

$\exists D: \; A' = D^{-1} A D$ Eigenwerte bleiben für ähnliche Matrizen erhalten

E... Eigenwert

$A|e\rangle = E|e\rangle$

$A' \underbrace{D^{-1}|e\rangle}_{\text{neuer Eigenvektor}} = D^{-1} A \underbrace{D D^{-1}}_{\mathbb{1}} |e\rangle = D^{-1} A|e\rangle = D^{-1} E|e\rangle = E D^{-1}|e\rangle$

~ o ~

$\Rightarrow$ je 2 fach entartet:

$\left(\frac{1}{4} - \overset{\text{EW}}{\lambda}\right)^2 = \frac{1}{4^2}$

$\Rightarrow \lambda_1 = 0$ $(EV_1)_{\mathcal{B}}$: $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\1\\0\end{pmatrix}$, $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\0\\1\end{pmatrix}$

$\lambda_2 = \frac{1}{2}$ $(EV_2)_{\mathcal{B}}$: $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\-1\\0\end{pmatrix}$, $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\0\\-1\end{pmatrix}$

Neue Basis $\tilde{\mathcal{B}}$ aus Eigenvektoren

$(\hat{\varrho})_{\tilde{\mathcal{B}}} = \begin{pmatrix} 1/2 & & & \\ & 1/2 & & \\ & & 0 & \\ & & & 0 \end{pmatrix}$

$\Rightarrow S = -\mathrm{tr}\left(\begin{pmatrix} 1/2 & & & \\ & 1/2 & & \\ & & 0 & \\ & & & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \log(\frac{1}{2}) & & & \\ & \log(\frac{1}{2}) & & \\ & & 0 & \\ & & & 0 \end{pmatrix}\right)$

$= \log(2)$

25 b ii)

$\underline{S_1}$: $S_1 =$ analog i $= \log(2)$

$\underline{S_2}$:

$$(\hat{\varrho}_2)_B = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \overset{\text{analog } S_{ii}}{\Rightarrow} \begin{matrix} \lambda_1 = 0 \xrightarrow{EV} \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \lambda_2 = 1 \xrightarrow{EV} \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

$$\Rightarrow S_2 = -\mathrm{tr}\left(\begin{pmatrix} 1 & \\ & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \log(1) & \\ & \log(0) \end{pmatrix}\right) = \emptyset$$

i) $S \overset{?}{\leq} S_1 + S_2$ : $\log(2) \leq 2 \cdot \log(2)$ ✓

ii) $S \leq S_1 + S_2$ : $\log(2) \leq \log(2) + \emptyset$ ✓

$S = S_1 + S_2$ , wenn die Teilsysteme unverschränkt (zerfallend) sind.

Also $\hat{\varrho} = \hat{\varrho}_1 \otimes \hat{\varrho}_2$

**26. Gemischtvalenter Eisen(III) Komplex im Tight-Binding Modell**

Wir betrachten einen Eisen(III) Komplex, bestehend aus zwei $Fe^{3+}$ Ionen in einem elektrischen Feld der Stärke $\mathcal{E}$, die sich ein zusätzliches Elektron $e^-$ teilen. Im Tight-Binding Modell ist der Zustand des zusätzlichen Elektrons auf die Positionen 1 und 2 des ersten beziehungsweise zweiten Fe Ions beschränkt. Das elektrische Feld sei positiv in Richtung $\overrightarrow{12}$ definiert. Der kinetische Energiebeitrag $-\hbar^2\nabla^2/2m$ wird durch den Beitrag $-J/2 < 0$ zwischen jenen Zuständen modelliert, zwischen denen ein Elektronentransfer stattfindet, also

$$\langle 1|\hat{H}(\mathcal{E})|2\rangle = \langle 2|\hat{H}(\mathcal{E})|1\rangle = -J/2.$$

Die elektrostatische Energie im elektrischen Feld hängt nur von der Elektronenposition ab

$$\langle 1|\hat{H}(\mathcal{E})|1\rangle = -\langle 2|\hat{H}(\mathcal{E})|2\rangle = -\mathcal{E}d/2.$$

(a) Schreiben Sie den Hamiltonoperator $\hat{H}(\mathcal{E})$ in der Basis $\mathcal{B} = (|1\rangle, |2\rangle)$ als $2 \times 2$ Matrix und zeigen Sie, dass die kanonische Zustandssumme $Z_\mathrm{K}(\beta, \mathcal{E}) = \mathrm{tr}\{\exp[-\beta\hat{H}(\mathcal{E})]\}$ durch $2\cosh(\beta\gamma/2)$ mit $\gamma^2 = \mathcal{E}^2d^2 + J^2$ gegeben ist.
Hinweis: Sie brauchen nur die Eigenwerte einer Matrix für die Spurbildung.

(b) Finden Sie die freie Energie $F(T, \mathcal{E})$ als Funktion der Temperatur $T$ und der elektrischen Feldstärke $\mathcal{E}$. Zeigen Sie, dass sie für kleine elektrische Feldstärken gegeben ist durch $F(\beta, 0) - \tanh(\beta J/2)\mathcal{E}^2d^2/4J$.

(c) Finden Sie den Erwartungswert $\langle\hat{D}\rangle_\mathcal{E}$ des Dipoloperators $\hat{D} = -d/2\big(-|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|\big)$ als Funktion von Temperatur $T$ und elektrischer Feldstärke $\mathcal{E}$ mithilfe der Methode aus Aufgabe 18 als Ableitung $\partial F_\lambda(\beta, \mathcal{E})/\partial\lambda|_{\lambda=0}$ der freien Energie eines Systems mit dem parametrisierten Hamiltonoperator $\hat{H}_\lambda(\mathcal{E}) = \hat{H}(\mathcal{E}) + \lambda\hat{D}$. Zeigen Sie, dass die Polarisierbarkeit $\alpha = \lim_{\mathcal{E}\to 0}\langle\hat{D}\rangle_\mathcal{E}/\mathcal{E}$ durch $\tanh(\beta J/2)d^2/2J$ gegeben ist.

(a)

$$\hat{H}(\mathcal{E}) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\mathcal{E}d & -J \\ -J & \mathcal{E}d \end{pmatrix}$$

$$0 = \det(\hat{H}(\mathcal{E}) - \mathbb{1}\nu) = [-(\mathcal{E}\frac{d}{2})^2 + \nu^2 - \frac{1}{4}J^2] = [\nu^2 - \frac{1}{4}\gamma^2]$$

$$\Leftrightarrow \nu_1 = -\sqrt{\frac{\gamma^2}{4}} = -\frac{\gamma}{2} \quad \vee \quad \nu_2 = \frac{\gamma}{2}$$

Wir kennen nun die Eigenwerte und können mit diesen die Spur simpler berechnen.

$$Z_\mathrm{K}(\beta, \mathcal{E}) = \mathrm{tr}\{\exp[-\beta\hat{H}(\mathcal{E})]\} = \sum_{i=1}^{2} e^{\beta\nu_i} = e^{\frac{\beta\gamma}{2}} + e^{-\frac{\beta\gamma}{2}} = 2\cosh(\frac{\beta\gamma}{2})$$

(b) Um die freie Energie für kleine Feldstärken zu berechnen, werden wir zuerst die gesamte Funktion aufstellen und dann bei $\mathcal{E} = 0$ die Taylorentwicklung durchführen. Da der lineare Term entfällt, brechen wir erst nach dem quadratischen Term ab. Folgende Relationen werden in der kommenden Rechnung oft gebraucht: $\frac{\partial\gamma}{\partial\mathcal{E}} = \frac{\mathcal{E}d^2}{\gamma}$ und $\gamma|_{\mathcal{E}=0} = J$.

$$\begin{aligned}
F(T,\mathcal{E}) &= -k_BT\log(Z_\mathrm{K}) = -k_BT\log(2\cosh(\frac{\beta\gamma}{2})) \\
\frac{\partial}{\partial\mathcal{E}}\bigg|_{\mathcal{E}=0} F(T,\mathcal{E}) &= -k_BT\tanh(\frac{\gamma}{2k_BT})\ \frac{\partial}{\partial\mathcal{E}}\frac{\gamma}{2k_BT}\bigg|_{\mathcal{E}=0} = -\tanh(\frac{\gamma}{2k_BT})\frac{\mathcal{E}d^2}{2\gamma}\bigg|_{\mathcal{E}=0} = 0 \\
\frac{\partial^2}{\partial\mathcal{E}^2}\bigg|_{\mathcal{E}=0} F(T,\mathcal{E}) &= -\frac{1}{\cosh^2(\frac{\gamma}{2k_BT})}\frac{\mathcal{E}d^2}{2\gamma}\ \frac{\partial}{\partial\mathcal{E}}\frac{\gamma}{2k_BT} - \tanh(\frac{\gamma}{2k_BT})\frac{d^2 2\gamma - \mathcal{E}d^2 2\frac{\mathcal{E}d^2}{\gamma}}{4\gamma^2}\bigg|_{\mathcal{E}=0} \\
&= -\frac{1}{\cosh^2(\frac{\gamma}{2k_BT})}\frac{1}{2k_BT}\left(\frac{\mathcal{E}d^2}{2\gamma}\right)^2 - \tanh(\frac{\gamma}{2k_BT})\frac{d^2(\gamma - \frac{\mathcal{E}^2d^2}{\gamma})}{2\gamma^2}\bigg|_{\mathcal{E}=0} \\
&= -\tanh(\frac{J}{2k_BT})\frac{d^2}{2J} \\
F(T,\mathcal{E}) &= F(T,0) - \tanh(\frac{\beta J}{2})\frac{d^2}{2J}\frac{\mathcal{E}^2}{2} + \mathcal{O}(\mathcal{E}^3)
\end{aligned}$$

(c) Da $\hat{D}$ im Hamiltonoperator nur die Diagonalelemente mit dem selben Vorfaktor wie $\mathcal{E}$ betrifft, können wir auch schreiben $\hat{H}_\lambda(\mathcal{E}) = \hat{H}(\mathcal{E}) + \lambda\hat{D} = \hat{H}(\mathcal{E}-\lambda)$ und für die freie Energie folgt: $F_\lambda(\beta,\mathcal{E}) = F(\beta,\mathcal{E}-\lambda)$. Durch diese Überlegungen können wir mit dem Ergebnis aus b) rasch $\alpha$ berechnen.

$$\begin{aligned}
\langle\hat{D}\rangle_\mathcal{E} &= \frac{\partial}{\partial\lambda}\bigg|_{\lambda=0} F(T,\mathcal{E}-\lambda) = -\frac{\partial}{\partial\mathcal{E}}F(T,\mathcal{E}) = \tanh(\frac{\gamma}{2k_BT})\frac{\mathcal{E}d^2}{2\gamma} \\
\alpha &= \lim_{\mathcal{E}\to 0}\langle\hat{D}\rangle_\mathcal{E}/\mathcal{E} = \lim_{\mathcal{E}\to 0}\tanh(\frac{\beta\gamma}{2})\frac{\mathcal{E}d^2}{2\gamma}\frac{1}{\mathcal{E}} = \tanh(\frac{\beta J}{2})\frac{d^2}{2J}
\end{aligned}$$

## STATISTISCHE PHYSIK 1 - P7

**27.** Der Hamiltonoperator eines Systems bestehend aus zwei unterscheidbaren und wechselwirkenden Spins lautet $\hat{H} = -2J\,\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2$ mit den Spin Vektor-Operatoren $\hat{\vec{S}}_n = (\hat{S}_{xn}, \hat{S}_{yn}, \hat{S}_{zn})$ und

$$\hat{S}_{xn} = \frac{\hbar}{2}\left(|{\uparrow_n}\rangle\langle{\downarrow_n}| + |{\downarrow_n}\rangle\langle{\uparrow_n}|\right),\ \hat{S}_{yn} = \frac{\hbar}{2}\left(-i|{\uparrow_n}\rangle\langle{\downarrow_n}| + i|{\downarrow_n}\rangle\langle{\uparrow_n}|\right),\ \hat{S}_{zn} = \frac{\hbar}{2}\left(|{\uparrow_n}\rangle\langle{\uparrow_n}| - |{\downarrow_n}\rangle\langle{\downarrow_n}|\right).$$

(a) Zeigen Sie, dass der Hamiltonoperator in der Basis $\mathcal{B} = \big(\big(|{\uparrow_1}\rangle|{\downarrow_2}\rangle - |{\downarrow_1}\rangle|{\uparrow_2}\rangle\big)/\sqrt{2}, \big(|{\uparrow_1}\rangle|{\downarrow_2}\rangle + |{\downarrow_1}\rangle|{\uparrow_2}\rangle\big)/\sqrt{2}, |{\uparrow_1}\rangle|{\uparrow_2}\rangle, |{\downarrow_1}\rangle|{\downarrow_2}\rangle\big)$ diagonal ist. Wie heißen die Elemente dieser Basis? Berechnen Sie in dieser Basis die (nicht-normierte) kanonische Dichtematrix $\hat{\rho} = \exp\{-\beta\hat{H}\}$ und verifizieren Sie, dass die kanonische Zustandssumme $Z_\mathrm{K}(\xi)$ durch $3e^{\xi} + e^{-3\xi}$ mit $\xi = \beta\hbar^2 J/2$ gegeben ist.

(b) Finden Sie die Erwartungswerte $\langle\hat{\vec{S}}_1\rangle$, $\langle\hat{\vec{S}}_2\rangle$ und $\langle\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2\rangle$ abhängig von der Temperatur $T$. Zeigen Sie, dass es zwar keine ausgezeichnete Richtung gibt und damit $\langle\hat{\vec{S}}_n\rangle = \vec{0}$, sehr wohl aber eine Korrelation der Richtungen zwischen den Spins $\langle\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2\rangle$, welche gegeben ist durch $\frac{\hbar^2}{4}(3e^{\xi} - 3e^{-3\xi})/Z_\mathrm{K}(\xi)$.

*Lösung:*

(a) Um den gegebenen Hamiltonian explizit anzuschreiben, müssen wir das folgende Skalarprodukt zwischen den Spin Vektor-Operatoren berechnen

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = S_{x1}S_{x2} + S_{y1}S_{y2} + S_{z1}S_{z2}. \tag{1}$$

Für den ersten Term erhalten wir

$$S_{x1}S_{x2} = \frac{\hbar^2}{4}\left(|{\uparrow_1\uparrow_2}\rangle\langle{\downarrow_1\downarrow_2}| + |{\downarrow_1\downarrow_2}\rangle\langle{\uparrow_1\uparrow_2}| + |{\uparrow_1\downarrow_2}\rangle\langle{\downarrow_1\uparrow_2}| + |{\downarrow_1\uparrow_2}\rangle\langle{\uparrow_1\downarrow_2}|\right). \tag{2}$$

Der zweite und dritte Term ergibt sicht zu

$$\begin{aligned} S_{y1}S_{y2} &= \frac{\hbar^2}{4}\left(|{\uparrow_1\downarrow_2}\rangle\langle{\downarrow_1\uparrow_2}| + |{\downarrow_1\uparrow_2}\rangle\langle{\uparrow_1\downarrow_2}| - |{\uparrow_1\uparrow_2}\rangle\langle{\downarrow_1\downarrow_2}| - |{\downarrow_1\downarrow_2}\rangle\langle{\uparrow_1\uparrow_2}|\right), \\ S_{z1}S_{z2} &= \frac{\hbar^2}{4}\left(|{\uparrow_1\uparrow_2}\rangle\langle{\uparrow_1\uparrow_2}| + |{\downarrow_1\downarrow_2}\rangle\langle{\downarrow_1\downarrow_2}| - |{\uparrow_1\downarrow_2}\rangle\langle{\uparrow_1\downarrow_2}| - |{\downarrow_1\uparrow_2}\rangle\langle{\downarrow_1\uparrow_2}|\right). \end{aligned} \tag{3}$$

Insgesamt ist der Hamiltonian also gegeben durch

$$\begin{aligned} H = -\frac{J\hbar^2}{2}\big[&|{\uparrow_1\uparrow_2}\rangle\langle{\uparrow\uparrow}| + |{\downarrow_1\downarrow_2}\rangle\langle{\downarrow_1\downarrow_2}| + 2|{\uparrow_1\downarrow_2}\rangle\langle{\downarrow_1\uparrow_2}| + 2|{\downarrow_1\uparrow_2}\rangle\langle{\uparrow_1\downarrow_2}| \\ &-|{\uparrow_1\downarrow_2}\rangle\langle{\uparrow_1\downarrow_2}| - |{\downarrow_1\uparrow_2}\rangle\langle{\downarrow_1\uparrow_2}|\big]. \end{aligned} \tag{4}$$

*Date*: 13. Juni 2024.

Wir definierien uns nun die in der Angabe gegebenen Basiselemente als

$$\begin{aligned}
|s\rangle &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow_1\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\uparrow_2\rangle\right), \\
|t_1\rangle &\equiv |\uparrow_1\uparrow_2\rangle, \\
|t_0\rangle &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow_1\downarrow_2\rangle + |\downarrow_1\uparrow_2\rangle\right), \\
|t_{-1}\rangle &\equiv |\downarrow_1\downarrow_2\rangle.
\end{aligned} \tag{5}$$

Daraus können wir ablesen, dass

$$\begin{aligned}
|\uparrow_1\downarrow_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|s\rangle + |t_0\rangle\right), \\
|\downarrow_1\uparrow_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|t_0\rangle - |s\rangle\right).
\end{aligned} \tag{6}$$

Der in Gleichung (4) gegebene Hamiltonian kann nun umgeschrieben werden zu

$$\begin{aligned}
H = -\frac{J\hbar^2}{2}\big[&|t_1\rangle\langle t_1| + |t_{-1}\rangle\langle t_{-1}| + |s\rangle\langle t_0| - |s\rangle\langle s| + |t_0\rangle\langle t_0| - |t_0\rangle\langle s| + |t_0\rangle\langle s| + |t_0\rangle\langle t_0| \\
&-|s\rangle\langle s| - |s\rangle\langle t_0| - \frac{1}{2}\left(|s\rangle\langle s| + |t_0\rangle\langle t_0| + |s\rangle\langle t_0| + |t_0\rangle\langle s|\right) \\
&-\frac{1}{2}\left(|s\rangle\langle s| + |t_0\rangle\langle t_0| - |s\rangle\langle t_0| - |t_0\rangle\langle s|\right)\big].
\end{aligned} \tag{7}$$

Man erkennt, dass sich hier die nicht-diagonalen Terme wegkürzen und der Hamiltonian nun in Diagonalform geschrieben werden kann, nämlich

$$H = -\frac{J\hbar^2}{2}\big[-3|s\rangle\langle s| + |t_1\rangle\langle t_1| + |t_0\rangle\langle t_0| + |t_{-1}\rangle\langle t_{-1}|\big]. \tag{8}$$

Aus Gleichung (8) können nun auch leicht die Energien zu den jeweiligen Eigenzuständen abgelesen werden. Man hat

$$E_s = \frac{3J\hbar^2}{2}, \quad \text{für } |s\rangle \tag{9}$$

$$E_t = -\frac{J\hbar^2}{2}, \quad \text{für } |t_1\rangle, |t_0\rangle, |t_{-1}\rangle. \tag{10}$$

Damit ergibt sich für die (nicht normierte) kanonische Dichtematrix

$$\rho = e^{-\beta H} = e^{-\beta E_s}|s\rangle\langle s| + e^{-\beta E_t}\left(|t_1\rangle\langle t_1| + |t_0\rangle\langle t_0| + |t_{-1}\rangle\langle t_{-1}|\right). \tag{11}$$

Für die kanonische Zustandsumme erhalten wir wiederum

$$Z_{\mathrm{K}} = \mathrm{tr}\left(e^{-\beta H}\right) = e^{-\beta E_s} + 3e^{-\beta E_t}. \tag{12}$$

Mit der Abkürzung aus der Angabe erhalten wir schließlich

$$Z_{\mathrm{K}}(\xi) = e^{-3\xi} + 3e^{\xi}. \tag{13}$$

(b) Die Erwartungswerte von $\vec{S}_1$ und $\vec{S}_2$ werden komponentenweise bestimmt. Dazu verwenden wir, dass $\langle A\rangle = \mathrm{tr}\,(A\rho)$, für einen beliebigen Operator $A$. Für $S_{xi}$ ergibt sich (hier wird mit der normierten Dichtematrix $\rho$ gerechnet)

$$\begin{aligned}\langle S_{xn}\rangle &= \frac{1}{Z_{\mathrm{K}}}\,\mathrm{tr}\left(\sum_{i\in\{s,t_1,t_0,t_{-1}\}} p_i|i\rangle\langle i|S_{xn}\right)\\ &= \frac{1}{Z_{\mathrm{K}}}\sum_m \sum_{i\in\{s,t_1,t_0,t_{-1}\}} p_i\langle m|i\rangle\langle i|S_{xn}|m\rangle\\ &= \frac{1}{Z_{\mathrm{K}}}\sum_{i\in\{s,t_1,t_0,t_{-1}\}} p_i\langle i|S_{xn}|i\rangle\\ &= \frac{1}{Z_{\mathrm{K}}}\sum_{i\in\{s,t_1,t_0,t_{-1}\}} p_i\langle S_{xn}\rangle_i,\end{aligned} \tag{14}$$

wobei $n = 1, 2$. Beispielsweise ergibt sich für den Erwartungswert von $S_{x1}$ mit Bezug auf den Zustand $|s\rangle$ folgendes

$$\begin{aligned}\langle S_{x1}\rangle_a &= \frac{1}{2}\left(\langle\uparrow_1\downarrow_2| - \langle\downarrow_1\uparrow_2|\right) S_{x1}\left(|\uparrow_1\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\uparrow_2\rangle\right)\\ &= \frac{1}{2}\left(\langle\uparrow_1\downarrow_2|S_{x1}|\uparrow_1\downarrow_2\rangle + \langle\downarrow_1\uparrow_2|S_{x1}|\downarrow_1\uparrow_2\rangle - \langle\uparrow_1\downarrow_2|S_{x1}|\downarrow_1\uparrow_2\rangle - \langle\downarrow_1\uparrow_2|S_{x1}|\uparrow_1\downarrow_2\rangle\right)\\ &= 0,\end{aligned} \tag{15}$$

wobei benutzt wurde, dass $\langle\uparrow_2|\downarrow_2\rangle = \langle\downarrow_2|\uparrow_2\rangle = 0$. Beachte, dass $S_{x1}$ hier nur eine Kurzschreibweise ist für $S_{x1} \equiv S_x \otimes \mathbb{1}_2$, wobei mit $S_x$ der Spin-$x$ Operator auf ein einzelnes Teilchen gemeint ist (Einteilchenoperator).

Analog zur obigen Rechnung erhält man

$$\langle S_{\alpha n}\rangle_b = \langle S_{\alpha n}\rangle_c = \langle S_{\alpha n}\rangle_d = 0, \quad \text{mit} \quad \alpha = x, y. \tag{16}$$

Daraus folgt zusammen mit Gleichung (14) sofort, dass

$$\langle S_{xn}\rangle = \langle S_{yn}\rangle = 0. \tag{17}$$

Für den Spin Operator in $z$-Richtung erhält man

$$\begin{aligned}\langle S_{zn}\rangle_b &= \frac{\hbar}{2}\\ \langle S_{zn}\rangle_d &= -\frac{\hbar}{2}.\end{aligned} \tag{18}$$

Da jedoch gilt, dass $p_b = p_d = \exp(\xi)$, folgt erneut aus Gleichung (14)

$$\langle S_{zn}\rangle = 0. \tag{19}$$

Insgesamt haben wir also gezeigt, dass

$$\langle\vec{S}_n\rangle = 0. \tag{20}$$

Für den Erwartungswert von $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$ verwenden wir, dass wir in Unterpunkt a) bereits gezeigt haben, dass gilt

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{\hbar^2}{4} \left[ -3|s\rangle\langle s| + |t_1\rangle\langle t_1| + |t_0\rangle\langle t_0| + |t_{-1}\rangle\langle t_{-1}| \right]. \tag{21}$$

Aus Gleichung (14) ergibt sich der Erwartungswert damit zu

$$\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle = \frac{1}{Z_{\mathrm{K}}} \frac{\hbar^2}{4} \left[ 3e^{\xi} - 3e^{-3\xi} \right]. \tag{22}$$

## 28 Hubbard Modell – Computeraufgabe

Wir erweitern das Tight-Binding Modell um ein Elektron. Um die Ununterscheidbarkeit und den Spin-Freiheitsgrad der beiden Elektronen zu berücksichtigen, schreiben wir nicht den Zustand der einzelnen Elektronen an, sondern geben die Besetzung $n_{i\sigma} \in \{0, 1\}$ der möglichen Zustände an. Die Zahl $n_{i\sigma}$ bezeichnet die Besetzung des $i$-ten Platzes mit einem Elektron mit Spin $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$. Die Zustände eines Systems mit zwei Plätzen werden daher mit $|n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}, n_{2\uparrow}, n_{2\downarrow}\rangle$ bezeichnet. Der Zustand mit einem up-Elektron auf Platz 1 und einem down-Elektron auf Platz 2 lautet zum Beispiel $|1001\rangle$.

Wir betrachten das kanonische Ensemble mit einem up-Elektron und einem down Elektron. Befinden sich ein up-Elektron und ein down-Elektron am selben Platz ergibt sich eine positive elektrostatische Abstoßungsenergie $2U$:

$$\langle 1100|\hat{H}_0|1100\rangle = 2U.$$

Wie im Tight-Binding Modell, wird der kinetische Energiebeitrag $-\hbar^2\nabla^2/2m$ durch den Beitrag $-J/2 < 0$ zwischen jenen Zuständen dargestellt, die sich in genau einem Elektron und einem Platz, nicht aber im Spin unterscheiden:

$$\langle 1001|\hat{H}_0|1100\rangle = -\langle 0110|\hat{H}_0|1100\rangle = -J/2.$$

Die unterschiedlichen Vorzeichen kommen von den fermionischen Antikommutatorrelationen. Die restlichen nicht-verschwindenden Elemente von $\hat{H}_0$ ergeben sich durch Vertauschung der Plätze 1 und 2 sowie durch konjugierte Transposition.

(a) Stellen Sie den Hamiltonoperator $\hat{H}_0$ ohne äußeres elektrisches Feld in der Basis $\mathcal{B} = (|1100\rangle, |1001\rangle, |0110\rangle, |0011\rangle)$ als $4 \times 4$ Matrix dar und identifizieren Sie alle 10 nicht-verschwindenden Elemente von $\hat{H}_0$.

$$|1100\rangle \to \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}, \quad |1001\rangle \to \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}, \quad |0110\rangle \to \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}, \quad |0011\rangle \to \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$$

$$\boxed{\uparrow\downarrow \;|\; \phantom{\uparrow}} \qquad \boxed{\uparrow \;|\; \downarrow} \qquad \boxed{\downarrow \;|\; \uparrow} \qquad \boxed{\phantom{\uparrow} \;|\; \uparrow\downarrow}$$

Definiere: $|1100\rangle := a^\dagger_{1\uparrow} a^\dagger_{1\downarrow}|vac\rangle$, $|1001\rangle := a^\dagger_{1\uparrow} a^\dagger_{2\downarrow}|vac\rangle$,
$|0110\rangle := a^\dagger_{1\downarrow} a^\dagger_{2\uparrow}|vac\rangle$, $|0011\rangle := a^\dagger_{2\uparrow} a^\dagger_{2\downarrow}|vac\rangle$

Mit Vakuumzustand $|vac\rangle$ und $a^\dagger_{is}$ dem Erzeuger für ein Elektron auf Platz $i$ mit Spin $s$.

Für die fermionischen Erzeuger / Vernichter gilt:
$\{a^\dagger_{is}, a^\dagger_{js'}\} = 0 = \{a_{is}, a_{js'}\}$, $\{a_{is}, a^\dagger_{js'}\} = \delta_{ij}\delta_{ss'}$, $a_{is} a^\dagger_{is}|vac\rangle = |vac\rangle$

Kann $\hat{H}_0$ schreiben als Linearkombination von $a^\dagger_{is} a_{js}$, wobei die Vorfaktoren/Matrixelemente durch die Angabe gegeben sind.

Falls sich der Endzustand um einen Platzwechsel oder durch mindestens einen Spinflip vom Anfangszustand unterscheidet, ist der Vorfaktor 0, daher haben wir solche (komplizierteren) Terme garnicht angegeben.

$\langle 1100|\hat{H}_0|1100\rangle = 2U = \langle 0011|\hat{H}_0|0011\rangle$

$$\langle 1001|\hat{H}_0|1100\rangle = -\frac{J}{2}\langle vac|\, a_{2\downarrow} a_{1\uparrow} (a^\dagger_{2\downarrow} a_{1\downarrow}) a^\dagger_{1\uparrow} a^\dagger_{1\downarrow} |vac\rangle =$$

alle anderen Terme aus $\hat{H}_0$ werden im Sandwich 0 (orthonormale Zust.)

$$= (-1)\cdot(-1)\cdot\left(-\frac{J}{2}\right)\langle vac|\,\underbrace{a_{2\downarrow} a^\dagger_{2\downarrow}\underbrace{a_{1\uparrow} a^\dagger_{1\uparrow}\underbrace{a_{1\downarrow} a^\dagger_{1\downarrow}|vac\rangle}_{|vac\rangle}}_{|vac\rangle}}_{|vac\rangle} =$$

$$= -\frac{J}{2}\langle vac|vac\rangle = -\frac{J}{2}$$

$$\langle 0110|\hat{H}_0|1100\rangle = -\frac{J}{2}\langle vac|\, a_{2\uparrow} a_{1\downarrow} (a^\dagger_{2\uparrow} a_{1\uparrow}) a^\dagger_{1\uparrow} a^\dagger_{1\downarrow} |vac\rangle =$$

$$= +\frac{J}{2}\langle vac|\, \cancel{a_{2\uparrow} a^\dagger_{2\uparrow}}\, \cancel{a_{1\downarrow} a^\dagger_{1\downarrow}}\, \cancel{a_{1\uparrow} a^\dagger_{1\uparrow}} |vac\rangle = \frac{J}{2}$$

$$\langle 1001|\hat{H}_0|0011\rangle = \ldots = -\frac{J}{2}, \qquad \langle 0110|\hat{H}_0|0011\rangle = \frac{J}{2}$$

Die restlichen Matrixelemente findet man leicht aus $\hat{H}_0^\dagger = \hat{H}_0$.

$$\hat{H}_0 \longrightarrow \begin{pmatrix} 2U & -J/2 & J/2 & 0 \\ -J/2 & 0 & 0 & -J/2 \\ J/2 & 0 & 0 & J/2 \\ 0 & -J/2 & J/2 & 2U \end{pmatrix}$$

Anmerkung: andere Konventionen führen zu umgekehrten Vorzeichen in Zeile / Spalte 4, was die weitere Rechnung nicht ändert. Man kann sich also auch die ganze Arbeit sparen und $\hat{H}_0$ gleich anschreiben.

(b) Finden Sie die Eigenwerte von $\hat{H}_0$ und zeigen Sie, dass die kanonische Zustandssumme $Z_K$ durch $e^{-\beta(U-\gamma)} + 1 + e^{-\beta(2U)} + e^{-\beta(U+\gamma)}$ mit $\gamma^2 = U^2 + J^2$ gegeben ist.

Wolfram Alpha:

Input

eigenvalues $\begin{pmatrix} 2U & -\frac{J}{2} & \frac{J}{2} & 0 \\ -\frac{J}{2} & 0 & 0 & -\frac{J}{2} \\ \frac{J}{2} & 0 & 0 & \frac{J}{2} \\ 0 & -\frac{J}{2} & \frac{J}{2} & 2U \end{pmatrix}$

Results

Enlarge | Data | Customize | Plain Text

$\lambda_1 = 0$

$\lambda_2 = 2U$

$\lambda_3 = U - \underbrace{\sqrt{J^2 + U^2}}_{\gamma}$

$\lambda_4 = \overbrace{\sqrt{J^2 + U^2}}^{\gamma} + U$

Corresponding eigenvectors

Step-by-step solution

$v_1 = (0, 1, 1, 0)$

$v_2 = (-1, 0, 0, 1)$

$v_3 = \left(1, -\frac{-U - \sqrt{J^2+U^2}}{J}, -\frac{U + \sqrt{J^2+U^2}}{J}, 1\right)$

$v_4 = \left(1, -\frac{-U + \sqrt{J^2+U^2}}{J}, -\frac{U - \sqrt{J^2+U^2}}{J}, 1\right)$

Man kann die Eigenwerte auch händisch berechnen, z.B. mittels Ähnlichkeitstransformation / Givens Rotation (siehe 6. Plenum) oder direkt mit dem Laplace'schen Entwicklungssatz für $\det(H_0 - \lambda_i \mathbb{1})$.

$$Z_K = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta \hat{H}_0}\right) = \sum_{|i\rangle \in \{|1100\rangle, |1001\rangle, |0110\rangle, |0011\rangle\}} \langle i | e^{-\beta \hat{H}_0} | i \rangle \underset{\text{Formelsammlung}}{=} \sum_{|i\rangle \in \{\dots\}} \langle i | \sum_{j=1}^{4} e^{-\beta \lambda_j} \underbrace{|v_j\rangle}_{\text{Eigenzust. von } \hat{H}_0 \text{ zu } \lambda_j} \langle v_j | i \rangle =$$

$$= \sum_{j=1}^{4} \underbrace{\sum_{|i\rangle \in \{\dots\}}}_{\text{vollst. Basis}} e^{-\beta \lambda_j} \langle v_j | \underbrace{i \rangle\langle i}_{\mathbb{1}} | v_j \rangle = \sum_{j=1}^{4} e^{-\beta \lambda_j} \underbrace{\cancel{\langle v_j | v_j \rangle}}_{1 \text{ (normiert)}} =$$

$$= 1 + e^{-\beta(2U)} + e^{-\beta(U-\gamma)} + e^{-\beta(U+\gamma)}$$