Musterlösung UE 6

16) $$H = \underbrace{\sum_i \left(-\frac{\hbar^2 \Delta_i}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 |r_i|}\right)}_{H_0} + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{i\neq j} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |r_i - r_j|}}_{H_I}$$

$$\Psi_H = \prod_{i=1}^{N} \varphi_{\alpha_i}(r_i)$$

a) Nichtwechselwirkende Elektronen $\rightarrow$ Gleichungen für φ_{α_i} separieren

Zwei Wasserstoff-artige Probleme mit $Z = 2$

für Wasserstoff-artige Probleme gilt

$$E_n = \frac{Z^2}{n^2} \cdot (1\,R_y = 13{,}6\,eV)$$

Laut Pauli-Verbot kann nur ein Elektron pro Zustand eingefüllt werden $\Rightarrow$ Elektronen in $n=1$ $\sigma=\uparrow$ und $n=1$ $\sigma=\downarrow$ ist Grundzustand

in Hartree-Approximation ohne Wechselwirkung: $E_{ground} \approx -108{,}8\,eV$

b) N Teilchen

$$\Psi_H = \prod_{i=1}^{N} \varphi_{\alpha_i}(r_i)$$

Zeitunabhängige Schrödinger Gleichung:

$$E \cdot \prod_{i=1}^{N} (\varphi_{\alpha_i}(r_i)) = \sum_{j=1}^{N} \left(-\frac{\hbar^2 \Delta_j}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 |r_j|}\right) \prod_{i=1}^{N} (\varphi_{\alpha_i}(r_i)) + \frac{1}{2} \sum_{j\neq l} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |r_j - r_l|} \cdot \prod_{i=1}^{N} \varphi_{\alpha_i}(r_i)$$

Nebenbedingungen:

Orthogonale, normierte φ_{α_i} Herleitung analog zu Skriptum

$$\left(-\frac{\hbar^2 \Delta_i}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 |r_i|} + \sum_{j\neq i} \int \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |r_i - r_j|} \left(\varphi_{\alpha_j}^*(r_j)\varphi_{\alpha_j}(r_j)\right) d^3r_j\right) \varphi_{\alpha_i} = \varepsilon_i \varphi_{\alpha_i}$$

c) $N = 2$

$$\varphi_i = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\beta}{a}\right)^{3/2} e^{-\beta |r_i|/a} \qquad a = \frac{\hbar^2}{me^2} \qquad \left[\text{implizit } \varepsilon_0 = \frac{1}{4\pi}\right]$$

Ein Elektron mit $\sigma=\uparrow$, eines mit $\sigma=\downarrow$, aber mit gleichen Ortswellenfunktionen, Variationsparameter β

$$E(\beta) = \langle \varphi^*(r_1)_\uparrow(\beta) | \langle \varphi^*(r_2)_\downarrow(\beta) | \mathcal{H} | \varphi(r_2)_\downarrow(\beta)\rangle | \varphi(r_1)_\uparrow(\beta)\rangle$$

$$= \int d^3r_1\, d^3r_2 \left(\varphi^*(r_1)\left(-\frac{\Delta\hbar^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|r_1|}\right)\varphi(r_1)\right) \cdot \varphi^*(r_2)\varphi(r_2) + \varphi^*(r_1)\varphi(r_1) \cdot$$

$$\varphi^*(r_2)\left(-\frac{\Delta\hbar^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|r_2|}\right)\varphi(r_2) + \frac{2}{2}\frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \cdot \varphi^*(r_1)\varphi(r_1) \cdot \varphi^*(r_2)\varphi(r_2) =$$

$$2 \cdot \int d^3r\; \varphi^*(r)\left(-\frac{\Delta\hbar^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|r|}\right)\varphi(r) + \int d^3r\, d^3r'\; \varphi^*(r)\varphi(r)\varphi^*(r')\varphi(r') \frac{e^2}{|r - r'|}$$

Einteilchenterm der Energie:

$$E^{(1)}(\beta) = 2\cdot \int d\varphi\, d\theta\, dr\, r^2 \sin\theta\, \frac{1}{\pi}\left(\frac{\beta}{a}\right)^3 e^{-\beta r}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\partial_r(r^2\partial_r) - \frac{2e^2}{r}\right]e^{-\beta r} =$$

$$2\cdot \int dr\, 4r^2 \left(\frac{\beta}{a}\right)^3 \cdot e^{-2\beta r}\cdot\left(\frac{\hbar^2}{2m}\cdot 2\frac{\beta}{r\cancel{a}} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\beta^2}{a^2} - \frac{2e^2}{r}\right) =$$

$$2\cdot \int dr\, -4\left(\frac{\beta}{a}\right)^5 r^2 e^{-2\frac{\beta r}{a}} + 8(\beta-2)\left(\frac{\beta}{a}\right)\frac{r}{a}\cdot e^{-2\frac{\beta r}{a}} = \dots$$

$= 2\cdot\frac{\hbar^2}{2ma^2}(\beta^2 - 4\beta)$ [Wir wissen: Minimum der 1-Teilchen Terme bei exakter, nicht-WW Lösung $= -108{,}8\,eV$] $\rightarrow \beta = 2 \rightarrow$

$$-8\cdot\frac{\hbar^2}{2ma^2} = -\frac{4\hbar^2}{ma^2} = -108{,}8\,eV$$

Zweiteilchenterm der Energie:

$$E^{(2)}(\beta) = \int dr\,dr'\,d\varphi\,d\varphi'\,d\theta\,d\theta'\,r^2 r'^2 \sin\theta\sin\theta'\,\frac{e^2}{|\vec r - \vec r'|}\cdot\frac{1}{\pi^2}\left(\frac{\beta}{a}\right)^6 e^{-\frac{2\beta}{a}r}\,e^{-\frac{2\beta}{a}r'}$$

Im Wesentlichen potentielle Energie, die die Ladungsverteilung $\rho(r) = \frac{1}{\pi}\left(\frac{\beta}{a}\right)^3 e^{-2\frac{\beta r}{a}}\cdot e$ im Potential, das die Ladung $\rho'(r') = \frac{1}{\pi}\left(\frac{\beta}{a}\right)^3 e^{-\frac{2\beta r'}{a}}\cdot e$ erzeugt, hat $\rightarrow$

Potential einer kugelsymmetrischen Ladungsverteilung $\rho(r') \Rightarrow$

$$\Phi(r) = \int_0^r dr'\, 4\pi r'^2 \rho(r')\cdot\frac{1}{r} + \int_r^\infty dr'\, 4\pi r' \rho(r')$$

$$\Phi(r) = 4\pi\cdot\left(-\frac{e^{-\frac{2\beta}{a}r}}{\left(\frac{2\beta}{a}\right)^2} + \frac{2}{\left(\frac{2\beta}{a}\right)^3}\left(1 - e^{-\frac{2\beta}{a}r}\right)\cdot\frac{1}{r}\right)\cdot\left(\frac{\beta}{a}\right)^3\frac{1}{\pi}$$

$$\rightarrow E^{(2)}(\beta) = \int dr\,(4\pi)^2\left(\frac{\beta}{a}\right)^6\frac{1}{\pi^2}e^2\left[\frac{2}{\left(\frac{2\beta}{a}\right)^3} r e^{-\frac{2\beta}{a}r} - \frac{2}{\left(\frac{2\beta}{a}\right)^3} r e^{-\frac{4\beta}{a}r} - \frac{r^2}{\left(\frac{2\beta}{a}\right)^2} e^{-\frac{4\beta}{a}r}\right]$$

$$= \dots = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\cdot\frac{5}{4}\beta$$

Gesamtenergie: $\frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(2\beta^2 - \frac{27}{4}\beta\right)$

$4\beta - \frac{27}{4} = 0 \rightarrow \beta = \frac{27}{16} \rightarrow$ Minimum

$E_{Ges} \sim 77{,}456\,eV$

ziemlich gute Abschätzung

17) $c_\alpha^{(+)}$ ... ON-Basis-Operatoren

$$c_\alpha^\dagger |0\rangle = |0\ldots 0, 1, 0\ldots 0\rangle \hat{=} |\alpha\rangle$$

$$F^{(1)} = \sum_{\alpha\alpha'} f^{(1)}_{\alpha'\alpha} c^\dagger_{\alpha'} c_\alpha \Rightarrow f^{(1)} = \langle \alpha' | f^{(1)} | \alpha \rangle$$

Neue ON-Basis mit Operatoren $\tilde{c}_\beta^{(+)}$

$$\tilde{c}^\dagger_\beta = \sum_\alpha \underbrace{\langle \alpha | \beta \rangle}_{\mathcal{U}_{\alpha\beta}} c^\dagger_\alpha \qquad \tilde{c}_\beta = \sum_\alpha \underbrace{\langle \beta | \alpha \rangle}_{\mathcal{U}^*_{\beta\alpha} = (\mathcal{U}_{\alpha\beta})^*} c_\alpha$$

a) Da $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ ON-Basen bilden, ist Transformationsmatrix $\mathcal{U}$ unitär.

$$\sum_\beta \mathcal{U}_{\alpha\beta} \mathcal{U}^*_{\beta\alpha'} = \delta_{\alpha\alpha'} \qquad c^\dagger_\alpha = \sum_\beta \mathcal{U}^*_{\beta\alpha} \tilde{c}^\dagger_\beta$$

$$c_\alpha = \sum_\beta \mathcal{U}_{\alpha\beta} c_\beta$$

$$F^{(1)} = \sum_{\alpha\alpha'} f^{(1)}_{\alpha'\alpha} \cdot \sum_\beta \mathcal{U}^*_{\beta\alpha'} \tilde{c}^\dagger_\beta \cdot \sum_{\beta'} \mathcal{U}_{\alpha\beta'} \tilde{c}_{\beta'}$$

b) Vertauschungsrelation für $\tilde{c}^{(+)}$:

$$\tilde{c}^\dagger_\beta \tilde{c}^\dagger_{\beta'} = \sum_{\alpha\alpha'} \mathcal{U}_{\alpha\beta} c^\dagger_\alpha \mathcal{U}_{\alpha'\beta'} c^\dagger_{\alpha'} = \sum_{\alpha\alpha'} \mathcal{U}_{\alpha'\beta'} c^\dagger_{\alpha'} \mathcal{U}_{\alpha\beta} c^\dagger_\alpha = \tilde{c}^\dagger_{\beta'} \tilde{c}^\dagger_\beta \checkmark$$

$$\tilde{c}_\beta \tilde{c}_{\beta'} = \sum_{\alpha\alpha'} \mathcal{U}^*_{\beta\alpha} c_\alpha \mathcal{U}^*_{\beta'\alpha'} c_{\alpha'} = \sum_{\alpha\alpha'} \mathcal{U}^*_{\beta'\alpha'} c_{\alpha'} \mathcal{U}^*_{\beta\alpha} c_\alpha = \tilde{c}_{\beta'} \tilde{c}_\beta$$

$$\tilde{c}^\dagger_\beta \tilde{c}_{\beta'} = \sum_{\alpha\alpha'} \mathcal{U}_{\alpha\beta} c^\dagger_\alpha \mathcal{U}^*_{\beta'\alpha'} c_{\alpha'} = \sum_{\alpha\alpha'} (\mathcal{U}^*_{\beta'\alpha'} c_{\alpha'} \mathcal{U}_{\alpha\beta} c^\dagger_\alpha - \mathcal{U}^*_{\beta'\alpha'} \mathcal{U}_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\alpha'})$$

$$= \tilde{c}_{\beta'} \tilde{c}^\dagger_\beta - \delta_{\beta'\beta} \checkmark$$

18) Bosonisches Hubbard-Modell:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} c^\dagger_i c_j + \frac{\mathcal{U}}{2} \sum_i c^\dagger_i c^\dagger_i c_i c_i$$

a) $\mathcal{U} = 0$

$$\tilde{c}^\dagger_k = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_i e^{-ikx} c^\dagger_i \qquad \tilde{c}_k = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_i e^{ikx} c_i$$

$$i = M \hat{=} i = 0 \rightarrow e^{ikMa} = e^0 \rightarrow k \cdot Ma = 2\pi \cdot n$$

$$k_n = \frac{2\pi}{Ma} n$$

$$H = -t\sum_{i=1}^{M} (c^+_{i+1} c_i + c^+_{i-1} c_i) =$$

$$-t\cdot \frac{1}{M} \sum_i \sum_{kk'} \left(e^{ik(i+1)\cdot a} e^{-ik'(i)\cdot a} \tilde{c}^+_k \tilde{c}_{k'} + e^{ik(i-1)\cdot a} e^{-ik'(i)a} \tilde{c}^+_k \tilde{c}_{k'} \right)$$

$$\sum_i e^{i(k-k')(i)a} = M\cdot \delta_{kk'} \Rightarrow$$

$$-t\cdot \sum_k (e^{ika} + e^{-ika}) \tilde{c}^+_k \tilde{c}_k = \sum_k -2t\cos(k\cdot a) \tilde{c}^+_k \tilde{c}_k$$

$M=3$ $\left(k = 0, \frac{2\pi}{3a}, \frac{4\pi}{3a}\right)$, $(-2t\cos(ka) = -2t, t, t)$ $t>0$

(i) ein Boson → Grundzustand : $k=\emptyset$ besetzt, $E=-2t$ $(1,0,0)$

(iii) drei Bosonen → $k=\emptyset$ dreifach besetzt, $E=-6t$ $(3,0,0)$

jeweils nicht entartet.

b) atomarer Limes, unabhängige Orte

$\mathcal{H}_{at} = \frac{U}{2} \sum_i c^+_i c^+_i c_i c_i$, nur unabhängige Orte:

$\frac{U}{2} c^+ c^+ c c$ auf $|n\rangle$ angewandt gibt:

$\left(n\cdot(n-1)\cdot \frac{U}{2}\right)$

$E(n) =$

$n=0$	$E=0$
$n=1$	$E=0$
$n=2$	$E=U$
$n=3$	$E=3U$
$n=4$	$E=6U$

$M=3$ → 3 unabhängige Gitterplätze

(i) ein Boson → irgendwo lokalisiert: $E=0$

entartete Zustände: $\left.\begin{matrix}(1,0,0)\\(0,1,0)\\(0,0,1)\end{matrix}\right\}$ in Ortsbasis!

3-fach entartet

(ii) drei Bosonen: $E=0$ Grundzustand = $(1,1,1)$

c) $$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \alpha^n c^{+(n)} \frac{1}{n!} |0\rangle$$

$$\langle n\rangle = \sum_{n,n'=0}^{\infty} e^{-|\alpha|^2} (\alpha^*)^n \alpha^{n'} \frac{1}{n!} \frac{1}{n'!} \cdot \underbrace{\langle 0| c^{(n')} c^+ c\, c^{+(n)} |0\rangle}_{\sqrt{n!}\cdot n\cdot \sqrt{n'!}\cdot \delta_{nn'}}$$

$$= \sum_n e^{-|\alpha|^2} (|\alpha|^2)^n \cdot \frac{n}{n!} = |\alpha|^2 \cdot \sum_n e^{-|\alpha|^2} |\alpha|^{2n} \frac{1}{n!} = |\alpha|^2$$

$$\langle n^2\rangle = \sum_{n,n'=0}^{\infty} e^{-|\alpha|^2} (\alpha^*)^{n'} \alpha^n \frac{1}{n!}\frac{1}{n'!} \underbrace{\langle 0| c^{(n')} c^\dagger c c^\dagger c c^{\dagger(n)}|0\rangle}_{\sqrt{n!}\cdot n^2 \cdot \sqrt{n'!}\cdot \delta_{nn'}}$$

$$= e^{-|\alpha|^2}\cdot \sum_n (|\alpha|^2)^n \cdot \frac{n^2}{n!} = |\alpha|^2 \cdot \sum e^{-|\alpha|^2}\cdot(|\alpha|^2)^n \cdot \frac{n+1}{n!} =$$

$$|\alpha|^2 \cdot \left(\sum e^{-|\alpha|^2}(|\alpha|^2)^n \cdot \frac{1}{n!} + |\alpha|^2 \cdot \sum e^{-|\alpha|^2}(|\alpha|^2)^n \cdot \frac{1}{n!}\right) =$$

$$|\alpha|^2 \cdot (1+|\alpha|^2) \rightarrow \langle(\Delta n)^2\rangle = \langle n^2\rangle - \langle n\rangle^2 =$$

$$|\alpha|^2 \cdot |\alpha|^2 + |\alpha|^2 - |\alpha|^2 \cdot |\alpha|^2 = |\alpha|^2$$

d) $M=1$ $\quad \tau = 0 \rightarrow |\Psi_1(\tau=0)\rangle = |\alpha\rangle$

Nur WW-Term:

$$\Psi(\tau=0) = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} (\alpha)^n \cdot \underbrace{\frac{1}{n!}\cdot c^{\dagger(n)}|0\rangle}_{\frac{|n\rangle}{\sqrt{n!}}} \qquad E_n = \frac{n\cdot(n-1)\cdot U}{2}$$

$$\Psi(\tau) = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} (\alpha)^n \cdot \frac{|n\rangle}{\sqrt{n!}} \cdot e^{-i\frac{(n)(n-1)U}{2\hbar}\cdot\tau}$$

$\frac{(n)(n-1)}{2}\cdot\left(\frac{U}{\hbar}\tau\right)$ ist für alle n jedenfalls ganzzahliges Vielfaches von $\left(\frac{U\cdot\tau}{\hbar}\right) \rightarrow$ für $\tau = \frac{\hbar}{U}\cdot 2\pi$ sind alle Exponentialfunktionen wieder 1 und der ursprüngliche Zustand wiederhergestellt.

19) 2 mögliche Orbitale mit jeweils 2 Spin-Möglichkeiten $\rightarrow$ 4 Zuständ $\rightarrow 2^4$ Zustände insgesamt

a) 1 0-Teilchen-Zustand mit $E=0$ $= \overset{\varepsilon_1\uparrow\,\varepsilon_1\downarrow\,\varepsilon_2\uparrow\,\varepsilon_2\downarrow}{|0,0,0,0\rangle}$ $\quad S_z, T_z = 0$

4 1-Teilchen-Zustände mit $E = \varepsilon_1/\varepsilon_2$: $|1,0,0,0\rangle$ $|0,1,0,0\rangle$ $T_z = \hbar/2$

$|0,0,1,0\rangle$ $|0,0,0,1\rangle$ $T_z = -\hbar/2$

$S_z = +\hbar/2$ $\quad S_z = -\hbar/2$

6 2-Teilchen-Zustände: $|1,1,0,0\rangle$ $S_z = \emptyset$, $T_z = \hbar$ $E = 2\varepsilon_1 + U + J$

$|0,0,1,1\rangle$ $S_z = \emptyset$, $T_z = -\hbar$ $E = 2\varepsilon_2 + U + J$

$|1,0,1,0\rangle$ $S_z = \hbar$ $T_z = \emptyset$

$|0,1,0,1\rangle$ $S_z = -\hbar$ $T_z = \emptyset$ $\Big\}$ $E = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + U - J$

$\boxed{|1,0,0,1\rangle, |0,1,1,0\rangle \quad S_z = \emptyset \text{ und } T_z = \emptyset}$

4 3-Teilchen Zustände:

$|0,1,1,1\rangle$ $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ $T_z = -\frac{\hbar}{2}$ $E = 2\cdot\varepsilon_2 + \varepsilon_1 + U + J + U + (U-J)$

$|1,0,1,1\rangle$ $S_z = \frac{\hbar}{2}$ $T_z = -\frac{\hbar}{2}$ $E = 2\cdot\varepsilon_2 + \varepsilon_1 + U + J + U + (U-J)$

$|1,1,0,1\rangle$ $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ $T_z = \frac{\hbar}{2}$ $E = 2\cdot\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + U + J + U + (U-J)$

$|1,1,1,0\rangle$ $S_z = \frac{\hbar}{2}$ $T_z = \frac{\hbar}{2}$ $E = 2\cdot\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + U + J + U + (U-J)$

1 4 Teilchen Zustand:

$|1,1,1,1\rangle$ $S_z = 0$, $T_z = 0$ $E = 2\cdot\varepsilon_1 + 2\cdot\varepsilon_2 + 2\cdot U + 2(U+J) + 2(U-J)$

b) $S_z = \frac{\hbar}{2}\sum_\alpha (n_{\alpha\uparrow} - n_{\alpha\downarrow})$ $T_z = \frac{\hbar}{2}\sum_\sigma (n_{1\sigma} - n_{2\sigma})$

Teilchenzahloperatoren vertauschen miteinander →

nur $J\cdot(c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} + c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} c_{2\downarrow})$-Anteil muss kommutiert werden:

$$\rightarrow \left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} - c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} c_{2\downarrow}\right)\left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} + c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} - c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} - c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow}\right) =$$

$$= -c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} c_{2\downarrow} + c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} - c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} + c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} c_{2\downarrow}$$

$$(J, S_z) = \emptyset \rightarrow (J, S_z)^\dagger = (S_z^\dagger, J^\dagger) = (S_z, J) \rightarrow \text{kommutiert}$$

$$J\left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} - c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} c_{2\downarrow}\right)\left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} + c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} - c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} - c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow}\right) =$$

$$\left(-c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} c_{2\downarrow} + c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} - c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} + c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} c_{2\downarrow}\right) = 0 \rightarrow \text{kommutiert}$$

S_z & T_z kommutieren als reine Teilchenzahloperatoren miteinander

$\Rightarrow \exists$ kompatible Eigenbasis

$\rightarrow |1,0,0,1\rangle = c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle$ & $|0,1,1,0\rangle = c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle$

müssen Unterraum aufspannen in dem H diagonalisierbar ist.

$H\,|1,0,0,1\rangle =$

$$(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + U)\,|1,0,0,1\rangle + \delta\, \underbrace{c^\dagger_{1\downarrow} c^\dagger_{2\uparrow} c_{1\uparrow} c_{2\downarrow} c^\dagger_{1\uparrow} c^\dagger_{2\downarrow} |0\rangle}_{-|0\rangle} =$$

$$(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + U)\,|1,0,0,1\rangle - \delta\,|0,1,1,0\rangle$$

$H\,|0,1,1,0\rangle =$

$$(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + U)\,|0,1,1,0\rangle + \delta\, \underbrace{c^\dagger_{1\uparrow} c^\dagger_{2\downarrow} c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} c^\dagger_{1\downarrow} c^\dagger_{2\uparrow} |0\rangle}_{-\delta|0\rangle} = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + U)\,|0,1,1,0\rangle - \delta\,|1,0,0,1\rangle$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + U & -\delta \\ -\delta & \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + U \end{pmatrix}$$ zu diagonalisieren

$$E_{1,2} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + U \pm \delta \qquad \psi_1 = \frac{|1,0,0,1\rangle - |0,1,1,0\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$\psi_2 = \frac{|1,0,0,1\rangle + |0,1,1,0\rangle}{\sqrt{2}}$$