Plenum 5 – Musterlösung

a) Wir benutzen, dass $H = H_{H_2\text{-Molekül}} + H_V$, wobei $H_{H_2\text{-Molekül}}$ auf Vorlesung war.

$$[H, S_z] = [H_V, S_z] = \frac{\hbar}{2} V \sum_i \left[(n_{1\uparrow} + n_{1\downarrow})(n_{2\uparrow} + n_{2\downarrow}), n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \right]$$

wobei $H_V = V(n_{1\uparrow} + n_{1\downarrow})(n_{2\uparrow} + n_{2\downarrow})$

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \sum_i \left(c^+_{i\uparrow} c_{i\uparrow} - c^+_{i\downarrow} c_{i\downarrow} \right) = \frac{\hbar}{2} \sum_i (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})$$

Hier sind nur Besetzungszahl-(dichte) Operatoren involviert.

$$[n_{i\sigma}, n_{j\sigma'}] = ?$$

Falls alle Quantenzahlen gleich sind $(i=j, \sigma=\sigma')$

$$[n_{i\sigma}, n_{i\sigma}] = n_{i\sigma} n_{i\sigma} - n_{i\sigma} n_{i\sigma} = 0$$

Sonnst:

$$[n_{i\sigma}, n_{j\sigma'}] = c^+_{i\sigma} c_{i\sigma} c^+_{j\sigma'} c_{j\sigma'} - c^+_{j\sigma'} c_{j\sigma'} c^+_{i\sigma} c_{i\sigma} =$$
$$= (-1)^2 c^+_{j\sigma'} c^+_{i\sigma} c_{i\sigma} c_{j\sigma'} - c^+_{j\sigma'} c_{j\sigma'} c^+_{i\sigma} c_{i\sigma} =$$
$$= (-1)^4 c^+_{j\sigma'} c_{j\sigma'} c^+_{i\sigma} c_{i\sigma} - c^+_{j\sigma'} c_{j\sigma'} c^+_{i\sigma} c_{i\sigma} = 0$$

Daraus folgt:

$$\underline{[H_V, S_z] = 0}$$

$$[H, \vec{S}^2] = ? \qquad \vec{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$$

einfacher:

$$\vec{S}^2 = S_+ S_- - \hbar S_z + S_z^2$$ wobei $$S_+ = \hbar \sum_i c^+_{i\uparrow} c_{i\downarrow}$$ $$S_- = \hbar \sum_i c^+_{i\downarrow} c_{i\uparrow}$$

Zu zeigen bleibt

$$[H_V, S_+ S_-] = 0$$

b) Basis-Zustände die Eigenzustände von S_z sind: (hier $|0\rangle \equiv |vac\rangle$)

↑	↑	$c^+_{1\uparrow} c^+_{2\uparrow} \|0\rangle$	$S_z = \hbar$
↓	↓	$c^+_{1\downarrow} c^+_{2\downarrow} \|0\rangle$	$S_z = -\hbar$
↑	↓	$c^+_{1\uparrow} c^+_{2\downarrow} \|0\rangle$	$S_z = 0$
↑↓	—	$c^+_{1\uparrow} c^+_{1\downarrow} \|0\rangle$	$S_z = 0$
—	↑↓	$c^+_{2\uparrow} c^+_{2\downarrow} \|0\rangle$	$S_z = 0$
↓	↑	$c^+_{1\downarrow} c^+_{2\uparrow} \|0\rangle$	$S_z = 0$

Da $[H, S_z] = 0$ existiert eine gemeinsame Eigenbasis von H und S_z.

Unterraum mit $S_z = \hbar$ ist eindimensional, also $c^+_{1\uparrow} c^+_{2\uparrow} |0\rangle$ muss auch ein Eigenvektor von H sein.

Tatsächlich: $H c^+_{1\uparrow} c^+_{2\uparrow} |0\rangle = \underbrace{2\varepsilon_0 c^+_{1\uparrow} c^+_{2\uparrow} |0\rangle}_{\text{aus Vorlesung}} +$

$$+ H_V c^+_{1\uparrow} c^+_{2\uparrow} |0\rangle$$

$$H_V c^+_{1\uparrow} c^+_{2\uparrow} |0\rangle = V(n_{1\uparrow} + \overset{(-1)^2}{n_{1\downarrow}})(n_{2\uparrow} + n_{2\downarrow}) \overset{(-1)}{c^+_{1\uparrow}} \overset{(-1)}{c^+_{2\uparrow}} |0\rangle =$$

$$= V n_{1\uparrow} (n_{2\uparrow} + n_{2\downarrow}) c^+_{1\uparrow} c^+_{2\uparrow} |0\rangle + V (n_{2\uparrow} + n_{2\downarrow}) c^+_{1\uparrow} c^+_{2\uparrow} \underbrace{n_{1\downarrow} |0\rangle}_{=0} =$$

$$= V n_{1\uparrow} n_{2\uparrow} \underset{(-1)^2}{c^+_{1\uparrow}} c^+_{2\uparrow} |0\rangle + V n_{1\uparrow} c^+_{1\uparrow} c^+_{2\uparrow} \underbrace{n_{2\downarrow} |0\rangle}_{=0} =$$

$$= V n_{1\uparrow} c^+_{1\uparrow} n_{2\uparrow} c^+_{2\uparrow}|0\rangle = V \cdot c^+_{1\uparrow} \underbrace{c_{1\uparrow} c^+_{1\uparrow}}_{1-c^+_{1\uparrow}c_{1\uparrow}} c^+_{2\uparrow} \underbrace{c_{2\uparrow} c^+_{2\uparrow}}_{1-c^+_{2\uparrow}c_{2\uparrow}} |0\rangle$$

$$= V c^+_{1\uparrow}(1-c^+_{1\uparrow}c_{1\uparrow}) c^+_{2\uparrow}(1-c^+_{2\uparrow}\underbrace{c_{2\uparrow})|0\rangle}_{=0} =$$

$$= V c^+_{1\uparrow}(1-c^+_{1\uparrow}c_{1\uparrow})c^+_{2\uparrow}|0\rangle = V c^+_{1\uparrow}c^+_{2\uparrow}|0\rangle - V \underbrace{c^+_{1\uparrow}c^+_{1\uparrow}}_{(c^+_{1\uparrow})^2=0} c_{1\uparrow}c^+_{2\uparrow}|0\rangle =$$

$$= V c^+_{1\uparrow}c^+_{2\uparrow}|0\rangle$$

Also: $H\, c^+_{1\uparrow}c^+_{2\uparrow}|0\rangle = (2\varepsilon_0+V)\, c^+_{1\uparrow}c^+_{2\uparrow}|0\rangle$

Analog: $H\, c^+_{1\downarrow}c^+_{2\downarrow}|0\rangle = (2\varepsilon_0+V)\, c^+_{1\downarrow}c^+_{2\downarrow}|0\rangle$

Unterraum mit $S_z=0$ ist vierdimensional, dann sind die Matrixelemente nicht nur auf Diagonalie.

c) In Unterräume mit $S_z=\pm\hbar$ gibt es nur diagonale Matrixelemente, beide: $(2\varepsilon_0+V)$

$$H = \begin{array}{c} \\ S_z=\hbar \\ S_z=-\hbar \\ S_z=0\left\{\begin{array}{c}\\ \\ \\ \\ \end{array}\right. \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cc} S_z=\hbar & S_z=-\hbar \end{array} \quad \overbrace{\qquad\qquad\qquad}^{S_z=0} \\ \left(\begin{array}{ccc} 2\varepsilon_0+V & 0 & 0\;\;0\;\;0\;\;0 \\ 0 & 2\varepsilon_0+V & 0\;\;0\;\;0\;\;0 \\ \begin{array}{c}0\\0\\0\\0\end{array} & \begin{array}{c}0\\0\\0\\0\end{array} & \left[\quad H_{S_z=0} \quad\right]\end{array}\right) \end{array}$$

Da der Hamiltonoperator sich von der H_2-Molekül aus der Vorlesung nur um ein Term H_V unterscheidet, wir können die schon berechnete Matrixelemente übernehmen (solange wir dieselbe Basis benutzen; Ordnung von Basisvektoren und Ordnung von Operatoren in der Basisvektor-Definitionen ist sehr wichtig!)

$$H_{s_z=0} = \begin{array}{cccc} c^\dagger_{1\uparrow}c^\dagger_{2\downarrow}|0\rangle & c^\dagger_{1\uparrow}c^\dagger_{1\downarrow}|0\rangle & c^\dagger_{2\uparrow}c^\dagger_{2\downarrow}|0\rangle & c^\dagger_{1\downarrow}c^\dagger_{2\uparrow}|0\rangle \\ \left(\begin{array}{c} 2\varepsilon_0 \\ -t \\ -t \\ 0 \end{array}\right. & \begin{array}{c} -t \\ 2\varepsilon_0+U \\ 0 \\ t \end{array} & \begin{array}{c} -t \\ 0 \\ 2\varepsilon_0+U \\ t \end{array} & \left.\begin{array}{c} 0 \\ t \\ t \\ 2\varepsilon_0 \end{array}\right) \end{array} + H_{V\,s_z=0}$$

Um die fehlende Matrixelemente zu finden, wir lassen H_V auf Basiszustände wirken:

$$V(n_{1\uparrow}+n_{1\downarrow})(n_{2\uparrow}+n_{2\downarrow})\,c^\dagger_{1\uparrow}c^\dagger_{1\downarrow}|0\rangle =$$

$$= (-1)^2 V(n_{1\uparrow}+n_{1\downarrow})\,c^\dagger_{1\uparrow}c^\dagger_{1\downarrow}\big(\underbrace{n_{2\uparrow}|0\rangle}_{=0} + \underbrace{n_{2\downarrow}|0\rangle}_{=0}\big) = 0$$

Ähnlich: $H_V\, c^\dagger_{2\uparrow}c^\dagger_{2\downarrow}|0\rangle = 0$

$$V(n_{1\uparrow}+\cancel{n_{1\downarrow}})(\cancel{n_{2\uparrow}}+n_{2\downarrow})\,c^\dagger_{1\uparrow}c^\dagger_{2\downarrow}|0\rangle = V n_{1\uparrow}n_{2\downarrow}\,c^\dagger_{1\uparrow}c^\dagger_{2\downarrow}|0\rangle =$$

$$= (-1)^2 V n_{1\uparrow}c^\dagger_{1\uparrow}\underbrace{n_{2\downarrow}c^\dagger_{2\downarrow}}_{c^\dagger_{2\downarrow}\underbrace{c_{2\downarrow}c^\dagger_{2\downarrow}}_{1-c^\dagger_{2\downarrow}c_{2\downarrow}}}|0\rangle = V\underbrace{n_{1\uparrow}c^\dagger_{1\uparrow}}_{c^\dagger_{1\uparrow}\underbrace{c_{1\uparrow}c^\dagger_{1\uparrow}}_{1-c^\dagger_{1\uparrow}c_{1\uparrow}}}c^\dagger_{2\downarrow}|0\rangle = V c^\dagger_{1\uparrow}c^\dagger_{2\downarrow}|0\rangle$$

und analog:

$$H_V \, c^+_{1\downarrow} c^+_{2\uparrow} |0\rangle = V \, c^+_{1\downarrow} c^+_{2\uparrow} |0\rangle$$

Also H_V hat nur diagonale beiträge, von dennen zwei null sind. Dann:

$$H_{S_z=0} = \begin{pmatrix} 2\varepsilon_0 + V & -t & -t & 0 \\ -t & 2\varepsilon_0 + U & 0 & t \\ -t & 0 & 2\varepsilon_0 + U & t \\ 0 & t & t & 2\varepsilon_0 + V \end{pmatrix}$$

d) Da $[H, \vec{S}^2] = 0$ haben auch H und $\vec{S}^2$ gemeinsame Eigenbasis. Unsere gewählte Eigenbasis ist aber nicht die Eigenbasis von $\vec{S}^2$.

Die Zustände $c^+_{1\uparrow} c^+_{1\downarrow} |0\rangle$ und $c^+_{2\uparrow} c^+_{2\downarrow} |0\rangle$ sind Eigenzustände von $\vec{S}^2$:

$$\vec{S}^2 c^+_{1\uparrow} c^+_{1\downarrow} |0\rangle = (S_+ S_- - \hbar S_z - S_z^2) \, c^+_{1\uparrow} c^+_{1\downarrow} |0\rangle =$$

$$= S_+ S_- \, c^+_{1\uparrow} c^+_{1\downarrow} |0\rangle = \hbar^2 \Big(\sum_i c^+_{i\uparrow} c_{i\downarrow}\Big)\Big(\sum_j c^+_{j\downarrow} \underbrace{c_{j\uparrow}\Big) c^+_{1\uparrow}}_{1 - c^+_{1\uparrow} c_{1\downarrow}} c^+_{1\downarrow} |0\rangle =$$

(für $j=2$: $c_{2\uparrow}|0\rangle = 0$)

$$= \hbar^2 \Big(\sum_i c^+_{i\uparrow} c_{i\downarrow}\Big) \underbrace{c^+_{1\downarrow} c^+_{1\downarrow} |0\rangle}_{(c^+_{1\downarrow})^2 |0\rangle = 0}$$

Analog $\vec{S}^2 c^+_{2\uparrow} c^+_{2\downarrow} |0\rangle = 0$

Also $c^+_{1\uparrow} c^+_{1\downarrow} |0\rangle$ und $c^+_{2\uparrow} c^+_{2\downarrow} |0\rangle$ sind Eigenzustände von $\vec{S}^2$ mit $S=0$

(⇅ —) (— ⇅)

Aus Hinweis:

$$\vec{S}^2|\text{Triplett}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\vec{S}^2(c^+_{1\uparrow}c^+_{2\downarrow} + c^+_{1\downarrow}c^+_{2\uparrow})|0\rangle$$

$\vec{S}^2 = S_+S_- - \hbar S_z - S_z^2$ und $S_z|\text{Triplett}\rangle = 0$, $S_z^2|\text{Triplett}\rangle = 0$

$$\vec{S}^2 c^+_{1\uparrow}c^+_{2\downarrow}|0\rangle = S_+S_- c^+_{1\uparrow}c^+_{2\downarrow}|0\rangle = \hbar^2\left(\sum_i c^+_{i\uparrow}c_{i\downarrow}\right)\left(\sum_j c^+_{j\downarrow}c_{j\uparrow}\right)c^+_{1\uparrow}c^+_{2\downarrow}|0\rangle =$$

$$= \hbar^2\left(\sum_i c^+_{i\uparrow}c_{i\downarrow}\right)c^+_{1\downarrow}\underbrace{c_{1\uparrow}c^+_{1\uparrow}}_{1-c^+_{1\uparrow}c_{1\uparrow}}c^+_{2\downarrow}|0\rangle =$$

nur $j=1$ wird nicht null Beiträge haben.

sonst: $\underbrace{c^+_{2\downarrow}c^+_{2\downarrow}|0\rangle = 0}_{(c^+_{2\downarrow})^2 = 0}$

$$= \hbar^2\left(\sum_i c^+_{i\uparrow}c_{i\downarrow}\right)c^+_{1\downarrow}c^+_{2\downarrow}|0\rangle =$$

$$= \hbar^2\left(c^+_{1\uparrow}\underbrace{c_{1\downarrow}c^+_{1\downarrow}}_{(1-c^+_{1\downarrow}c_{1\downarrow})}c^+_{2\downarrow}|0\rangle + c^+_{2\uparrow}\underbrace{c_{2\downarrow}c^+_{1\downarrow}}_{(-1)}c^+_{2\downarrow}|0\rangle\right) =$$

$$= \hbar^2\left(c^+_{1\uparrow}c^+_{2\downarrow}|0\rangle - \underbrace{c^+_{1\uparrow}c^+_{1\downarrow}c_{1\downarrow}c^+_{2\downarrow}|0\rangle}_{=0} - c^+_{2\uparrow}c^+_{1\downarrow}\underbrace{c_{2\downarrow}c^+_{2\downarrow}}_{(1-c^+_{2\downarrow}c_{2\downarrow})}|0\rangle\right) =$$

$$= \hbar^2\left(c^+_{1\uparrow}c^+_{2\downarrow}|0\rangle - c^+_{2\uparrow}c^+_{1\downarrow}|0\rangle\right) = \hbar^2(c^+_{1\uparrow}c^+_{2\downarrow} + c^+_{1\downarrow}c^+_{2\uparrow})|0\rangle$$

Analog:

$$\vec{S}^2 c^+_{1\downarrow}c^+_{2\uparrow}|0\rangle = S_+S_- c^+_{1\downarrow}c^+_{2\uparrow}|0\rangle = \hbar^2\left(\sum_i c^+_{i\uparrow}c_{i\downarrow}\right)\left(\underbrace{\sum_j c^+_{j\downarrow}c_{j\uparrow}}_{\text{nur } j=2}\right)c^+_{1\downarrow}c^+_{2\uparrow}|0\rangle =$$

$$= \hbar^2\left(\sum_i c^+_{i\uparrow}c_{i\downarrow}\right)c^+_{2\downarrow}\underbrace{c_{2\uparrow}c^+_{1\downarrow}}_{(-1)}\underset{(1-c^+_{2\uparrow}c_{2\uparrow})}{c^+_{2\uparrow}}|0\rangle = -\hbar^2\underbrace{\left(\sum_i c^+_{i\uparrow}c_{i\downarrow}\right)c^+_{2\downarrow}c^+_{1\downarrow}|0\rangle}_{\text{gleich wie oben schon gerechnet}} =$$

$$= -\hbar^2(c^+_{1\uparrow}c_{1\downarrow} + c^+_{2\uparrow}\underbrace{c_{2\downarrow})c^+_{2\downarrow}}_{1-c^+_{2\downarrow}c_{2\downarrow}}c^+_{1\downarrow}|0\rangle = \hbar^2\left(c^+_{1\uparrow}c^+_{2\downarrow}\underbrace{c_{1\downarrow}c^+_{1\downarrow}}_{1-c^+_{1\downarrow}c_{1\downarrow}}|0\rangle + \right.$$

$$\left. - c^+_{2\uparrow}c^+_{1\downarrow}|0\rangle\right) = \hbar^2(c^+_{1\uparrow}c^+_{2\downarrow} + c^+_{1\downarrow}c^+_{2\uparrow})|0\rangle$$

Zusammengesetzt:

$$\vec{S}^2|\text{Triplett}\rangle = 2\hbar^2\frac{1}{\sqrt{2}}(c^+_{1\uparrow}c^+_{2\downarrow} + c^+_{1\downarrow}c^+_{2\uparrow})|0\rangle = \underbrace{2}_{}\hbar^2|\text{Triplett}\rangle$$

$s(s+1) \Rightarrow$ Quantenzahl $\underline{s = 1}$

$H\,|\text{Triplett}\rangle = ?$

Aus Vorlesung (oder Skriptum): $H_{H_2\text{-Molekül}}\,|\text{Triplett}\rangle = 2\varepsilon_0\,|\text{Triplett}\rangle$

$H = H_{H_2\text{-Molekül}} + H_V$

$$H_V \frac{1}{\sqrt{2}}\left(c^\dagger_{1\uparrow}c^\dagger_{2\downarrow} + c^\dagger_{1\downarrow}c^\dagger_{2\uparrow}\right)|0\rangle = \frac{V}{\sqrt{2}}\left(n_{1\uparrow}+n_{1\downarrow}\right)\left(n_{2\uparrow}+n_{2\downarrow}\right)\left(\;\right)|0\rangle =$$

$$= \frac{V}{\sqrt{2}}\left(n_{1\uparrow}+n_{1\downarrow}\right)\left(\underbrace{n_{2\uparrow}c^\dagger_{1\uparrow}c^\dagger_{2\downarrow}}_{=0} + \underbrace{n_{2\downarrow}c^\dagger_{1\uparrow}c^\dagger_{2\downarrow}}_{(-1)^2} + \underbrace{n_{2\uparrow}c^\dagger_{1\downarrow}c^\dagger_{2\uparrow}}_{(-1)^2} + \underbrace{n_{2\downarrow}c^\dagger_{1\downarrow}c^\dagger_{2\uparrow}}_{=0}\right)|0\rangle =$$

$$= \frac{V}{\sqrt{2}}\left(n_{1\uparrow}+n_{1\downarrow}\right)\left(c^\dagger_{1\uparrow}\underbrace{n_{2\downarrow}c^\dagger_{2\downarrow}}_{c^\dagger_{2\downarrow}\underbrace{c_{2\downarrow}c^\dagger_{2\downarrow}}_{1-c^\dagger_{2\downarrow}c_{2\downarrow}}} + c^\dagger_{1\downarrow}\underbrace{n_{2\uparrow}c^\dagger_{2\uparrow}}_{c^\dagger_{2\uparrow}\underbrace{c_{2\uparrow}c^\dagger_{2\uparrow}}_{1-c^\dagger_{2\uparrow}c_{2\uparrow}}}\right)|0\rangle =$$

$$= \frac{V}{\sqrt{2}}\left(n_{1\uparrow}+n_{1\downarrow}\right)\left(\underbrace{c^\dagger_{1\uparrow}c^\dagger_{2\downarrow}}_{=0} + \underbrace{c^\dagger_{1\downarrow}c^\dagger_{2\uparrow}}_{=0}\right)|0\rangle =$$

$$= \frac{V}{\sqrt{2}}\left(\underbrace{n_{1\uparrow}c^\dagger_{1\uparrow}}_{c^\dagger_{1\uparrow}\underbrace{c_{1\uparrow}c^\dagger_{1\uparrow}}_{1-c^\dagger_{1\uparrow}c_{1\uparrow}}}c^\dagger_{2\downarrow} + \underbrace{n_{1\downarrow}c^\dagger_{1\downarrow}}_{c^\dagger_{1\downarrow}\underbrace{c_{1\downarrow}c^\dagger_{1\downarrow}}_{1-c^\dagger_{1\downarrow}c_{1\downarrow}}}c^\dagger_{2\uparrow}\right)|0\rangle = \frac{V}{\sqrt{2}}\left(c^\dagger_{1\uparrow}c^\dagger_{2\downarrow} + c^\dagger_{1\downarrow}c^\dagger_{2\uparrow}\right)|0\rangle$$

$= V\,|\text{Triplett}\rangle$

D. h.

$$H\,|\text{Triplett}\rangle = \left(2\varepsilon_0 + V\right)|\text{Triplett}\rangle$$

Der Zustand in dem Hinweis (Triplett)

$\frac{1}{\sqrt{2}}(c^+_{1\uparrow} c^+_{2\downarrow} + c^+_{1\downarrow} c^+_{2\uparrow})|0\rangle$ ist ein Eigenzustand von H und auch $\vec{S}^2$ (mit Eigenwert $S=1$)

Dann die neue Basis, die auch Eigenbasis von $\vec{S}^2$ ist, hat schon 3 Zustände die ortogonal zueinander sind:

$c^+_{1\uparrow} c^+_{1\downarrow}|0\rangle$ $\quad S=0$

$c^+_{2\uparrow} c^+_{2\downarrow}|0\rangle$ $\quad S=0$

$\frac{1}{\sqrt{2}}(c^+_{1\uparrow} c^+_{2\downarrow} + c^+_{1\downarrow} c^+_{2\uparrow})|0\rangle$ $\quad S=1$ (Triplett)

Der vierte muss orthogonal zu der drei sein, also:

$\frac{1}{\sqrt{2}}(c^+_{1\uparrow} c^+_{2\downarrow} - c^+_{1\downarrow} c^+_{2\uparrow})|0\rangle$ $\quad S=0$ (Singulett)

($\vec{S}^2|\text{Singulett}\rangle = 0$ ist analog wie für $\vec{S}^2|\text{Triplett}\rangle$ zu zeigen)

Da ein Unterraum mit $S_z=0$ und $S=1$ eindimensional ist und

$$H\frac{1}{\sqrt{2}}(c^+_{1\uparrow} c^+_{2\downarrow} + c^+_{1\downarrow} c^+_{2\uparrow})|0\rangle = (2\varepsilon_0+V)\frac{1}{\sqrt{2}}(c^+_{1\uparrow} c^+_{2\downarrow} + c^+_{1\downarrow} c^+_{2\uparrow})|0\rangle,$$

Die Hamilton-Matrix wird nur in dreidimensionalen Unterraum zu diagonalisieren in der neue Basis.

Die neue Matrixelemente, kann man leicht finden aus der alte Matrix:

$$-\left\{\begin{aligned} H\frac{1}{\sqrt{2}}c^+_{1\uparrow} c^+_{2\downarrow}|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(2\varepsilon_0+V)c^+_{1\uparrow} c^+_{2\downarrow}|0\rangle - t\, c^+_{1\uparrow} c^+_{1\downarrow}|0\rangle - t\, c^+_{2\uparrow} c^+_{2\downarrow}|0\rangle\right] \\ H\frac{1}{\sqrt{2}}c^+_{1\downarrow} c^+_{2\uparrow}|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[t\, c^+_{1\uparrow} c^+_{1\downarrow}|0\rangle + t\, c^+_{2\uparrow} c^+_{2\downarrow}|0\rangle + (2\varepsilon_0+V)c^+_{1\downarrow} c^+_{2\uparrow}|0\rangle\right] \end{aligned}\right.$$

$$H\frac{1}{\sqrt{2}}(c^+_{1\uparrow} c^+_{2\downarrow} - c^+_{1\downarrow} c^+_{2\uparrow})|0\rangle = -\frac{2}{\sqrt{2}}t\, c^+_{1\uparrow} c^+_{1\downarrow}|0\rangle - \frac{2}{\sqrt{2}}t\, c^+_{2\uparrow} c^+_{2\downarrow}|0\rangle + \frac{2\varepsilon_0+V}{\sqrt{2}}(c^+_{1\uparrow} c^+_{2\downarrow} - c^+_{1\downarrow} c^+_{2\uparrow})|0\rangle$$

In neuer Basis dann:

$$H_{S_z=0} = \begin{array}{cccc} |\text{Triplett}\rangle & c^\dagger_{1\uparrow} c^\dagger_{1\downarrow}|0\rangle & c^\dagger_{2\uparrow} c^\dagger_{2\downarrow}|0\rangle & |\text{Singulett}\rangle \\ \left(\begin{matrix} 2\varepsilon_0+V \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{matrix}\right. & \begin{matrix} 0 \\ 2\varepsilon_0+U \\ 0 \\ -t\sqrt{2} \end{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \\ 2\varepsilon_0+U \\ -t\sqrt{2} \end{matrix} & \left.\begin{matrix} 0 \\ -t\sqrt{2} \\ -t\sqrt{2} \\ 2\varepsilon_0+V \end{matrix}\right) \end{array}$$

$$H_{\substack{S_z=0 \\ S=1}} = \begin{pmatrix} 2\varepsilon_0+U & 0 & -t\sqrt{2} \\ 0 & 2\varepsilon_0+U & -t\sqrt{2} \\ -t\sqrt{2} & -t\sqrt{2} & 2\varepsilon_0+V \end{pmatrix}$$

Wir müssen nur diese 3×3 Matrix diagonalisieren:

$$\begin{vmatrix} 2\varepsilon_0+U-\lambda & 0 & -t\sqrt{2} \\ 0 & 2\varepsilon_0+U-\lambda & -t\sqrt{2} \\ -t\sqrt{2} & -t\sqrt{2} & 2\varepsilon_0+V-\lambda \end{vmatrix} = (2\varepsilon_0+U-\lambda)\left[(2\varepsilon_0+U-\lambda)(2\varepsilon_0+V-\lambda)+ - 4t^2\right] = 0$$

Die Eigenenergien sind dann:

$$E_1 = 2\varepsilon_0 + U$$

$$E_2 = 2\varepsilon_0 + \frac{U+V}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{(U-V)^2+16t^2}$$

$$E_3 = 2\varepsilon_0 + \frac{U+V}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{(U-V)^2+16t^2}$$

Die entsprechende Eigenzustände:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(c^+_{1\uparrow}c^+_{1\downarrow}|0\rangle - c^+_{2\uparrow}c^+_{2\downarrow}|0\rangle\right)$$

$$|\psi_2\rangle = A\begin{pmatrix}\frac{t}{\alpha_1}\\ \frac{t}{\alpha_1}\\ 1\end{pmatrix} = A\left(|\text{Singulett}\rangle + \underbrace{\frac{t}{\alpha_1}\left(c^+_{1\uparrow}c^+_{1\downarrow}|0\rangle + c^+_{2\uparrow}c^+_{2\downarrow}|0\rangle\right)}_{\text{Beimischungen}}\right)$$

Normierung

$$|\psi_3\rangle = A'\begin{pmatrix}1\\1\\ \frac{\alpha_2}{t}\end{pmatrix} = A'\left(\frac{\alpha_2}{t}|\text{Singulett}\rangle + \left(c^+_{1\uparrow}c^+_{1\downarrow}|0\rangle + c^+_{2\uparrow}c^+_{2\downarrow}|0\rangle\right)\right)$$

wobei
$$\alpha_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{U-V}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{(U-V)^2+16t^2}\right)$$
$$\alpha_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{U-V}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{(U-V)^2+16t^2}\right)$$

Der Grundzustand ist, wie im Fall $V=0$,

$|\psi_2\rangle$ mit $E_2 = 2\varepsilon_0 + \frac{U+V}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{(U-V)^2+16t^2}$

(Singulett mit Beimischungen)

Für $t \ll U$ und $V \ll U$:

$$E_2 \cong 2\varepsilon_0 + V - \frac{4t^2}{U-V}, \quad \alpha_1 \approx \frac{1}{\sqrt{2}}\left(U-V+\frac{4t^2}{U-V}\right)$$
$$\alpha_2 \approx \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{-4t^2}{U-V}\right)$$

$$|\psi_2\rangle \cong A\left(|\text{Singulett}\rangle + \frac{t\sqrt{2}}{U-V}\left(c^+_{1\uparrow}c^+_{1\downarrow}|0\rangle + c^+_{2\uparrow}c^+_{2\downarrow}|0\rangle\right)\right)$$

Für $V=0$ bekommt man Vorlesungsergebnisse.