Exakte Grundzustände von verallgemeinerten Hubbard-Modellen

Diplomarbeit

von
Christian Dziurzik

Universität zu Köln
Institut für Theoretische Physik
August 1998

Symbolliste

H	Hamiltonoperator
h_{ij}	lokaler Hamiltonoperator (*Bond*-Hamiltonian)
$\langle ij \rangle$	Nächste-Nachbarn-Punkte i und j
E_0	Grundzustandsenergie
e_0	lokale Grundzustandsenergie
e_i	angeregte, lokale Zustände ($i \in \{1, 2, \dots\}$)
$\lvert\Phi_0\rangle$	Grundzustand
$\lvert\xi_i \xi_j\rangle$	lokaler Zustand
$\lvert\eta\rangle$	„η-pairing"-Zustand
$\lvert\mathrm{F}\rangle$	ferromagnetischer Zustand
$\lvert\mathrm{Para}\rangle$	paramagnetische Zustand
$\lvert\text{Néel}\rangle$	Néelzustand
$\lvert\mathrm{CDW}\rangle$	*Charge-Density-Wave*-Zustand
$\delta_{ij}, \delta_{\sigma\sigma'}$	Kronecker-Symbole
$\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}$	Fermi-Erzeugungsoperator am Gitterpunkt i für Spin σ
$\hat{c}_{i\sigma}$	Fermi-Vernichtungsoperator am Gitterpunkt i für Spin σ
$n_{i\sigma}, \hat{n}_{i\sigma}$	Teilchendichte/Operator am Gitterplatz i mit Spin σ
$n_i, \hat{n}_i$	Teilchendichte/Operator am Gitterplatz i
$\hat{S}^z_i, \hat{S}^{\pm}_i$	Spinoperatoren am Gitterplatz i
$\eta^z, \eta^{\dagger}$	„η-pairing"-Operatoren
$\chi^{\sigma\sigma'}$	Hubbard-Operator

N	Gesamtteilchenzahl
L	Gittergröße
Z	Gitter-Koordinationszahl
D	Raumdimension
t	Hüpf-Amplitude
X	Amplitude des korrelierten Hüpfens
Y	Amplitude des Paarhüpfens
V	Amplitude der Nächst-Nachbar-Wechselwirkung
U	Amplitude der „on-site"-Wechselwirkung
J^z, J^{xy}	Amplituden der anisotrope Spin-Wechselwirkung
μ	chemisches Potential
$\mathfrak{s}, \mathfrak{b}$	Schranken
k	Kopplungskonstante
$\mathcal{B}$	bipartites Gitter
$\mathcal{U}_1, \mathcal{U}_1$	bipartite Untergitter
$\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2$	disjunkte Untergitter
$\psi_{\mathbf{k}n}$	Bloch-Funktion mit Impuls $\mathbf{k}$ und Bandindex n
ϕ_{in}	Wannier-Funktion am Gitterpunkt i und Bandindex n
$u_{\mathbf{k}}$	Modulationsfunktion mit Impuls $\mathbf{k}$
$\mathbf{R}$	Bravais-Gittervektor
$\mathcal{P}, \hat{P}, \hat{Q}$	Projektoren
$K(i,j)$	Paar-Korrelationsfunktion
τ^a	Pauli-Spinmatrix ($a \in \{x, y, z\}$)
$\mathbb{G}, \mathbb{H}, \mathbb{M}, \mathbb{T}$	Matrizen
$\mathfrak{R}$	Menge der reellen Zahlen
$\mathfrak{C}$	Menge der komplexen Zahlen

nN	nächste Nachbarn (nearest neighbours)
nnN	übernächste Nachbarn (next-nearest neighbours)

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

In der Physik der kondensierten Materie ist das Gebiet der korrelierten Teilchen von besonderer Bedeutung. Durch Vielteilchen-Wechselwirkungen wird eine Vielfalt von kollektiven Phänomenen und Erscheinungen erzeugt. Dazu gehört z.B. die Hoch-Temperatur-Supraleitung, der Metall-Isolator-Übergang oder magnetische Eigenschaften, wie Ferromagnetismus oder Antiferromagnetismus. Die theoretische Untersuchung beginnt mit der Aufstellung eines geeigneten Hamiltonians. Dieser ist meist zu komplex, so daß man gezwungen ist, Modelle einzuführen, die nur einer vereinfachten Abbildung der Realität entsprechen. Es ist deshalb erforderlich, möglichst viele exakte Resultate zu bekommen, um zu überprüfen, ob diese Modelle auch mit experimentell gemessenen Daten „übereinstimmen". Zudem können Computersimulationen und Näherungsmethoden an diesen exakten Resultaten getestet werden. Das einfachste Modell wechselwirkender Fermionen ist das sogenannte *Hubbard-Modell*. Es wurde ursprünglich von HUBBARD als Modell für elektronische Korrelationen in schmalen Bändern eingeführt [1]. Trotz seiner Einfachheit gibt es nach mehr als 30 Jahren nur wenige exakte Resultate. Beispielsweise ist es LIEB und WU mittels der *Bethe-Ansatz*-Methode gelungen, dieses Modell in einer Dimension exakt zu lösen [2]. In höheren Dimensionen sind dagegen weiterhin keine exakten Ergebnisse für das Spektrum bekannt. In letzter Zeit wurde ein alternatives Verfahren von BRANDT und GIESEKUS entwickelt [3].

Die Idee besteht im Wesentlichen darin, einen Hamiltonoperator so zu konstruieren, daß ein vorgegebener Zustand zum Grundzustand wird. Damit hat man auch die Möglichkeit, den Einfluß der verschiedenen Wechselwirkungsparameter des Hamiltonians abzuschätzen. Eine Verallgemeinerung dieses Verfahrens wurde von Strack und Vollhardt präsentiert [4, 5]. Ovchinikov benutzte eine andere Methode und verbesserte die bisherigen Resultate [6]. Seine Methode basiert auf dem *Gerschgorin-Theorem*, das eine untere Schranke der Grundzustandsenergie des Hamiltonians liefert und auf diese Weise die obere Schranke, die man aus dem Variations-Prinzip gewinnt, komplementiert. Eine wesentlich einfacheres und einsichtigeres Verfahren, nämlich die *Optimum-Grundzustand-Methode*, wurde von de Boer und Schadschneider benutzt [7]. Diese Methode wurde zuvor von Klümper, Schadschneider und Zittartz erfolgreich auf Spinmodelle angewendet [8]. Dabei wird der lokale Hamiltonoperator diagonalisiert und alle lokalen Zustände, die man für die Konstruktion des globalen Grundzustandes benötigt, zu lokalen Grundzuständen gemacht. Dies führt zur Einschränkungen der Wechselwirkungskonstanten, weshalb das Verfahren nur in Unterräumen des Parameterraumes funktioniert.

In der vorliegenden Arbeit wird diese Methode übernommen, wobei im Vordergrund die lokale Erweiterung des Systems stehen soll. Mittels analytischer Rechnungen wird gezeigt, daß solch eine Erweiterung auch zu besseren Schranken der untersuchten Grundzustände führt. Desweiteren wird auf den Einfluß von Übernächster-Nachbar-Wechselwirkung eingegangen. *Im Hinblick auf die Bedeutung der Kupferoxidebenen für die Hoch-T_c-Supraleitung, werde ich mich bei meinen Berechnungen auf den zweidimensionalen Fall konzentrieren.*

Kapitel 2

Das verallgemeinerte Hubbard-Modell

In der vorliegenden Arbeit werden exakte Grundzustände des *generalisierten Hubbard-Modells* untersucht. In den folgenden Abschnitten wird demzufolge das Modell vorgestellt. Außerdem werden einige bekannte exakte Resultate wiedergegeben.

2.1 Herleitung des Modells

Man betrachte einen Festkörper, der ein wechselwirkendes Teilchensystem aus Gitterionen und Elektronen darstellt. Aufgrund des großen Massenunterschieds zwischen Ionen und Elektronen entkoppeln Ionen- und Elektronen-Bewegung. Dies führt zu einem Hamiltonoperator von beweglichen Elektronen auf einem starren Gitter (*Born-Oppenheimer-Näherung*):

$$H = \sum_{i} h(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ i \neq j}} v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \tag{2.1}$$

wobei $\mathbf{r}_i$ die i-te Position des Elektrons markiert. Der erste Term beinhaltet die kinetische Energie der Elektronen, sowie die Wechselwirkung der Elektronen mit dem Ionengitter:

$$h(\mathbf{r}_i) = -\frac{\hbar^2\nabla_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i). \tag{2.2}$$

Der zweite Term beschreibt die Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen untereinander:

$$v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = -\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \tag{2.3}$$

Fordert man, daß die Gitterionen äquidistant angeordnet sind, so erhält man ein periodisches Gitterpotential, d.h. $U(\mathbf{r}_i + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}_i)$, wobei $\mathbf{R}$ einen Vektor auf dem Bravais-Gitter definiert. Das *Bloch-Theorem* besagt nun, daß die Eigenlösungen der Schrödingergleichung mit dem periodischen Potential modulierte ebene Wellen $\psi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}_i) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_i)u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_i)$, sogenannte *Blochwellen*, sind, wobei die Modulationsfunktion $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_i)$ die gleiche Periodizität wie das Potential zeigt. Dabei durchläuft $\mathbf{k}$ die erste Brillouin-Zone und n definiert den Bandindex. Die Elektronen schmaler Energiebänder, wie z.B. die d-Bänder der Übergangsmetalle und ihrer Oxide[1], besitzen eine geringe Beweglichkeit und ausgeprägte Maxima der Aufenthaltswahrscheinlichkeit an den einzelnen Gitterplätzen. Die Blochwellen sind zur Beschreibung solcher Bandelektronen unbrauchbar. Einen wesentlich besseren Startpunkt stellt die sogenannte *Tight-Binding-Näherung* dar. Das Prinzip dieser Näherung ist in *Abbildung* 2.1 verdeutlicht. Funktionen, die solch ein lokales Verhalten aufweisen, heißen *Wannier-Funktionen*. Man gelangt durch Fourier-Transformation von $\psi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})$ zu diesen Funktionen, d.h. $\phi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i) \propto \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i)\psi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})$. Nun ist es angebracht, die Funktion auf ein s-Band-System zu beschränken (mit Bandindex $n = 1$), da sie mathematisch einfacher zu behandeln ist. Führt man Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ bzw. $\hat{c}_{i\sigma}$ für Elektronen im Wannier-Orbital ϕ mit dem Spin $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ ein, so erhält man schließlich einen Hamiltonian in der Darstellung der zweiten Quantisierung:

$$H = \sum_{ij,\sigma} t_{ij}(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}) + \frac{1}{2}\sum_{\substack{ijkl\\ \sigma\sigma'}} \left(ij\left|\frac{1}{r}\right|kl\right) \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma'}^\dagger \hat{c}_{l\sigma'} \hat{c}_{k\sigma}, \tag{2.4}$$

[1]Die Ausdehnung der d-Schale ist i.a. klein gegenüber dem Gitterabstand, was zu einem schmaleren Energieband führt.

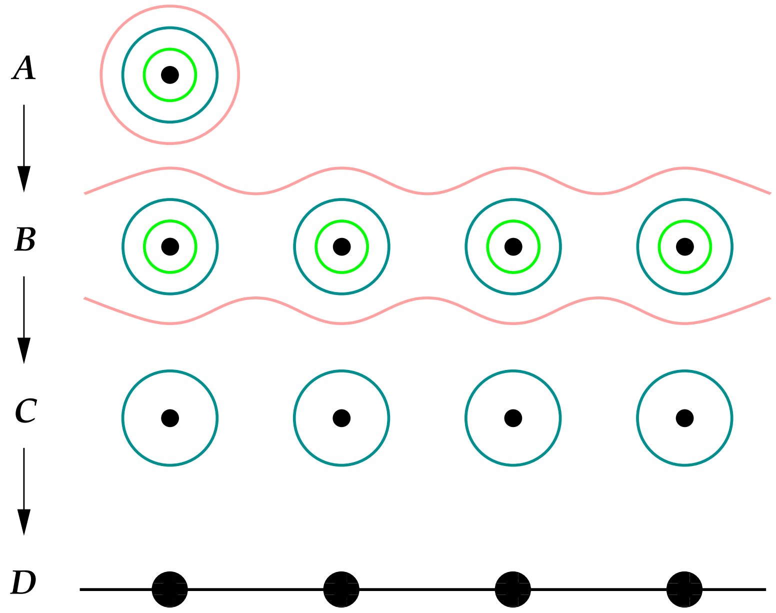


Abbildung 2.1: Eine schematische Darstellung der Tight-Binding-Näherung. *Im ersten Abschnitt (A) sieht man ein einzelnes Atom mit möglichen Orbitalen. Setzt man noch weiter Atome gleichen Typs hinzu (B), so formen diese einen Festkörper. Die Elektronen des äußersten Orbitals können sich von einem Atom zum anderen bewegen (Valenzband), wogegen die Elektronen des darunterliegenden Orbitals eine geringere Wahrscheinlichkeit besitzen zwischen benachbarten Plätzen zu tunneln (hüpfen). Im Teil (C) wird nur noch dieses Orbital betrachtet (Näherung), das man auf einen Gitterpunkt reduziert (D).*

wobei

$$t_{ij} = \int d^3\mathbf{r}\phi^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+U(\mathbf{r})\right)\phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j) \tag{2.5}$$

die Matrixelemente des Einteilchenhamiltonoperators und

$$\left(ij\left|\frac{1}{r}\right|kl\right) = \int d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{r}'\phi^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)\phi^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j)\frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}_k)\phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}_l) \tag{2.6}$$

die Matrixelemente der Elektron-Elektron-Wechselwirkung repräsentieren. Berücksichtigt man nur noch die Nächste-Nachbar-Korrelationen, so lauten die Matrixelemente der Coulomb-Wechselwirkung:

$$\begin{aligned}
U &= \left(ii\left|\frac{1}{r}\right|ii\right) && \text{„on-site"-Wechselwirkung,}\\
V &= \left(ij\left|\frac{1}{r}\right|ij\right) && \text{Nächste-Nachbarn-Wechselwirkung,}\\
X &= \left(ii\left|\frac{1}{r}\right|ij\right) && \text{korreliertes Hüpfen,}\\
Y &= \left(ii\left|\frac{1}{r}\right|jj\right) && \text{Paarhüpfen,}\\
J &= \left(ij\left|\frac{1}{r}\right|ji\right) && \text{Spin-Wechselwirkung.}
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Wegen des geringen Überlapps der um verschiedene Plätze zentrierten atomaren Wellenfunktionen wird das intraatomare Matrixelement $U = (ii\,|1/r|\,ii)$ stark dominieren. HUBBARD berechnete in seiner Arbeit „Electron correlations in narrow energy bands" [1] mit Hilfe atomarer Wellenfunktionen diese Matrixelemente für 3d-Elektronen und erhielt: $U \approx 20\text{eV}$, $V \approx 2 - 3\text{eV}$, $X \approx 1/2\text{eV}$, $Y \approx 1/40\text{eV}$ und $J \approx 1/40\text{eV}$. Aufgrund der vorliegenden Resultate schlug er deshalb vor, die Elektron-Elektron-Wechselwirkung auf das intraatomare Matrixelement U zu beschränken. Der Hamiltonian reduziert sich somit auf das sogenannte *Hubbard-Modell*:

$$H = \sum_{ij,\sigma} t_{ij}(\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{i\sigma}) + \frac{U}{2}\sum_{i,\sigma\sigma'} \hat{n}_{i\sigma}\hat{n}_{i\sigma'}. \tag{2.8}$$

Die Amplitude t_{ij} ist proportional zu der Wahrscheinlichkeit, daß ein Elektron von dem Orbital am Gitterplatz i zu einem Orbital am Gitterplatz j tunnelt, und charakterisiert damit das „Hüpfen" des Teilchens. Üblicherweise berücksichtigt man nur Hüpfen zwischen direkt benachbarten Plätzen, da die Wahrscheinlichkeit für Systeme mit schmalen Energiebändern mit wachsendem Abstand exponentiell gegen Null geht. In diesem Fall ist $t_{ij} = -t$ für nächste Nachbarn und $t_{ij} = 0$ sonst. Die Amplitude liegt dabei in der Größenordnung von $1/5\text{eV}$ bis 2eV. Der zweite Term in (2.8) beschreibt eine Energieerhöhung, wenn ein zweites Elektron mit umgekehrten Spin auf einen schon besetzten Platz springt. Der Operator $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{i\sigma}$ gibt dabei die Anzahl der Elektron am Gitterplatz i mit Spin σ an. Eine wichtige

Eigenschaft des Modells ist also direkt aus dem Hamiltonian ersichtlich, nämlich, daß bei ansteigender Abstoßung ($U > 0$) die Anzahl der doppelt besetzten Plätze verringert wird. Fraglich ist, ob die vernachlässigten Terme V beziehungsweise X, die zwar kleiner als U sind, aber schließlich in der Größenordnung von t liegen, die Vorhersagen des Modells stark ändern. KIVELSON *et al.* bemerkten als erste die Wichtigkeit des korrelierten Hüpfens X bei ihrer theoretischen Untersuchung der Peierls-Instabilität in Polyacetylen [9]. Aber auch CAMPBELL *et al.* [10, 11] und HIRSCH [12] wiesen in ihren Arbeiten auf die Notwendigkeit der zwei Terme V und X für die Stabilität der ferromagnetischen und supraleitenden Phase hin. Außerdem berechneten APPEL *et al.* [13] die Parameter t und X für eine CuO_2-Ebene (im Hinblick auf die Hoch-T_c-Supraleitung) mit dem Resultat, daß der Term X nicht zu vernachlässigen ist. Unabhängig von den schmalen Band-Systemen ergibt die Abschätzung der Wechselwirkungsparameter für Benzol: $U \approx 17\text{eV}$, $V \approx 9\text{eV}$ und $X \approx 3.3\text{eV}$ [14, 15]. Damit ist auch hier eine Berücksichtigung von V und X notwendig. Aber auch die Amplituden J und Y haben einen großen Einfluß auf die Vorhersagen des Modells, was von STRACK *et al.* und DE BOER *et al.* gezeigt wurde [5, 7]. Insgesamt erscheint der Ansatz $H = H(t, U, V, X, J, Y)$ als vernünftig. Dabei kann der J-Operator in Form eines *Heisenberg-Modells* geschrieben werden

$$\begin{aligned}
& J \sum_{\substack{ij\\ \sigma\sigma'}} (\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}^\dagger_{j\sigma'}\hat{c}_{i\sigma'}\hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}^\dagger_{i\sigma'}\hat{c}_{j\sigma'}\hat{c}_{i\sigma}) \\
&= J \sum_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j + \frac{J}{4} \sum_{\substack{ij\\ \sigma\sigma'}} \hat{n}_{i\sigma}\hat{n}_{j\sigma'} \\
&= \frac{J}{2} \sum_{ij} \left(\hat{S}^+_i \hat{S}^-_j + \hat{S}^+_j \hat{S}^-_i \right) + J \sum_{ij} \hat{S}^z_i \hat{S}^z_j + \frac{J}{4} \sum_{\substack{ij\\ \sigma\sigma'}} \hat{n}_{i\sigma}\hat{n}_{j\sigma'},
\end{aligned} \tag{2.9}$$

wobei der $SU(2)$-Spinoperator $\hat{\mathbf{S}}_i$ mit den Komponenten $\hat{S}^a_i$ ($a = x, y, z$) durch $\hat{S}^a_i = 1/2 \sum_{\sigma\sigma'} \hat{c}^\dagger_{i\sigma}\tau^a_{\sigma\sigma'}\hat{c}_{i\sigma'}$ definiert ist. Dabei sind τ^a die *Pauli-Spinmatrizen.* Dadurch ergeben sich die Relationen $\hat{S}^+_i := \hat{S}^x_i + i\hat{S}^y_i = \hat{c}^\dagger_{i\uparrow}\hat{c}_{i\downarrow}$, $\hat{S}^-_i := \left(\hat{S}^+_i\right)^\dagger = \hat{c}^\dagger_{i\downarrow}\hat{c}_{i\uparrow}$ und $\hat{S}^z_i = (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})/2$. Der letzte Term in (2.9) kann aufgrund des zweiten Terms in (2.8) vernachlässigt werden. Bei der Betrachtung einer anisotropen

Spin-Wechselwirkung, z.B. $J^z \neq J^{xy}$, lautet das verallgemeinerte Modell in der großkanonischen Gesamtheit:

$$\boxed{\begin{aligned} H = &- t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{i\sigma}) \\ &+ X \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}^\dagger_{j\sigma}\hat{c}_{i\sigma})(\hat{n}_{i,-\sigma} + \hat{n}_{j,-\sigma}) \\ &+ Y \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{c}^\dagger_{i\uparrow}\hat{c}^\dagger_{i\downarrow}\hat{c}_{j\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{j\uparrow}\hat{c}^\dagger_{j\downarrow}\hat{c}_{i\downarrow}\hat{c}_{i\uparrow}) \\ &+ \frac{J^{xy}}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \left(\hat{S}^+_i \hat{S}^-_j + \hat{S}^+_j \hat{S}^-_i \right) + J^z \sum_{\langle ij \rangle} \hat{S}^z_i \hat{S}^z_j \\ &+ V \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{n}_i - 1)(\hat{n}_j - 1) \\ &+ U \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(\hat{n}_{i\downarrow} - \frac{1}{2}) - \mu \sum_i \hat{n}_i, \end{aligned}} \tag{2.10}$$

wobei $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ der Teilchenzahldichte am Gitterpunkt i entspricht und $\langle ij \rangle$ die Summierung über benachbarte Gitterpunkte darstellt. Dabei wurde nicht $U\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}$ sondern $U(\hat{n}_{i\uparrow} - 1/2)(\hat{n}_{i\downarrow} - 1/2) = U\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow} - U\hat{n}_i/2 + U/4$ betrachtet. Der vorletzte Term renormiert lediglich das chemische Potential μ, wodurch die Äquivalenz beider Ausdrücke wieder hergestellt ist. Für den V-Term gelten entsprechende Überlegungen. Außerdem soll durch diese Formulierungen die *Teilchen-Loch-Symmetrie*[2] hervorgehoben werden.

2.2 Exakte Resultate

Auch 35 Jahre nach der Einführung des Hubbard-Modells gibt es nur wenige exakte Informationen über seine Eigenschaften. In diesem Teil der Arbeit werden einige wichtige Resultate nochmals zusammengefaßt.

[2] Durch die Transformation der Form $\hat{c}_{i\downarrow} \rightarrow \hat{c}^\dagger_{i\downarrow}$ und $\hat{c}^\dagger_{i\downarrow} \rightarrow \hat{c}_{i\downarrow}$, jedoch $\hat{c}_{i\uparrow} \rightarrow \hat{c}_{i\uparrow}$, wird $(\hat{n}_{i\downarrow} - 1/2)$ auf $-(\hat{n}_{i\downarrow} - 1/2)$ abgebildet, wodurch aus einem abstoßenden Potential $U > 0$ ein anziehendes $U < 0$ gebildet wird und umgekehrt.

Das *Mermin-Wagner-Theorem* schließt langreichweitige magnetische Ordnung in einer und zwei Raumdimensionen ($D = 1$ bzw. $D = 2$) für positive Temperaturen ($T > 0$) aus [16, 17], liefert allerdings keinen Aufschluß über die Natur des Grundzustandes bei $T = 0$. Das *Hohenberg-Theorem* [18, 19] schließt, unter denselben Bedingungen wie das Mermin-Wagner-Theorem, Supraleitung mit langreichweitiger Ordnung aus.
Die Grundzustandsenergie des eindimensionalen Hubbard-Modells ist bekannt und wurde 1968, also 5 Jahre nach der Einführung des Modells, von Lieb und Wu mit Hilfe der *Bethe-Ansatz*-Methode bestimmt [2]. Die Ergebnisse zeigen, daß der Grundzustand des halbgefüllten[3] Hubbard-Modells ein Spinsingulett ist ($S_z = 0$), d.h. daß starke antiferromagnetische Tendenzen vorliegen. Außerdem ist der Grundzustand ein Isolator für jedes $U > 0$. Im nicht-halbgefüllten Fall ($n \neq 1$) zeigt der Grundzustand dagegen ein metallisches Verhalten.
Abgesehen von den beiden Grenzfällen $t = 0$ und $U = 0$, sowie eher unphysikalischen Spezialfällen, wie unendlich langreichweitiges Hüpfen der Elektronen, existiert für $D > 1$ keine exakte Lösung des Modells. Eine exakte Aussage kann jedoch über die Beziehung des Hubbard-Modells zum *Heisenberg-Modell* und zum *$t-J$-Modell* gemacht werden [20, 21]. Im ersten Fall läßt sich das Hubbard-Modell in jeder Raumdimension bei halber Bandfüllung und im Limes starker Kopplung ($U/t \to \infty$) auf das antiferromagnetische Heisenberg-Modell abbilden. Leider ist auch hier der Grundzustand nur in einer Dimension bekannt. Im dotierten Fall ($n < 1$) tritt an die Stelle des Heisenberg-Modells das sogenannte $t - J$-Modell, welches zusätzlich zur Austauschwechselwirkung ($J = 2t^2/U$) Hüpfprozesse für die Elektronen unter der Zwangsbedingung zuläßt, daß keine Doppelbesetzungen erzeugt werden. Zwar ist dieses Modell in einer Raumdimension für den sogenannten supersymmetrischen Punkt $2t = \pm J$ mit Hilfe der Bethe-Ansatz-Methode exakt lösbar [22, 23], dennoch ist es unklar, inwiefern man die Ergebnisse auf das mehrdimensionale Problem übertragen darf.
Ein Beispiel dafür, daß das Zusammenspiel aus quantenmechanischer Elektronen-

[3] d.h., daß die Anzahl der Gitterplätze L gleich der Anzahl der Teilchen N ist, und somit $N/L = n = 1$ gilt

bewegung und Coulomb-Abstoßung im Hubbard-Modell in bestimmten Fällen auch für endliches U Ferromagnetismus erzeugen kann, liefert das *Lieb-Theorem* [24]. Das Modell mit $U > 0$ wird dabei auf einem *bipartiten* Gitter[4] $\mathcal{B}$ betrachtet, welches in zwei Untergitter $\mathcal{U}_1$ und $\mathcal{U}_2$ mit $|\mathcal{U}_1| \leq |\mathcal{U}_2|$[5] zerlegbar sei. Die Anzahl der Gitterplätze $|\mathcal{B}|$ sei gerade, und das Gitter sei halb gefüllt. Dann existiert ein nicht-entarteter Grundzustand (abgesehen von der Spinentartung) mit Gesamtspin $S_{\text{tot}} = (|\mathcal{U}_2| - |\mathcal{U}_1|)/2$, wobei $S_{\text{tot}} \leq S_{\text{max}}$[6]. Ist die Kardinalzahl beider Untergitter gleich, wie beispielsweise beim Quadratgitter, ist der Grundzustand folglich ein Spinsingulett. Wenn die Differenz der Kardinalzahlen der Untergitter von derselben Ordnung wie die Systemgröße ist (z.B. $|\mathcal{U}_2| = 2|\mathcal{U}_1|$), so wird der Grundzustand ferromagnetisch. Es handelt sich hierbei nicht um voll polarisierten Ferromagnetismus (d.h. hier ist $S_{\text{tot}} < S_{\text{max}}$), vielmehr besitzen die Spins auf benachbarten Plätzen eine Tendenz zu entgegengesetzter Ausrichtung. Oft wird eine solche magnetische Ordnung daher nicht als Ferromagnetismus, sondern als Ferrimagnetismus bezeichnet. Ein einfaches Beispiel für das Auftreten von Ferrimagnetismus ist das CuO-Gitter. Die Struktur dieses Gitters ist in *Abbildung* 2.2 verdeutlicht. Dabei befinden sich die Sauerstoffionen jeweils in der Mitte zweier Kupferionen. Ein Quadrat der Länge L enthält somit L^2 Kupfer- und $2L^2$ Sauerstoff-Plätze. Der Grundzustand hat bei halber Füllung den Gesamtspin $S = L^2/2 = |\mathcal{B}|/6$.

Zuletzt werde ich noch das im Jahre 1965 aufgestellte *Nagaoka-Theorem* vorstellen [25]. Es handelt sich dabei um den ersten exakten Beweis für die Existenz eines voll polarisierten ferromagnetischen Grundzustandes des Hubbard-Modells. Für $U = \infty$ und bei halber Bandfüllung ($N = |\mathcal{B}|$) befindet sich auf jedem Gitterplatz

[4]Das ist ein Gitter, welches sich in zwei disjunkte Untergitter aufteilen läßt. Dabei soll jeder Platz des ersten Untergitters nur Plätze des zweiten Untergitters als nächste Nachbarn haben und umgekehrt. Ein Quadratgitter ist bipartit, wogegen ein Dreiecksgitter es nicht ist.

[5]Die Größe $|.|$ gibt die Anzahl der Gitterplätze an (Kardinalzahl).

[6]Die Größe S_{max} ist durch

$$S_{\text{max}} = \begin{cases} N/2 & 0 \leq N \leq L \\ L - N/2 & L \leq N \leq 2L \end{cases}$$

definiert. Dabei entspricht L der Gitterzahl und N der Teilchenzahl.

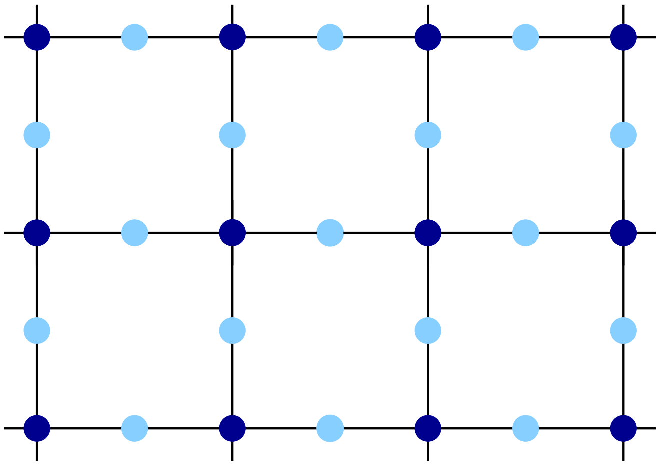


Abbildung 2.2: *Ein Kupferoxid-Gitter. Bei periodischer Fortsetzung enthält das Gitter halb so viele dunkle (Kuper) wie helle (Sauerstoff) Plätze.*

genau ein Elektron. Da die Teilchen nicht miteinander wechselwirken und somit die Orientierung der Spins keinerlei Einfluß auf die Energie des Zustands hat, ist der Grundzustand $2^{|\mathcal{B}|}$-fach entartet. Nagaoka zeigte, daß bei einer Dotierung ($N \neq |\mathcal{B}|$) die Entartung aufgehoben wird. Der Einfluß der Gitterstruktur ist jedoch entscheidend. Man findet z.B. keinen voll polarisierten Ferromagnetismus für das hexagonale oder das kubisch flächenzentrierte Gitter. Eine Verallgemeinerung des Theorems (und darüber hinaus eine wesentliche Vereinfachung des Beweises) wurde 1989 von Tasaki formuliert [26]. Danach ist der *Nagaoka-Zustand* auf allen Gittern, die eine sogenannte *Konnektivitätsbedingung*[7] erfüllen, für $t < 0$ und ein Loch eindeutiger Grundzustand des Hubbard-Modells. Die Beweise von Nagaoka und Tasaki lassen sich jedoch nicht ohne weiteres auf zwei oder mehrere Löcher verallgemeinern. Müller-Hartmann [27] bewies die Existenz eines Nagaoka-Grundzustandes in einem anderen Grenzfall, nämlich für $t < 0$, $U = \infty$ und $n \to 0$ auf einem speziellen, nicht bipartiten Gitter. Es handelt sich hierbei um eine Dreieck-Doppelkette, wie sie auch in *Abbildung* 2.3 zu sehen ist. Der

[7] Die Konnektivitätsbedingung besteht darin, daß es möglich sein muß, ausgehend von einer bestimmten Elektronenkonfiguration durch Bewegung des Lochs alle möglichen Konfigurationen auf dem Gitter zu erzeugen.

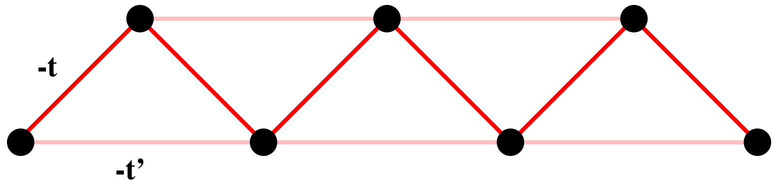


Abbildung 2.3: Eine Dreiecks-Doppelkette mit verschiedenen Hüpfamplituden.

Hamiltonoperator entspricht dem einer linearen *Hubbard-Kette* unter Einschluß von Übernächstnachbarhüpfen mit der Amplitude $t' < -t/4$. Das System weist zwei Bandminima bei nicht äquivalenten **k**-Werten auf, und man kann zeigen, daß bei kleiner Teilchendichte durch die „on-site“-Abstoßung U eine ferromagnetische Austauschkopplung zwischen Teilchen in diesen beiden Minima entsteht. Einen anderen Ansatz findet man in [28]. Darüber hinaus wird dort eine Auswahl an exakten Resultaten des Hubbard-Modells ausführlich diskutiert.

Kapitel 3

Verfahren und Konstruktionen

In dem vorliegenden Abschnitt werden die drei, bereits in der Einleitung erwähnten, Verfahren zur Untersuchung von exakten Grundzuständen vorgestellt. Zudem wird auf allgemeine Konstruktionsprinzipien für Spins und Fermi-Teilchen eingegangen.

3.1 Bestimmung von Grundzuständen

3.1.1 Optimum-Grundzustand-Ansatz

Man betrachte ein Vielteilchensystem auf einem willkürlichen Gitter mit einer homogenen Nächster-Nachbar-Wechselwirkung. Der Hamiltonian kann dadurch in der Form $H = \sum_{\langle ij \rangle} h_{ij}$ dargestellt werden.
Eine additive Konstante im Hamiltonoperator ändert die Physik nicht. Man kann somit für den niedrigsten Eigenwert e_0 von h_{ij} die Energieskala so wählen, daß $e_0 = 0$ gilt. In diesem Fall ist der niedrigste Eigenwert von H größer oder gleich Null ($E_0 \geq 0$), denn die Summe positiv-semidefiniter Operatoren[1] ist ebenfalls positiv-semidefinit. Es sind nun zwei Fälle zu unterscheiden:

[1] Ein hermitischer Operator O heißt positiv-semidefinit, wenn für jedes $|\Phi\rangle$ gilt: $\langle \Phi | O | \Phi \rangle \geq 0$.

1. $E_0 > 0$

   Der Grundzustand des kompletten Systems besteht nicht nur aus lokalen Grundzuständen von h sondern auch aus angeregten lokalen Zuständen. Damit sind keine lokalen Bedingungen für den globalen Grundzustand gegeben und man hat hier ein echtes Vielteilchenproblem vorliegen. Allgemeine Überlegungen sind hier schwierig bis unmöglich.

2. $E_0 = 0$

   In diesem Spezialfall existiert eine lokale Bedingung zum Auffinden des Grundzustandes. Sei $|\Phi_0\rangle$ der Grundzustand des globalen Hamiltonians H und $E_0 = 0$ die entsprechende Grundzustandsenergie. Folglich ist:

   $$0 = \langle\Phi_0|H|\Phi_0\rangle = \sum_{\langle ij\rangle} \langle\Phi_0|h_{ij}|\Phi_0\rangle. \tag{3.1}$$

   Wie schon eben erwähnt, muß jeder Summand $\langle\Phi_0|h_{ij}|\Phi_0\rangle$ verschwinden, da h_{ij} ein positiv-semidefiniter Operator ist. Wird der lokale Hamiltonian durch Projektoren der Form $|\xi_k\rangle\langle\xi_k|$ ausgedrückt, wobei $|\xi_k\rangle$ lokale Eigenzustände repräsentieren, dann erhält man:

   $$0 = \langle\Phi_0|h_{ij}|\Phi_0\rangle = \langle\Phi_0| \left(\sum_k a_k |\xi_k\rangle\langle\xi_k| \right) |\Phi_0\rangle = \sum_k a_k |\langle\Phi_0|\xi_k\rangle|^2. \tag{3.2}$$

   Wegen des positiv-semidefiniten Hamiltonians h_{ij} muß $a_k \geq 0$ sein, so daß für alle k die Schlußfolgerung

   $$a_k = 0 \quad \text{oder} \quad \langle\Phi_0|\xi_k\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad h_{ij}|\Phi_0\rangle = 0 \tag{3.3}$$

   gezogen werden kann.

   Der andere Beweisschritt ist offensichtlich trivial, wodurch man insgesamt

   $$\boxed{\forall\langle ij\rangle : \quad h_{ij}|\Phi_0\rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad H|\Phi_0\rangle = 0} \tag{3.4}$$

   erhält. Das bedeutet, daß der globale Grundzustand aus Grundzuständen des lokalen Hamiltonoperators besteht. In diesem Fall spricht man von *Optimum-Grundzustand*.

Um nun einen Optimum-Grundzustand für ein gegebenes System zu erhalten, sind zwei Schritte zu tun. Zuerst werden die Grundzustände des lokalen Hamiltonoperators bestimmt. Als nächstes muß man sich vergewissern, ob man diese lokalen Grundzustände zu einem globalen Grundzustand kombinieren kann.

3.1.2 Gerschgorin-Theorem

Eine relativ einfache Methode zur Abschätzung von Eigenwerten λ ist durch das sogenannte *Gerschgorin-Theorem* gegeben [29]. Sei $\mathbb{A} \in \mathrm{Mat}(n \times n, \mathfrak{C})$ eine Matrix mit komplexwertigen Einträgen, dann besagt das Theorem, daß die Vereinigung der Umgebungen

$$U_i := \left\{ z \in \mathfrak{C} : |z - a_{ii}| \leq \sum_{j \neq i} |a_{ji}| \right\} \tag{3.5}$$

alle (komplexen) Eigenwerte von $\mathbb{A}$ enthält[2]. Läßt sich die Vereinigung der U_i in disjunkte Vereinigungen $\bigcup_{j=1}^{k} U_{i_j}$ und $\bigcup_{j=k+1}^{n} U_{i_j}$ zerlegen, so enthält erstere k Eigenwerte und die zweite $n-k$ Eigenwerte (entsprechend der Vielfachheit gezählt) von $\mathbb{A}$. In der Physik interessiert man sich für reelle Eigenwerte ($\lambda \in \mathfrak{R}$), da man diese mit Energien gleichsetzt. Eine für die Anwendung in der Quantenmechanik geeignete Formulierung wurde z.B. in [6, 30] betrachtet, und liefert eine untere Schranke für die gesuchte Grundzustandsenergie:

$$\boxed{e_0 \geq \min_i \left\{ \langle \xi_i | h | \xi_i \rangle - \sum_{j \neq i} |\langle \xi_j | h | \xi_i \rangle| \right\}.} \tag{3.6}$$

Diese Aussage läßt sich wie folgt erklären: Angenommen, es existiert ein Eigenwert e_0, der in einem Teil aller Umgebungen enthalten ist, d.h. $e_0 \in \bigcup_{j=1}^{m} U_{i_j} \subset \bigcup_{j=1}^{n} U_{i_j}$. Dann gilt $|e_0 - a_{i_j i_j}| \leq \sum_{k \neq i_j} |a_{k i_j}|$ und somit $|a_{i_j i_j}| - \sum_{k \neq i_j} |a_{k i_j}| \leq e_0$. Man überlegt sich leicht, daß $|a_{i_j i_j}| - \sum_{k \neq i_j} |a_{k i_j}| \leq e_0$ auch für $i_j \in \{m+1, \ldots, n\}$ erfüllt ist. Da man sich aber für die unterste Schranke interessiert, muß über alle

[2] Da $\mathbb{A}$ und die transponierte $\mathbb{A}^T$ dieselben Eigenwerte besitzen, gilt die Aussage entsprechend für die Umgebung $\widetilde{U}_i := \left\{ z \in \mathfrak{C} : |z - a_{ii}| \leq \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \right\}$

Schranken ein Minimum gebildet werden und man erhält die gewünschte Ungleichung. Identifiziert man a_{ij} mit den Matrixelementen des lokalen Hamiltonians, so erhält man schließlich (3.6). Liegt der Eigenwert dagegen in nur einer Umgebung U_i, dann entfällt die Bildung des Minimums. Aus (3.6) folgt sogar Gleichheit, d.h. die Eigenwerte können exakt bestimmt werden, wenn eine symmetrische 2×2-Matrix mit gleichen Diagonaleinträgen vorliegt.

3.1.3 Strack-Vollhardt-Methode

Die allgemeine Idee dieser Methode ist, den Hamiltonian in der Form $H = H_0 + \mathcal{P}^\dagger \mathcal{P}$ darzustellen. Ist nämlich $|\Phi_0\rangle$ der Grundzustand von H_0 und erfüllt der Projektor $\mathcal{P}$ die Bedingung $\mathcal{P}|\Phi_0\rangle = 0$, so ist $|\Phi_0\rangle$ auch der Grundzustand von H.

Ich werde anhand eines Beispiels diese Methode vorstellen. Dazu betrachte man das erweiterte Hubbard-Modell $H = H(t, U, V, X)$ (siehe auch (2.10)), wobei die Terme $U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}$ und $V \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_j$ vorzugsweise gewählt wurden. Für $X = t$ kann der Hamiltonian in der Form

$$\begin{aligned} H =& -2tZL(1-\hat{n}) + (U - 4tZ - VZ) \sum_i \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow} \\ &+ t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_\sigma (\hat{P}^\dagger_{ij\sigma}\hat{P}_{ij\sigma} + \hat{Q}^\dagger_{ij\sigma}\hat{Q}_{ij\sigma}) + \frac{V}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \hat{N}_{ij}(\hat{N}_{ij} - 1) \end{aligned} \tag{3.7}$$

geschrieben werden, wobei man $\hat{n} = (\sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma})/L$ und $\hat{N}_{ij} = \sum_\sigma (\hat{n}_{i\sigma} + \hat{n}_{j\sigma})$ setzt. Die Projektoren $\hat{P}$ und $\hat{Q}$ sind durch

$$\begin{aligned} \hat{P}_{ij\sigma} &= (1 - \hat{n}_{i,-\sigma})\hat{c}_{i\sigma} + (1 - \hat{n}_{j,-\sigma})\hat{c}_{j\sigma} \\ \hat{Q}_{ij\sigma} &= \hat{n}_{i,-\sigma}\hat{c}_{i\sigma} + \hat{n}_{j,-\sigma}\hat{c}_{j\sigma} \end{aligned} \tag{3.8}$$

definiert. Die Umformulierung des Hamiltonians ist dabei durch reines Raten der Projektoren erfolgt, d.h. der Konstruktion liegt kein systematisches Verfahren zu Grunde.

Zunächst leitet man eine untere Schranke für die Energie E_0 her. Die Projektoren $\hat{P}$ und $\hat{Q}$ sind positiv-semidefinit und für einen beliebigen Erwartungswert des Operators $\hat{R} = \sum_{\langle ij \rangle} \hat{N}_{ij}(\hat{N}_{ij} - 1)$ erhält man mit Hilfe der *Schwarzschen-Ungleichung* die Abschätzung $\langle \hat{R} \rangle \geq ZL(2n^2 - n)$. Dabei entspricht n der Teilchendichte. Wenn man zusätzlich $U - (4t + V)Z \geq 0$ fordert, erhält man

$$E_0^{(u)} = -2tZL(1-n) + VZL(n^2 - n/2) \tag{3.9}$$

als untere Schranke für die Grundzustandsenergie. Kann man nun einen exakten Eigenzustand angeben, so ist dessen Eigenwert eine obere Schranke für E_0. Der entsprechende Eigenzustand ist durch

$$|\text{Para}\rangle = \prod_{i \in \mathcal{A}_1} \hat{c}^\dagger_{i\uparrow} \prod_{j \in \mathcal{A}_2} \hat{c}_{j\downarrow} |0\rangle \tag{3.10}$$

gegeben, wobei $\mathcal{A}_1$ und $\mathcal{A}_2$ zwei disjunkte Untergitter des gesamten Gitters darstellen. Der korrespondierende Eigenwert lautet:

$$E_0^{(o)} = VZL/2. \tag{3.11}$$

Für $n = 1$ fallen die Schranken zusammen, so daß die exakte Grundzustandsenergie $E_0 = VZL/2$ ist und $|\text{Para}\rangle$ einen paramagnetischen Grundzustand des Hamiltonians (3.7) beschreibt.

Ein Nachteil dieser Methode ist, daß man zu jedem Grundzustand eine neue Darstellung des Hamiltonians (und damit der Projektoren) finden muß. Dagegen hat man beim Optimum-Grundzustand-Ansatz (kurz: OGS-Ansatz) lediglich den lokalen Hamiltonian einmalig zu diagonalisieren. Zudem kann man den OGS-Ansatz als einen systematischen Weg zum Auffinden der Projektoren $\mathcal{P}$ sehen, da man den lokalen Hamiltonoperator durch $h_{ij} = \sum_a E_a \mathcal{P}^a_{ij}$ darstellen kann, wobei die Projektoren $\mathcal{P}^a_{ij}$ auf die entsprechenden Eigenzustände $|\Phi_a\rangle$ wirken. Drückt man diese Projektoren wieder durch Fermi-Operatoren aus, so gelangt man zu dem Hamiltonian der *Strack-Vollhardt-Methode*. Der Grund, weshalb die Schranken nach dieser Methode i.a. schlechter ausfallen, liegt also daran, daß man die lokalen Eigenzustände nicht richtig „geraten“ hat.

3.2 Konstruktion von Grundzuständen

Das Interesse an der Konstruktion von exakten Grundzuständen für korrelierte Fermi-Systeme als auch Spinsysteme ist groß. Es werden zwei Methoden in diesem Abschnitt vorgestellt. Die Gemeinsamkeit dieser Methoden ist, daß man aus lokalen Eigenzuständen des Hamiltonians $H = \sum_{i,j} h_{ij}$ einen globalen Grundzustand aufbaut.

3.2.1 Eindimensionale Spinsysteme

Für eindimensionale Spinsysteme, wie z.B. Spinketten, wird der *Matrix-Produkt-Ansatz* effektiv angewendet. Die Methode wurde von KLÜMPER *et al.* [31] eingeführt und von LANGE *et al.* [32] auf lokale Hamiltonoperatoren mit Übernächster-Nachbar-Wechselwirkung erweitert.

Bei dem Versuch, den Grundzustand eines vorgegebenen Spin-Hamiltonians zu bestimmen, stößt man im allgemeinen auf einige Schwierigkeiten. Ich werde es am Beispiel der Spin-1/2-Heisenbergkette $H = J\sum_{i=1}^{L} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j$ verdeutlichen. Der klassische antiferromagnetische Zustand (Néelzustand), der in einer Dimension jeweils benachbarte Spins antiparallel ausrichtet ($|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\ldots\rangle$), ist offensichtlich kein Eigenzustand des Heisenberg-Hamiltonoperators. Man kann nämlich den Summanden $\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j$ in der Form $(\hat{S}_i^+\hat{S}_{i+1}^- + \hat{S}_{i+1}^+\hat{S}_i^-)/2 + \hat{S}_i^z\hat{S}_{i+1}^z$ darstellen und wenn nun der erste Term auf den Néelzustand angewendet wird, so klappen an der i-ten respektive $(i+1)$-ten Stelle die Spins um. Der globale Grundzustand läßt sich demnach nicht als einfaches Tensorprodukt lokaler Eigenzustände $|\uparrow\rangle_i \otimes |\downarrow\rangle_{i+1}$ darstellen.

Es stellt sich die Frage, ob sich globale Grundzustände auf eine andere Art aus Eigenzuständen des lokalen Hamiltonians h_{ij} aufbauen lassen. Ein Zugang ist durch den Matrix-Produkt-Ansatz gegeben. Als Beispiel betrachte man ein Spin-1-System[3]. Für jeden Gitterpunkt i ist eine 2×2-Matrix $\mathbb{G}_i$ zu definieren, wobei

[3] da für Spin-1/2 nur triviale Matrix-Produkt-Zustände existieren

die Matrixelemente durch S^z-Zustände $|0\rangle$ und $|\pm\rangle$ beschrieben werden:

$$\mathbb{G}_i = \begin{pmatrix} |a\rangle_i & |b\rangle_i \\ |c\rangle_i & |d\rangle_i \end{pmatrix}. \tag{3.12}$$

Das Produkt zwei solcher beliebiger Matrizen $\mathbb{G}$ und $\overline{\mathbb{G}}$ ist definiert als

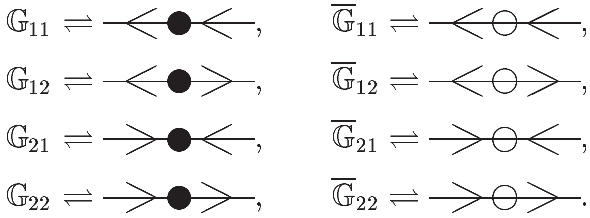
$$\begin{aligned} \mathbb{G} \star \overline{\mathbb{G}} &= \begin{pmatrix} |a\rangle & |b\rangle \\ |c\rangle & |d\rangle \end{pmatrix} \star \begin{pmatrix} |\bar{a}\rangle & |\bar{b}\rangle \\ |\bar{c}\rangle & |\bar{d}\rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} |a\rangle \otimes |\bar{a}\rangle + |b\rangle \otimes |\bar{c}\rangle & |a\rangle \otimes |\bar{b}\rangle + |b\rangle \otimes |\bar{d}\rangle \\ |c\rangle \otimes |\bar{a}\rangle + |d\rangle \otimes |\bar{c}\rangle & |c\rangle \otimes |\bar{b}\rangle + |d\rangle \otimes |\bar{d}\rangle \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{3.13}$$

wobei das Tensorprodukt auf die Matrixelemente angewendet wird. Die Spur eines L-fachen Produktes solcher Matrizen entspricht einem L-Spin-Zustand und kann offensichtlich als Ansatz für den Grundzustand des Systems dienen. Zudem werden durch die Spurbildung periodische Randbedingungen realisiert, denn sie ist invariant unter zyklischer Vertauschung der Matrizen. Folglich ist:

$$\boxed{|\Phi_0\rangle = \mathrm{Spur}(\mathbb{G}_1 \star \mathbb{G}_2 \star \mathbb{G}_3 \star \ldots \star \mathbb{G}_L).} \tag{3.14}$$

Dieser Grundzustand $|\Phi_0\rangle$ wird sogar ein Optimum-Grundzustand des globalen Hamiltonoperators, wenn alle Elemente $\mathbb{G}_i \star \mathbb{G}_{i+1}$ durch den lokalen Hamiltonian $h_{i,i+1}$ vernichtet werden. Handelt es sich aber um einen lokalen Hamiltonian mit Übernächster-Nachbar-Wechselwirkung, so müssen alle Elemente $\mathbb{G}_i \star \mathbb{G}_{i+1} \star \mathbb{G}_{i+2}$ durch den lokalen Hamiltonoperator $h_{i,i+1,i+2}$ vernichtet werden. Bei „inhomogenen Zuständen“ muß das Produkt von zwei verschiedenen Matrizen $\mathbb{G}$ und $\mathbb{H}$ betrachten werden, d.h. man erhält einen optimalen Grundzustand, wenn alle Elemente $\mathbb{G}_i \star \mathbb{H}_{i+1}$ und $\mathbb{H}_i \star \mathbb{G}_{i+1}$ durch den lokalen Hamiltonian vernichtet werden. Außerdem sind bei Systemen mit höheren Spins auch größere Matrizen möglich, die nicht notwendigerweise quadratisch sein müssen [33].

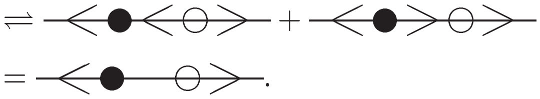
Bevor man diese Methode auf höhere Dimensionen verallgemeinert, ist es hilfreich, zu einem graphischen Analogon überzugehen [33]. Dabei wird eine 2×2-Matrix durch eine Klasse von *Vertices* repräsentiert:



(3.15)

Das Produkt von Matrizen ergibt sich dann durch Summierung über den inneren *Bond*[4], also z.B.

$$(\mathbb{G} \star \overline{\mathbb{G}})_{12} = \mathbb{G}_{11} \otimes \overline{\mathbb{G}}_{12} + \mathbb{G}_{12} \otimes \overline{\mathbb{G}}_{22}$$



(3.16)

Damit sind die Werte der Vertices, im Gegensatz zu den üblichen Vertexmodellen, keine reellen oder komplexen Zahlen, sondern Spin-1-Zustände. Man spricht in diesem Zusammenhang auch vom *Vertex-Zustands-Modell* und es gilt die Regel:

$$\begin{aligned} \textit{Spin-}1\textit{-Zustand} = & \frac{1}{2}\,(\textit{Anzahl der auslaufenden Pfeile} \\ & - \textit{Anzahl der einlaufenden Pfeile}) + \textit{Konstante}. \end{aligned}$$

Dabei kann die Konstante für die $\mathbb{G}$-Vertices eine andere als für die $\overline{\mathbb{G}}$-Vertices sein. Summiert man nun über einen oder mehrere *Bonds*, so haben alle Summanden den gleichen Gesamtspin. Es entstehen also immer Eigenzustände von S^z. Eine Erweiterung auf höhere Dimensionen geschieht nun durch die Betrachtung von Vertices mit mehr als zwei „Beinen“ [34].

3.2.2 Mehrdimensionale Fermi-Systeme

Für höherdimensionale Fermi-Systeme existieren exakte Grundzustände, wie z.B. der Néelzustand oder der ferromagnetische Zustand, die man bereits vielfach untersucht hat [3, 4, 5, 6, 7, 30]. Aus diesem Grund werde ich sie hier nochmals zusammenfassen:

[4] Das ist die Verbindung zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten i und $i+1$.

- Der erste interessante Zustand, der aus dem Tensorprodukt lokaler Zustände gebildet wird, ist der voll-polarisierte ferromagnetische Zustand:

$$|\mathrm{F}\rangle = \prod_{i=1}^{L} \hat{c}^{\dagger}_{i\uparrow}|0\rangle. \tag{3.17}$$

  Dabei geben L die Gittergröße und $|0\rangle$ das Vakuum wieder.

- Der „η-pairing"-Zustand mit Impuls P wird durch den Ausdruck

$$|\eta\rangle = \left(\sum_{j=1}^{L} e^{iPj}\hat{c}^{\dagger}_{j\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{j\uparrow}\right)^{N}|0\rangle \tag{3.18}$$

  beschrieben. Ich werde später genauer auf diesen Zustand, und insbesondere seine Eigenschaften, eingehen.

Die nächsten Zustände sind nur für Halbfüllung ($N = L$) definiert.

- Der paramagnetische Zustand lautet:

$$|\mathrm{Para}\rangle = \prod_{i\in\mathcal{A}_1}\hat{c}^{\dagger}_{i\uparrow}\prod_{i\in\mathcal{A}_2}\hat{c}^{\dagger}_{i\downarrow}|0\rangle. \tag{3.19}$$

  Die Größen $\mathcal{A}_1$ und $\mathcal{A}_2$ beschreiben zwei willkürlich disjunkte Mengen von Gitterpunkten, die zusammen das gesamte Gitter aufspannen.

- Desweiteren haben wir den Néelzustand, der in der Form

$$|\mathrm{N\acute{e}el}\rangle = \prod_{i\in\mathcal{B}_1}\hat{c}^{\dagger}_{i\uparrow}\prod_{i\in\mathcal{B}_2}\hat{c}^{\dagger}_{i\downarrow}|0\rangle \tag{3.20}$$

  gegeben ist, wobei die Größen $\mathcal{B}_1$ und $\mathcal{B}_2$ zwei bipartite Untergitter charakterisieren. Man hat hier also einen Spezialfall des paramagnetischen Zustandes.

- Der nächste Zustand heißt *Charge-Density-Wave*-Zustand und wird durch

$$|\mathrm{CDW}\rangle = \prod_{i\in\mathcal{B}}\hat{c}^{\dagger}_{i\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{i\downarrow}|0\rangle \tag{3.21}$$

  beschrieben. Dieser ist allerdings nur auf einem der bipartiten Untergitter definiert.

Die nun folgenden zwei Aussagen, die kürzlich von ALBEVERIO *et al.* präsentiert wurden [35], bieten die Möglichkeit an, neue Zustände zu konstruieren, wie z.B. spezielle Nagaoka-Zustände oder *Single-Spin-Flip*-Zustände. Seien $|\xi\rangle, |\tilde{\xi}\rangle \in \{|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |2\rangle\}$ lokale Zustände. Die Symbole entsprechen einem leeren Gitterplatz (0), einer Einfachbesetzung ($\uparrow$ oder $\downarrow$) und einer Doppelbesetzung (2), wobei nach dem *Pauli-Prinzip* nur das Paar „$\uparrow\downarrow$ “ möglich ist. Dann gilt:

A.) Wenn $|\xi_i\rangle \otimes |\xi_j\rangle$ und $|\xi_i\rangle \otimes |\tilde{\xi}_j\rangle - |\tilde{\xi}_i\rangle \otimes |\xi_j\rangle$ Eigenzustände des lokalen Hamiltonians h_{ij} sind, und sie denselben kleinsten Eigenwert besitzen, so gilt für den Grundzustand:

$$|\Phi_0^{(A)}\rangle = \sum_{i=1}^{L} (-1)^{i+1} |\xi_1\rangle|\xi_2\rangle \dots |\tilde{\xi}_i\rangle \dots |\xi_L\rangle. \tag{3.22}$$

B.) Wenn $|\xi_i\rangle \otimes |\xi_j\rangle$ und $|\xi_i\rangle \otimes |\tilde{\xi}_j\rangle + |\tilde{\xi}_i\rangle \otimes |\xi_j\rangle$ Eigenzustände von h_{ij} sind, und sie denselben kleinsten Eigenwert besitzen, so gilt für den Grundzustand:

$$|\Phi_0^{(B)}\rangle = \sum_{i=1}^{L} |\xi_1\rangle|\xi_2\rangle \dots |\tilde{\xi}_i\rangle \dots |\xi_L\rangle. \tag{3.23}$$

Für die erste Aussage (für die zweite geht man analog vor) nutzt man den Matrix-Produkt-Ansatz aus. Dazu wird die Matrix

$$\mathbb{G}_i = \begin{pmatrix} |\xi_i\rangle & 0 \\ |\xi_i\rangle - |\tilde{\xi}_i\rangle & -|\xi_i\rangle \end{pmatrix}.$$

definiert. Der Grundzustand $|\Phi_0^{(A)}\rangle$ entspricht allerdings nicht der Spur der Matrix $\mathbb{M} = \prod_i \mathbb{G}_i$, sondern dem Matrixelement $\mathbb{M}_{21}$. Dadurch können nur Systeme mit offenen Randbedingungen betrachtet werden.

Kapitel 4

Bestimmung der exakten Grundzustände

Die Ergebnisse von de Boer *et al.* [7] zeigen die bisher besten Schranken der konstruierten Zustände für ein hyperkubisches Gitter mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung (kurz: *nN*-Wechselwirkung). Ausgehend von dieser Arbeit wird in den folgenden Abschnitten gezeigt, daß eine lokale Systemerweiterung auf drei und vier Gitterpunkte zu einer Vergrößerung des Stabilitätsbereiches führt, jedoch nicht in allen Parameterbereichen. Ferner wird die Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung (kurz: *nnN*-Wechselwirkung) einbezogen und ebenfalls das Verhalten der Schranken untersucht.

4.1 Diagonalisierung

4.1.1 16×16-Matrix

Beim Hamiltonian (2.10), welcher sich in der Form $H = \sum_{\langle ij \rangle} h_{ij}$ darstellen läßt, erfolgt die Summierung über alle *Bonds* $\langle ij \rangle$ eines hyperkubischen Gitters mit L Gitterpunkten. Die Einträge eines lokalen Zustandes werden durch $\xi \in \{0, \uparrow,$

$\downarrow, 2\}$ beschrieben. Durch das Tensorprodukt $|\xi_i \xi_j\rangle = |\xi_i\rangle \otimes |\xi_j\rangle$ entstehen somit insgesamt $4^2 = 16$ lokale Zustände. Da nun nicht alle Zustände Eigenzustände des lokalen Hamiltonians (*Bond*-Hamiltonian) sind, resultiert eine symmetrische 16×16-Matrix, die sich in Blockmatrizen aufteilen läßt:

$X \neq t$		$X = t$	
Anzahl	Größe	Anzahl	Größe
4	1×1	6	1×1
4	2×2	5	2×2
1	4×4		

Bei der Diagonalisierung[1] ist es ausreichend, nur die einzelnen Blockmatrizen in Betracht zu ziehen, da jegliche Einträge außerhalb dieser Matrix gleich Null sind. Die symmetrischen 2×2-Matrizen besitzen gleiche Diagonalelemente d, so daß die Eigenwerte (lokale Energien e) die Form $e = d \pm a$ haben. Die Größe a entspricht den außerdiagonalen Einträgen. Der Fall $X = t$ ist somit besonders einfach, da man mittels des Gerschgorin-Theorems hier die gleichen Resultate erhalten kann. Die 4×4-Blockmatrix $\mathbb{M}_{4\times4}$ kann erst nach einer Transformation der Form $\mathbb{T}^{-1} \star \mathbb{M}_{4\times4} \star \mathbb{T} = \overline{\mathbb{M}}_{4\times4}$ (ich werde im nächsten Abschnitt genauer darauf eingehen) exakt diagonalisiert werden. Die transformierte Matrix

$$\overline{\mathbb{M}}_{4\times4} = \begin{pmatrix} d_1 + a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 + b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_1 - a & c \\ 0 & 0 & c & d_2 - b \end{pmatrix} \tag{4.1}$$

besitzt die „linearen“ Eigenwerte $e_1 = d_1 + a$ und $e_2 = d_2 + b$, sowie die „quadratischen“ $e_{3,4} = \left(d_1 + d_2 - a - b \pm \sqrt{(d_1 - d_2 + b - a)^2 - 4c^2}\right)/2$. Hier kann das Gerschgorin-Theorem aufgrund von $e_{3,4}$ keine exakten Resultate liefern, d.h. hier

[1] darunter verstehe ich die analytische Bestimmung der Nullstellen des charakteristischen Polynoms $p(\lambda) = \det(\mathbb{M} - \lambda\mathbb{E})$

können die Eigenwerte lediglich abgeschätzt werden, wodurch auch schlechtere Grenzen entstehen.

4.1.2 64×64-Matrix

Eine lokale Erweiterung von zwei auf drei Gitterpunkte ist in *Abbildung* 4.1 illustriert. Der globale *Three-Site*-Hamiltonian wird aus 12 Termen gebildet, d.h.

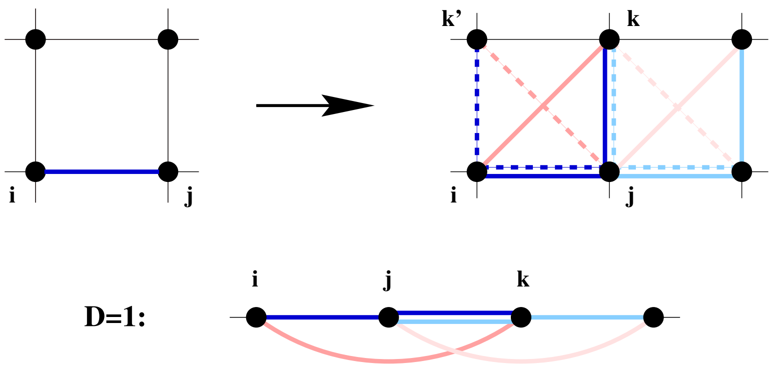


Abbildung 4.1: *Eine* Bond-*Konfiguration auf einem Quadratgitter und einer Kette. Die Gitterpaare* (ij) *und* (jk) *entsprechen den* nN-Bonds, *wogegen* (ik) *den* nnN-Bond *charakterisiert. Entsprechendes gilt für die Konfiguration* (ijk').

$H = H(t_1, V_1, X_1, J_1^z, J_1^{xy}, t_2, V_2, X_2, J_2^z, J_2^{xy}, U, \mu)$. Die einzelnen Terme sind dabei wie in (2.10) definiert. Die Beziehung zum lokalen Hamiltonian ist durch $H = \sum_{[ijk]} h_{ijk}$ gegeben, mit:

$$\boxed{\sum_{[ijk]} h_{ijk} := \frac{1}{F} \sum_{\langle ij \rangle_1} \left(\widetilde{h}_{ij}^{(1)} + O_{ij} \right) + \frac{1}{F} \sum_{\langle jk \rangle_1} \left(\widetilde{h}_{jk}^{(1)} + O_{jk} \right) + \sum_{\langle ik \rangle_2} \widetilde{h}_{ik}^{(2)}.} \tag{4.2}$$

Der Faktor $F := 2(D-1)$, wobei $D > 1$ die Raumdimension bezeichnet, kompensiert lediglich die mehrfach gezählten *nN-Bonds*[2], und $\langle .. \rangle_\alpha$ entspricht der

[2]Mehrfachzählungen führen zu einer Renormierung der Kopplungsparameter. Die Vermeidung von Mehrfachzählung ist wichtig, wenn man Ergebnisse von verschiedenen *Cluster*-Größen vergleichen will. Ein *Cluster* ist ein Teil des ganzen Gitters, wie z.B. ein *Bond*.

Summierung über *nN-Bonds* ($\alpha = 1$) bzw. *nnN-Bonds* ($\alpha = 2$). Für eine Kette, also $D = 1$, ist $F = 2$ zu definieren. Die zwei neuen Operatoren O_{uv} und $\widetilde{h}^{(\alpha)}_{uv}$ sind wie folgt definiert: Der erste Operator O_{uv} beschreibt die (reine) „on-site“-Wechselwirkung und ist durch $O_{uv} = O_u + O_v$ gegeben, wobei z.B. $O_u = U/Z_1(\hat{n}_{u\uparrow} - 1/2)(\hat{n}_{u\downarrow} - 1/2) + \mu/Z_1\hat{n}_u$ ist. Das Paar (uv) charakterisiert hierbei die Gitterpunkte $(ij), (jk)$. Für *nnN-Bonds* wird (uv) durch das Paar (ik) ersetzt. Der zweite Operator $\widetilde{h}^{(\alpha)}_{uv}$ beschreibt *nN*-Wechselwirkungen ($\alpha = 1$) bzw. *nnN*-Wechselwirkungen ($\alpha = 2$) und ist durch die Gleichung

$$\boxed{\begin{aligned}\widetilde{h}^{(\alpha)}_{uv} = &- t_\alpha \sum_\sigma (\hat{c}^\dagger_{u\sigma}\hat{c}_{v\sigma} + \hat{c}^\dagger_{v\sigma}\hat{c}_{u\sigma}) \\ &+ X_\alpha \sum_\sigma (\hat{c}^\dagger_{u\sigma}\hat{c}_{v\sigma} + \hat{c}^\dagger_{v\sigma}\hat{c}_{u\sigma})(\hat{n}_{u,-\sigma} + \hat{n}_{v,-\sigma}) \\ &+ Y_\alpha(\hat{c}^\dagger_{u\uparrow}\hat{c}^\dagger_{u\downarrow}\hat{c}_{v\downarrow}\hat{c}_{v\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{v\uparrow}\hat{c}^\dagger_{v\downarrow}\hat{c}_{u\downarrow}\hat{c}_{u\uparrow}) \\ &+ \frac{J^{xy}_\alpha}{2}(\hat{S}^+_u\hat{S}^-_v + \hat{S}^+_v\hat{S}^-_u) + J^z_\alpha\hat{S}^z_u\hat{S}^z_v \\ &+ V_\alpha(\hat{n}_u - 1)(\hat{n}_v - 1)\end{aligned}} \tag{4.3}$$

gegeben. Der lokale *Three-Site*-Zustand ist ein Tensorprodukt bestehend aus drei Einträgen, d.h. $|\xi_i\xi_j\xi_k\rangle = |\xi_i\rangle \otimes |\xi_j\rangle \otimes |\xi_k\rangle$. Die Zahl der möglichen Zustände ist somit $4^3 = 64$, was auch gleichzeitig die Größe der zu diagonalisierenden Matrix ist. Die Matrix ist symmetrisch und kann in Blockmatrizen unterteilt werden. Die einzelnen Untermatrizen sind für die beiden Fälle $X = t$ und $X \neq t$ in der folgenden Tabelle wiedergegeben. Ferner ist die Anzahl der Matrixtypen zu der entsprechenden Matrixgröße aufgelistet.

$X \neq t$ Anzahl	Größe	$X = t$ Anzahl	Typ a	Typ b	Typ c	Größe
4	1×1	4				1×1
8	3×3	12	8	2	2	3×3
2	9×9	4	2	2		6×6
1	18×18					

Ein von mir geschriebenes *Maple*-Programm zur Diagonalisierung der Untermatrizen lieferte die Erkenntnis, daß alle Matrizen analytisch diagonalisierbar sind[3]. Hieraus kann man folgern, daß die Matrizen durch entsprechende Basistransformationen auf 3×3-Matrizen (oder noch kleiner) reduzierbar sind. Für die größte Untermatrix des 64-dimensionalen Hilbertraumes wurde bisher keine geeignete Basistransformation gefunden, so daß ich mich auf den Fall $X = t$ konzentrieren werde. Dadurch zerfällt die 18×18-Matrix in zwei 3×3-Matrizen und zwei 6×6-Matrizen.

Die eindimensionalen Unterräume werden durch die Eigenzustände $|000\rangle$, $|\sigma\sigma\sigma\rangle$ und $|222\rangle$ gebildet. Die entsprechenden Eigenenergien lauten:

$$e_\xi = \langle \xi\xi\xi | h_{ijk} | \xi\xi\xi \rangle \quad \text{mit} \quad \xi \in \{0, \sigma, 2\}. \tag{4.4}$$

Als nächstes betrachten wir die dreidimensionalen Unterräume. Die ersten Basen $\{|00\sigma\rangle, |0\sigma0\rangle, |\sigma00\rangle\}$, $\{|0\sigma\sigma\rangle, |\sigma0\sigma\rangle, |\sigma\sigma0\rangle\}$, $\{|\sigma\sigma2\rangle, |\sigma2\sigma\rangle, |2\sigma\sigma\rangle\}$, sowie $\{|\sigma22\rangle, |2\sigma2\rangle, |22\sigma\rangle\}$ bilden vier unterschiedliche Matrizen vom Typ

$$\mathbb{M}^{(a)}_{3\times3} = \begin{pmatrix} d_1^{(a)} & -\frac{1}{2}t_1 & -t_2 \\ -\frac{1}{2}t_1 & d_2^{(a)} & -\frac{1}{2}t_1 \\ -t_2 & -\frac{1}{2}t_1 & d_1^{(a)} \end{pmatrix} \tag{4.5}$$

Die Diagonaleinträge $d_1^{(a)}, d_2^{(a)}$ (das gilt natürlich auch für die folgenden Matrizen) sind dabei von der Basiswahl abhängig und können im Anhang nachgeschlagen werden. Die nächsten 3×3-Untermatrizen, die die Form

$$\mathbb{M}^{(b)}_{3\times3} = \begin{pmatrix} d_1^{(b)} & \frac{1}{2}Y_1 & Y_2 \\ \frac{1}{2}Y_1 & d_2^{(b)} & \frac{1}{2}Y_1 \\ Y_2 & \frac{1}{2}Y_1 & d_1^{(b)} \end{pmatrix} \tag{4.6}$$

besitzen, entstehen aus den Basen $\{|002\rangle, |020\rangle, |200\rangle\}$ bzw. $\{|022\rangle, |202\rangle, |220\rangle\}$. Zuletzt betrachte man noch die Basen $\{|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle\}$ bzw. $\{|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle,$

[3]Die Resultate der 18×18-Matrix sind jedoch sehr umfangreich und damit unüberschaubar, was weitere Bearbeitungen unmöglich macht.

$|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle\}$, die eine Untermatrix

$$\mathbb{M}^{(c)}_{3\times 3} = \begin{pmatrix} d_1^{(c)} & \frac{1}{4}J_1^{xy} & \frac{1}{2}J_2^{xy} \\ \frac{1}{4}J_1^{xy} & d_2^{(c)} & \frac{1}{4}J_1^{xy} \\ \frac{1}{2}J_2^{xy} & \frac{1}{4}J_1^{xy} & d_1^{(c)} \end{pmatrix} \tag{4.7}$$

bilden. Durch eine geeignete Transformationsmatrix können diese Matrizen vereinfacht werden, d.h. sie zerfallen in eine 2×2-Matrix und eine 1×1-Matrix. Beispielsweise kann man die Basis $\{|00\sigma\rangle, |0\sigma 0\rangle, |\sigma 00\rangle\}$ durch $|\phi\rangle_1 := |00\sigma\rangle + |\sigma 00\rangle$, $|\phi\rangle_2 := |0\sigma 0\rangle$ und $|\phi\rangle_3 := |00\sigma\rangle - |\sigma 00\rangle$ ersetzen und erhält die neue Basis $\{|\phi\rangle_1, |\phi\rangle_2, |\phi\rangle_3\}$. Die entsprechende orthogonale Transformationsmatrix

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{4.8}$$

liefert durch Anwendung von $\mathbb{T}^{-1}\star\mathbb{M}_{3\times 3}\star\mathbb{T} = \overline{\mathbb{M}}_{3\times 3}$ die gewünschte transformierte Matrix

$$\overline{\mathbb{M}}^{(a)}_{3\times 3} = \begin{pmatrix} d_1^{(a)} - t_2 & -\frac{1}{2}t_1 & 0 \\ -t_1 & d_2^{(a)} & 0 \\ 0 & 0 & d_1^{(a)} + t_2 \end{pmatrix} \tag{4.9}$$

Analog verfährt man mit den anderen 3×3-Blockmatrizen. Die transformierten Matrizen sind zwar nicht mehr symmetrisch, jedoch bleiben die resultierenden Eigenwerte reell. Zu jedem Matrixtyp erhält man jeweils 3 Eigenwerte:

$$\begin{aligned} e_1^{(a)} &= d_1^{(a)} + t_2, \\ e_{2,3}^{(a)} &= \frac{1}{2}\left(d_1^{(a)} + d_2^{(a)} - t_2 \pm \sqrt{\left(d_2^{(a)} - d_1^{(a)} + t_2\right)^2 + 2t_1^2}\right), \end{aligned} \tag{4.10}$$

$$\begin{aligned} e_1^{(b)} &= d_1^{(b)} - Y_2, \\ e_{2,3}^{(b)} &= \frac{1}{2}\left(d_1^{(b)} + d_2^{(b)} + Y_2 \pm \sqrt{\left(d_2^{(b)} - d_1^{(b)} - Y_2\right)^2 + 2Y_1^2}\right), \end{aligned} \tag{4.11}$$

$$
\begin{aligned}
e_1^{(c)} &= d_1^{(c)} - \frac{1}{2} J_2^{xy}, \\
e_{2,3}^{(c)} &= \frac{1}{4}\left(2d_1^{(c)} + 2d_2^{(c)} + J_2^{xy} \pm \sqrt{\left(2d_2^{(c)} - 2d_1^{(c)} - J_2^{xy}\right)^2 + 2(J_1^{xy})^2}\right).
\end{aligned}
\tag{4.12}
$$

Man hat insgesamt zwölf 3×3-Matrizen und somit 36 verschiedene Eigenwerte. Die verbleibenden Hilbert-Unterräume bestehen nun aus vier 6×6-Untermatrizen. Der erste Typ folgt aus den Basen $\{|\downarrow 0 \uparrow\rangle, |\uparrow 0 \downarrow\rangle, |0 \downarrow\uparrow\rangle, |0 \uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow 0\rangle, |\uparrow\downarrow 0\rangle\}$ bzw. $\{|\downarrow 2 \uparrow\rangle, |\uparrow 2 \downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow 2\rangle, |\uparrow\downarrow 2\rangle, |2 \downarrow\uparrow\rangle, |2 \uparrow\downarrow\rangle\}$ und hat die Gestalt

$$
\mathbb{M}_{6\times 6}^{(a)} = \begin{pmatrix}
d_1^{(a)} & \frac{1}{2}J_2^{xy} & -\frac{1}{2}t_1 & 0 & -\frac{1}{2}t_1 & 0 \\
\frac{1}{2}J_2^{xy} & d_1^{(a)} & 0 & -\frac{1}{2}t_1 & 0 & -\frac{1}{2}t_1 \\
-\frac{1}{2}t_1 & 0 & d_2^{(a)} & \frac{1}{4}J_1^{xy} & 0 & -t_2 \\
0 & -\frac{1}{2}t_1 & \frac{1}{4}J_1^{xy} & d_2^{(a)} & -t_2 & 0 \\
-\frac{1}{2}t_1 & 0 & 0 & -t_2 & d_2^{(a)} & \frac{1}{4}J_1^{xy} \\
0 & -\frac{1}{2}t_1 & -t_2 & 0 & \frac{1}{4}J_1^{xy} & d_2^{(a)}
\end{pmatrix}
\tag{4.13}
$$

Mittels der Basis $\{|0\sigma 2\rangle, |2\sigma 0\rangle, |02\sigma\rangle, |\sigma 02\rangle, |\sigma 20\rangle, |20\sigma\rangle\}$ erhält man den letzten Matrixtyp:

$$
\mathbb{M}_{6\times 6}^{(b)} = \begin{pmatrix}
d_1^{(b)} & Y_2 & -\frac{1}{2}t_1 & 0 & -\frac{1}{2}t_1 & 0 \\
Y_2 & d_1^{(b)} & 0 & -\frac{1}{2}t_1 & 0 & -\frac{1}{2}t_1 \\
-\frac{1}{2}t_1 & 0 & d_2^{(b)} & -t_2 & 0 & \frac{1}{2}Y_1 \\
0 & -\frac{1}{2}t_1 & -t_2 & d_2^{(b)} & \frac{1}{2}Y_1 & 0 \\
-\frac{1}{2}t_1 & 0 & 0 & \frac{1}{2}Y_1 & d_3^{(b)} & -t_2 \\
0 & -\frac{1}{2}t_1 & \frac{1}{2}Y_1 & 0 & -t_2 & d_3^{(b)}
\end{pmatrix}
\tag{4.14}
$$

Durch entsprechende Basistransformationen können diese Matrizen zunächst auf jeweils zwei 3×3-Matrizen vereinfacht werden, was ich anhand eines Beispiels zeigen möchte. Hierzu betrachte man folgende Transformation: $|\phi\rangle_{1,2} := |\downarrow 0 \uparrow\rangle \pm|\uparrow 0 \downarrow\rangle$, $|\phi\rangle_{3,4} := |0 \downarrow\uparrow\rangle \pm |\uparrow\downarrow 0\rangle$ und $|\phi\rangle_{5,6} := |0 \uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow 0\rangle$, wodurch eine Transformationsmatrix $\mathbb{T}$ definiert wird. Durch Anwendung von $\mathbb{T}^{-1} \star \mathbb{M}_{6\times 6} \star \mathbb{T}$ erhält man schließlich

$$\overline{\mathbb{M}}^{(a)}_{6\times 6} = \begin{pmatrix} d_1^{(a)} + \frac{1}{2}J_2^{xy} & -\frac{1}{2}t_1 & -\frac{1}{2}t_1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2}t_1 & d_2^{(a)} - t_2 & \frac{1}{4}J_1^{xy} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2}t_1 & \frac{1}{4}J_1^{xy} & d_2^{(a)} - t_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_1^{(a)} - \frac{1}{2}J_2^{xy} & -\frac{1}{2}t_1 & \frac{1}{2}t_1 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2}t_1 & d_2^{(a)} + t_2 & \frac{1}{4}J_1^{xy} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}t_1 & \frac{1}{4}J_1^{xy} & d_2^{(a)} + t_2 \end{pmatrix} \tag{4.15}$$

Nun ist es möglich die neuen Matrizen $\overline{\mathbb{M}}^{(a)}_{6\times 6}$ weiterhin zu vereinfachen, indem man analog wie bei den schon betrachteten 3×3-Matrizen eine entsprechende Transformationsmatrix definiert. Die Eigenwerte lauten:

$$\begin{aligned} e_{1,2}^{(a)} &= d_2^{(a)} \pm t_2 \pm \frac{1}{4}J_1^{xy}, \\ e_{3,4}^{(a)} &= \frac{1}{8}\left(4d_1^{(a)} + 4d_2^{(a)} + 4t_2 - 2J_2^{xy} - J_1^{xy}\right) \\ &\pm \frac{1}{8}\left(\sqrt{\left(4d_2^{(a)} - 4d_1^{(a)} + 4t_2 + 2J_2^{xy} - J_1^{xy}\right)^2 + 32t_1^2}\right), \\ e_{5,6}^{(a)} &= \frac{1}{8}\left(4d_1^{(a)} + 4d_2^{(a)} - 4t_2 + 2J_2^{xy} + J_1^{xy}\right) \\ &\pm \frac{1}{8}\left(\sqrt{\left(4d_1^{(a)} - 4d_2^{(a)} + 4t_2 + 2J_2^{xy} - J_1^{xy}\right)^2 + 32t_1^2}\right). \end{aligned} \tag{4.16}$$

Die Matrizen vom Typ $\overline{\mathbb{M}}^{(b)}_{6\times 6}$ können dagegen nicht mehr reduziert werden. Bei der Diagonalisierung dieser Matrizen erhält man somit ein kubisches Polynom, welches mittels der sogenannten *Cardanischen Methode* gelöst werden kann. Die Methode ist die folgende: Eine kubische Gleichung $x^3 + rx^2 + sx + t = 0$ kann man durch die Substitution $x = y - r/3$ auf eine reduzierte Gleichung $y^3 + py + q = 0$ bringen. Dabei ist $p = (3s - r^2)/3$ und $q = 2r^3/27 - rs/3 + t$. Das Lösungsverhalten ist abhängig vom Vorzeichen der Diskriminante $\mathcal{D} = (p/3)^3 + (q/2)^2$. In unserem Fall ist $\mathcal{D} < 0$ (und damit $p < 0$), so daß drei reelle Lösungen der Form $y_1 = 2\sqrt[3]{\varrho}\cos(\varphi/3)$, $y_2 = 2\sqrt[3]{\varrho}\cos((\varphi + 2\pi)/3)$ und $y_3 = 2\sqrt[3]{\varrho}\cos((\varphi + 4\pi)/3)$ folgen, wobei die Bezeichnungen $\varrho = \sqrt{-p^3/27}$ und $\varphi = \arccos(-q/(2\varrho))$ benutzt wurden. Die Eigenwerte der 3×3-Matrizen lauten somit

$$\begin{aligned} e_{1,2}^{(b)} &= 2\sqrt[3]{\varrho}\cos\left(\frac{\varphi}{3}\right) - \frac{1}{3}r_{1,2}, \\ e_{3,4}^{(b)} &= 2\sqrt[3]{\varrho}\cos\left(\frac{\varphi + 2\pi}{3}\right) - \frac{1}{3}r_{1,2}, \\ e_{5,6}^{(b)} &= 2\sqrt[3]{\varrho}\cos\left(\frac{\varphi + 4\pi}{3}\right) - \frac{1}{3}r_{1,2}. \end{aligned} \tag{4.17}$$

wobei ich nur $r_1 = d_1^{(b)} + d_2^{(b)} + d_3^{(b)} + 2t_2 - Y_2$ und $r_2 = d_1^{(b)} + d_2^{(b)} + d_3^{(b)} - 2t_2 + Y_2$ vollständig angeben möchte. Die zwei anderen Variablen (ϱ, φ) werden aufgrund der langen Ausdrücke nicht mehr explizit angeben.

4.1.3 256×256-Matrix

Nun wird ein weiterer Gitterpunkt l hinzugefügt, wodurch sich das Problem auf lokal vier Punkte vergrößert (*Abbildung* 4.2). Eine naheliegende Anwendung ist

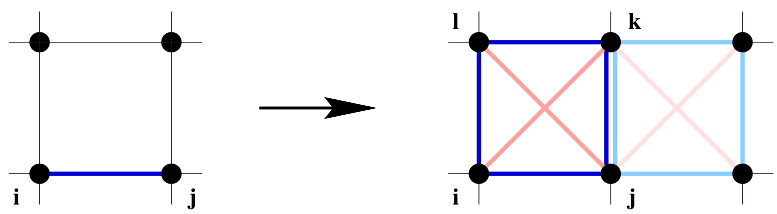


Abbildung 4.2: *Erweiterung einer* nN-Bond-*Wechselwirkung auf eine* Plaquetten-*Wechselwirkung auf einem Quadratgitter.*

durch die „zweidimensionalen" *Leitersysteme* gegeben. Beispielsweise können die Materialien $(VO)_2P_2O_7$ oder $SrCu_2O_3$ durch eine Leiterstruktur beschrieben werden, die man z.B. in [36] für das $t-J$-Modell und in [37] für das Hubbard-Modell untersucht hat. Außerdem wird ein Vergleich mit zuvor numerisch berechneten Resultaten ermöglicht [38]. Auch hier müssen bei der Summierung die mehrfach gezählten *nN-Bonds* durch den Vorfaktor $1/F$ kompensiert werden. Dabei läßt sich der *Four-Site*-Hamiltonian wie folgt aufspalten:

$$\boxed{\begin{aligned}\sum_{[ijkl]} h_{ijkl} :=& \frac{1}{F}\sum_{\langle ij\rangle_1}\left(\widetilde{h}^{(1)}_{ij} + O_{ij}\right) + \frac{1}{F}\sum_{\langle jk\rangle_1}\left(\widetilde{h}^{(1)}_{jk} + O_{jk}\right) + \frac{1}{F}\sum_{\langle kl\rangle_1}\left(\widetilde{h}^{(1)}_{kl} + O_{kl}\right)\\ &+ \frac{1}{F}\sum_{\langle il\rangle_1}\left(\widetilde{h}^{(1)}_{il} + O_{il}\right) + \sum_{\langle ik\rangle_2}\widetilde{h}^{(2)}_{ik} + \sum_{\langle jl\rangle_2}\widetilde{h}^{(2)}_{jl}.\end{aligned}} \tag{4.18}$$

Die Größen F, O_{uv} und $\widetilde{h}^{(\alpha)}_{uv}$, wobei $(uv) \in \{(ij),(jk),(kl),(il),(jl),(ik)\}$ gilt, sind wie beim *Three-Site*-Hamiltonian definiert. Der Fall $D = 1$ ist jedoch ausgeschlossen, da die Paarungen der *nN-Bonds* bzw. der *nnN-Bonds* hier anders gewählt werden müßten. Der lokale *Four-Site*-Zustand ist ein Tensorprodukt $|\xi_i\xi_j\xi_k\xi_l\rangle = |\xi_i\rangle \otimes |\xi_j\rangle \otimes |\xi_k\rangle \otimes |\xi_l\rangle$. Insgesamt werden dadurch $4^4 = 256$ Zustände gebildet. Einen Überblick über die Anzahl und Größe der Blockmatrizen (sowie der einzelnen Matrixtypen) gibt die folgende Tabelle wieder.

$X \neq t$ Anzahl	Größe	$X = t$ Anzahl	Typ a	Typ b	Typ c	Größe
4	1×1	4				1×1
8	4×4	10	8	2		4×4
4	6×6	5	4	1		6×6
2	16×16	8	2	4	2	12×12
2	48×48	1				14×14
1	68×68	3	2	1		24×24

Eine analytische Diagonalisierung ist aufgrund der großen Matrizen nur für $X = t$ und ohne die *nnN*-Terme möglich. Die größte Untermatrix besitzt somit nur 24×24 Einträge, und die Diagonalisierung aller drei Matrixtypen dieser Größe liefert, im Gegensatz zu der 18×18-Matrix des 64-dim. Raumes, überschaubare

Resultate. Auch hier lassen sich die Matrizen durch entsprechende Basistransformationen auf mindestens 3×3-Matrizen reduzieren. Allerdings werde ich diese Transformationen nicht mehr durchführen, sondern direkt die Eigenwerte der einzelnen Blockmatrizen angeben.
Eigenwerte der 4×4-Matrizen:

$$e_1^{(a)} = d^{(a)}, \qquad e_{2,3}^{(a)} = d^{(a)} \pm t, \tag{4.19}$$

$$e_1^{(b)} = d^{(b)}, \qquad e_{2,3}^{(b)} = d^{(b)} \pm Y. \tag{4.20}$$

Eigenwerte der 6×6-Matrizen:

$$\begin{aligned} e_1^{(a)} &= d_1^{(a)}, \qquad e_2^{(a)} = d_2^{(a)}, \\ e_{3,4}^{(a)} &= d_1^{(a)} + d_2^{(a)} \pm \sqrt{\left(d_2^{(a)} - d_1^{(a)}\right)^2 + 2t^2}, \end{aligned} \tag{4.21}$$

$$\begin{aligned} e_1^{(b)} &= d_1^{(b)}, \qquad e_2^{(b)} = d_2^{(b)}, \\ e_{3,4}^{(b)} &= d_1^{(b)} + d_2^{(b)} \pm \sqrt{\left(d_2^{(b)} - d_1^{(b)}\right)^2 + 2Y^2}. \end{aligned} \tag{4.22}$$

Eigenwerte der 14×14-Matrix:

$$\begin{aligned} e_1 &= d_1, \qquad e_2 = d_2, \qquad e_{3,4} = d_1 \pm \frac{1}{2} J^{xy}, \\ e_{5,6} &= d_1 + d_2 \pm \frac{1}{2}\sqrt{4\left(d_2 - d_1\right)^2 + 2(J^{xy})^2}. \end{aligned} \tag{4.23}$$

Eigenwerte der 12×12-Matrizen:

$$\begin{aligned} e_{1,2}^{(a)} &= d_1^{(a)} \pm \frac{1}{4} J^{xy}, \qquad e_3^{(a)} = d_2^{(a)}, \\ e_{4,5}^{(a)} &= d_1^{(a)} + d_2^{(a)} + \frac{1}{8} J^{xy} \pm \frac{1}{8}\sqrt{\left(8d_1^{(a)} - 8d_2^{(a)} + J^{xy}\right)^2 + 128t^2}, \\ e_{6,7}^{(a)} &= d_1^{(a)} + d_2^{(a)} - \frac{1}{8} J^{xy} \pm \frac{1}{8}\sqrt{\left(8d_1^{(a)} - 8d_2^{(a)} - J^{xy}\right)^2 + 64t^2}, \end{aligned} \tag{4.24}$$

$$\begin{aligned} e_{1,2}^{(b)} &= d_1^{(b)} \pm \frac{1}{2} Y, \qquad e_3^{(b)} = d_2^{(b)}, \\ e_{4,5}^{(b)} &= d_1^{(b)} + d_2^{(b)} + \frac{1}{4} Y \pm \frac{1}{4}\sqrt{\left(4d_1^{(b)} - 4d_2^{(b)} + Y\right)^2 + 32t^2}, \\ e_{6,7}^{(b)} &= d_1^{(b)} + d_2^{(b)} - \frac{1}{4} Y \pm \frac{1}{4}\sqrt{\left(4d_1^{(b)} - 4d_2^{(b)} - Y\right)^2 + 16t^2}, \end{aligned} \tag{4.25}$$

$$
\begin{aligned}
e_{1,2}^{(c)} =& d_1^{(c)} \pm \frac{1}{2}t, \\
e_{3,4}^{(c)} =& d_1^{(c)} + d_2^{(c)} + \frac{1}{4}t \\
& \pm \frac{1}{4}\left(\sqrt{16\left(d_2^{(c)} - d_1^{(c)}\right)^2 + 8t\left(d_1^{(c)} - d_2^{(c)}\right) + 9t^2 + 8Y^2 + 16Yt}\right), \\
e_{5,6}^{(c)} =& d_1^{(c)} + d_2^{(c)} - \frac{1}{4}t \\
& \pm \frac{1}{4}\left(\sqrt{16\left(d_2^{(c)} - d_1^{(c)}\right)^2 + 8t\left(d_2^{(c)} - d_1^{(c)}\right) + 9t^2 + 8Y^2 - 16Yt}\right), \\
e_7^{(c)} =& 2\sqrt[3]{\varrho}\cos\left(\frac{\varphi}{3}\right) - \frac{1}{3}\left(2d_1^{(c)} + d_2^{(c)}\right), \\
e_8^{(c)} =& 2\sqrt[3]{\varrho}\cos\left(\frac{\varphi + 2\pi}{3}\right) - \frac{1}{3}\left(2d_1^{(c)} + d_2^{(c)}\right), \\
e_9^{(c)} =& 2\sqrt[3]{\varrho}\cos\left(\frac{\varphi + 4\pi}{3}\right) - \frac{1}{3}\left(2d_1^{(c)} + d_2^{(c)}\right).
\end{aligned}
\tag{4.26}
$$

Eigenwerte der 24×24-Matrizen:

$$
\begin{aligned}
e_{1,2}^{(a)} =& d_1^{(a)} \pm \frac{1}{2}t, \\
e_{3,4}^{(a)} =& d_1^{(a)} + d_2^{(a)} + \frac{1}{4}t \\
& \pm \frac{1}{4}\left(\sqrt{16\left(d_1^{(a)} - d_2^{(a)}\right)^2 + 8t\left(d_1^{(a)} - d_2^{(a)}\right) + 9t^2 + 2(J^{xy})^2 + 8tJ^{xy}}\right), \\
e_{5,6}^{(a)} =& d_1^{(a)} + d_2^{(a)} - \frac{1}{4}t \\
& \pm \frac{1}{4}\left(\sqrt{16\left(d_1^{(a)} - d_2^{(a)}\right)^2 + 8t\left(d_2^{(a)} - d_1^{(a)}\right) + 9t^2 + 2(J^{xy})^2 - 8tJ^{xy}}\right), \\
e_7^{(a)} =& 2\sqrt[3]{\rho}\cos\left(\frac{\phi}{3}\right) - \frac{1}{3}\left(2d_1^{(a)} + d_2^{(a)}\right), \\
e_8^{(a)} =& 2\sqrt[3]{\rho}\cos\left(\frac{\phi + 2\pi}{3}\right) - \frac{1}{3}\left(2d_1^{(a)} + d_2^{(a)}\right), \\
e_9^{(a)} =& 2\sqrt[3]{\rho}\cos\left(\frac{\phi + 4\pi}{3}\right) - \frac{1}{3}\left(2d_1^{(a)} + d_2^{(a)}\right),
\end{aligned}
\tag{4.27}
$$

$$
\begin{aligned}
e_1 &= d_2^{(b)}, \\
e_{2,3}^{(b)} &= d_1^{(b)} + \frac{1}{4}J^{xy} \pm \frac{1}{2}Y, \qquad e_{4,5}^{(b)} = d_1^{(b)} - \frac{1}{4}J^{xy} \pm \frac{1}{2}Y, \\
e_{6,7}^{(b)} &= d_1^{(b)} + d_2^{(b)} + \frac{1}{4}Y + \frac{1}{8}J^{xy} \pm \frac{1}{8}\sqrt{\left(8d_1^{(b)} - 8d_2^{(b)} + 2Y + J^{xy}\right)^2 + 128t^2}, \\
e_{8,9}^{(b)} &= d_1^{(b)} + d_2^{(b)} - \frac{1}{4}Y + \frac{1}{8}J^{xy} \pm \frac{1}{8}\sqrt{\left(8d_2^{(b)} - 8d_1^{(b)} + 2Y - J^{xy}\right)^2 + 64t^2}, \\
e_{10,11}^{(b)} &= d_1^{(b)} + d_2^{(b)} - \frac{1}{4}Y - \frac{1}{8}J^{xy} \pm \frac{1}{8}\sqrt{\left(8d_2^{(b)} - 8d_1^{(b)} + 2Y + J^{xy}\right)^2 + 128t^2}, \\
e_{12,13}^{(b)} &= d_1^{(b)} + d_2^{(b)} + \frac{1}{4}Y - \frac{1}{8}J^{xy} \pm \frac{1}{8}\sqrt{\left(8d_1^{(b)} - 8d_2^{(b)} + 2Y - J^{xy}\right)^2 + 64t^2}.
\end{aligned} \tag{4.28}
$$

Die Diagonaleinträge der einzelnen Matrizen können im Anhang nachgeschlagen werden. Die Variablen $(\varrho, \varphi, \rho, \phi)$ werden aufgrund der langen Ausdrücke nicht mehr explizit angegeben.

4.2 Exakte Grundzustände

4.2.1 „η-pairing“

Der „η-pairing“-Operator wurde ursprünglich von Yang [39] für das Hubbard-Modell eingeführt. Für ein Gitter mit L Gitterpunkten kann der Operator in der Form

$$
\eta_P^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{P}-\mathbf{k},\uparrow}^\dagger = \sum_{j=1}^{L} e^{iPj} \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \tag{4.29}
$$

geschrieben werden, wobei der letzte Ausdruck mit Hilfe einer geeigneten Fourier-Transformation bestimmt wurde. Physikalisch bedeutet dies, daß $\eta_P^\dagger$ eine Doppelbesetzung mit Impuls P erzeugt. Eine wichtige Eigenschaft des Operators ist die sogenannte „Off-Diagonal-Long-Range-Order“ (ODLRO). Ein Zustand $|\Phi\rangle$ besitzt diese Eigenschaft, wenn die Paar-Korrelationsfunktion $K(j,k)$ die Bedingung $\lim_{|j-k|\to\infty} K(j,k) \neq 0$ erfüllt. Dabei spricht man von „Off-Diagonal“, da $K(j,k)$ ein Außerdiagonalelement der Zweiteilchen-Dichtematrix ist [40]. Für einen Zustand mit ODLRO kann man die Flußquantisierung in Einheiten von $\phi = hc/(2e)$, sowie den *Meißner-Effekt* folgern [41], wodurch eine enge Beziehung zur Supraleitung besteht. Speziell für den „η-pairing"-Zustand (bei Dichte N/L) $|\eta\rangle = (\eta_P^\dagger)^{N/2}|0\rangle$ liefert die Korrelationsfunktion:

$$\begin{aligned}\lim_{|j-k|\to\infty} K(j,k) &= \lim_{|j-k|\to\infty} \frac{\langle\eta|\hat{c}_{j\downarrow}^\dagger\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger\hat{c}_{k\uparrow}\hat{c}_{k\downarrow}|\eta\rangle}{\langle\eta|\eta\rangle} \\ &= \lim_{|j-k|\to\infty} e^{iP(j-k)}\frac{\left(L-\frac{N}{2}\right)\frac{N}{2}}{L(L-1)} \neq 0.\end{aligned} \tag{4.30}$$

Dabei erhält man die letzte Relation aus der folgenden kombinatorischen Überlegung (hilfreich ist auch die untere Gleichung (4.31)): Der Normierungfaktor $\langle\eta|\eta\rangle$ gibt die Anzahl aller Möglichkeiten wieder, auf L Gitterplätze $N/2$ Doppelbesetzungen zu verteilen, d.h. der Faktor entspricht der Zahl $\binom{L}{N/2}$. Die Größe $\langle\eta|\hat{c}_{j\downarrow}^\dagger\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger\hat{c}_{k\uparrow}\hat{c}_{k\downarrow}|\eta\rangle$ gibt dabei die Anzahl aller Möglichkeiten wieder, auf L Plätzen $N/2$ Doppelbesetzungen so zu verteilen, daß auf Platz j eine sitzt, auf Platz k aber nicht. Damit ergibt sich die Zahl $\binom{L-2}{N/2-1}$. Eine für meine Untersuchung wesentlich nützlichere Eigenschaft ist die $SU(2)_\eta$-Symmetrie, d.h. es gilt $[\eta_P^\dagger, \eta_P] = 2\eta_P^z$, $[\eta_P^z, \eta_P^\dagger] = \eta_P^\dagger$ und insbesondere $[H, \eta_P^\dagger] = 0$. Die letzte Eigenschaft kann für die Konstruktion eines Eigenzustandes für das generalisierte Hubbard-Modell genutzt werden[4]. Eine oft verwendete Schreibweise für den „η-pairing"-Zustand mit der Dichte $N/L = n$ ist:

$$\begin{aligned}|\eta\rangle &= \left(\sum_{j=1}^{L} e^{iPj}\hat{c}_{j\downarrow}^\dagger\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger\right)^{N/2}|0\rangle \\ \Leftrightarrow & \sum_{\substack{k_1+\ldots+k_L=N/2 \\ k_j\in\{0,1\}}} a_1^{k_1}\ldots a_L^{k_L}|0\rangle \quad \text{mit} \quad a_j = e^{iPj}\hat{c}_{j\downarrow}^\dagger\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger.\end{aligned} \tag{4.31}$$

Hier wird deutlich (insbesondere in der zweiten Darstellung), daß dieser Zustand einer Superposition von Konfigurationen entspricht, weswegen eine lokale Beschreibung nicht durch einen Term, wie z.B. $|02\rangle$, eindeutig charakterisiert werden

[4] Es sei an dieser Stelle noch zu erwähnen, daß die gesamte Symmetrie durch $(SU(2)_S \times SU(2)_\eta)/Z_2 \cong SO(4)$ gegeben ist. Die erste Symmetrie ist allerdings für die Konstruktion von Eigenzuständen nicht besonders interessant, da man hier lediglich ein Spin-Multiplett erzeugt.

kann. Einige Konfigurationsmöglichkeiten sind hierzu in *Abbildung* 4.3 illustriert. Um zu zeigen, daß $|\eta\rangle$ ein Eigenzustand des generalisierten Hubbard-Modells ist,

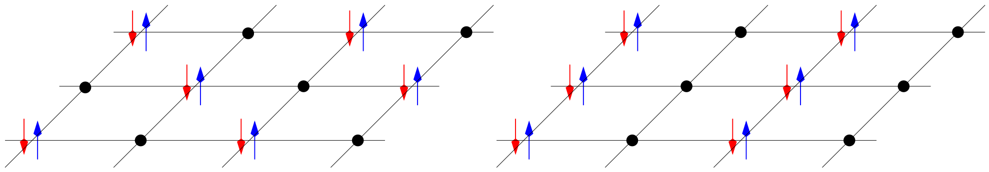


Abbildung 4.3: *Zwei mögliche Beiträge zum „η-pairing"-Zustand auf einem Quadratgitter bei halber Bandfüllung.*

muß die Bedingung $[H, \eta_P^\dagger]$ etwas genauer betrachten werden. Nach einer langwierigen Rechnung erhält man:

$$\begin{aligned}
[H, \eta_P^\dagger] = \sum_{\alpha=1}^{2} \quad & 2(X_\alpha - t_\alpha) \sum_{\langle uv\rangle_\alpha} \left(e^{iPu} + e^{iPv}\right) \left(\hat{c}_{u\downarrow}^\dagger \hat{c}_{v\uparrow}^\dagger + \hat{c}_{v\downarrow}^\dagger \hat{c}_{u\uparrow}^\dagger\right) \\
& + 2X_\alpha \sum_{\langle uv\rangle_\alpha} \left(e^{iPu} - e^{iPv}\right) \left((\hat{n}_{v\uparrow} - \hat{n}_{u\downarrow}) \hat{c}_{u\downarrow}^\dagger \hat{c}_{v\uparrow}^\dagger + (\hat{n}_{v\downarrow} - \hat{n}_{u\uparrow}) \hat{c}_{v\downarrow}^\dagger \hat{c}_{u\uparrow}^\dagger\right) \\
& + \sum_{\langle uv\rangle_\alpha} \left(\frac{Y_\alpha}{2} e^{iPu} - V_\alpha e^{iPv}\right) (\hat{n}_u - 1) \hat{c}_{v\uparrow}^\dagger \hat{c}_{v\downarrow}^\dagger \\
& + \sum_{\langle uv\rangle_\alpha} \left(\frac{Y_\alpha}{2} e^{iPv} - V_\alpha e^{iPu}\right) (\hat{n}_v - 1) \hat{c}_{u\uparrow}^\dagger \hat{c}_{u\downarrow}^\dagger \\
& - 2\mu \eta_P^\dagger .
\end{aligned} \tag{4.32}$$

Dabei entspricht $\langle uv\rangle_\alpha$ der Summierung über nächste ($\alpha = 1$) bzw. übernächste ($\alpha = 2$) Gitterpunkte. Eine weitere Untersuchung von $(\eta_P^\dagger)^{N/2}|0\rangle$ unter Nutzung von (4.32) liefert letztendlich die nötigen Einschränkungen.

$P = 0$	$P = \pi$
$X_\alpha = t_\alpha$	$X_2 = t_2$
$Y_\alpha = 2V_\alpha$	$Y_\alpha = (-1)^\alpha 2V_\alpha$

Man sieht, daß für $P = \pi$ keine Bedingung an t_1 und X_1 gestellt werden muß. Es existieren auch „η-pairing"-Zustände mit $P \neq 0$ bzw. $P \neq \pi$, die man z.B. für den Fall $X = t$, $U \leq -4t$ und allen anderen Parametern gleich Null in [42] untersucht hat. Um nun aus $|\eta\rangle$ einen Optimum-Grundzustand zu bilden, muß sich dieser aus einer Teilmenge aller lokalen Zustände zusammensetzen lassen. Im folgenden wird der Fall $P = 0$ betrachtet (da die Kondensation bei $P = 0$ „natürlicher" als z.B. bei $P = \pi$ ist). Die entsprechenden Zustände eines *Bond*-Hamiltonians lauten somit: $|00\rangle$, $|22\rangle$ und $|02\rangle + |20\rangle$. Sie besitzten die gleiche Energie $e_0 = U/(2Z) + V$, wenn man $\mu = 0$ fordert. Diese Energie muß nun kleiner als alle angeregten lokalen Energien sein, wodurch sich folgende Ungleichungen ergeben:

$$
\begin{aligned}
&V \leq 0, \qquad \frac{U}{Z} \leq \min\{\mathfrak{s}_1, \mathfrak{s}_2, \mathfrak{s}_3\}, \\
&\mathfrak{s}_1 := -2|t| - 2V, \\
&\mathfrak{s}_2 := -V + \frac{J^z}{4}, \\
&\mathfrak{s}_3 := -V - \frac{J^z}{4} - \frac{|J^{xy}|}{2}.
\end{aligned}
\tag{4.33}
$$

Die Ungleichungen sind gleichzeitig auch die Stabilitätsschranken des „η-pairing"-Zustandes für den Impuls $P = 0$. Wie sehen diese nun für ein *Three-Site*- bzw. *Four-Site*-Hamiltonoperator aus? Dies wird im nächsten Abschnitt geklärt.

4.2.1.1 Stabilitätsbereiche ohne nnN

Der „η-pairing"-Zustand mit $P = 0$ kann durch die lokalen Zustände $|000\rangle$, $|222\rangle$, $(|002\rangle + |200\rangle) + |020\rangle$ und $(|022\rangle + |220\rangle) + |202\rangle$ (*Three-Site*-Hamiltonian), bzw. $|0000\rangle$, $|2222\rangle$, $(|0002\rangle + |2000\rangle) + (|0020\rangle + |0200\rangle)$, $(|2220\rangle + |0222\rangle) + (|2022\rangle + |2202\rangle)$ und $((|0022\rangle + |0022\rangle) + (|0220\rangle + |2002\rangle)) + (|0202\rangle + |2020\rangle)$ (*Four-Site*-Hamiltonian) gebildet werden. Schaltet man die *nnN*-Wechselwirkung aus, indem alle Parameter mit Index 2 gleich Null gesetzt werden, so haben die Zustände die gemeinsame Energie $e_0 = U/(2Z) + V$. Dabei muß auch hier $\mu = 0$ gefordert werden. Diese Energie soll nun kleiner als alle anderen sein[5], so daß folgende

[5]Bei Eigenwerten der Form $e = a \pm \sqrt{b}$ genügt es, den Eigenwert mit negativen Vorzeichen zu betrachtet.

Ungleichungen resultieren:

$$\boxed{\begin{aligned} V \le 0, \qquad & \frac{U}{Z} \le \min\left\{\mathfrak{s}_1,\, \mathfrak{s}_2,\, \mathfrak{b}_1^{(3)},\, \mathfrak{b}_2^{(3,4)}, \ldots\right\} \\ \mathfrak{b}_1^{(3)} &:= \frac{1}{3}\left(-5V - \frac{J^z}{4} - \frac{|J^{xy}|}{2} - \frac{1}{4}\sqrt{(4V - J^z - 2|J^{xy}|)^2 + 192t^2}\right) \\ \mathfrak{b}_2^{(3,4)} &:= -V + \frac{1}{8}\left(-J^z - \sqrt{(J^z)^2 + 8(J^{xy})^2}\right) \end{aligned}} \tag{4.34}$$

Hierbei wurden allerdings nur die Schranken aufgeführt, die auch in *Abbildung* 4.4 die Grenzen der Stabilitätsbereiche bilden. Ferner geben die Indizes *3* bzw. *4* die Zugehörigkeit zu den lokalen Hamiltonoperatoren wieder, d.h. die Schranke $\mathfrak{b}_1^{(3)}$ kommt nur im *Three-Site*-Hamiltonian vor. Außerdem ist festzustellen, daß die Schranke $\mathfrak{s}_3$ durch die Erweiterung modifiziert wurde, d.h. hier liegt gerade die Verbesserung. In der nun folgenden *Abbildung* 4.4 ist eine Auswahl von jeweils zweidimensionalen Schnitten des fünfparametrigen Raumes (t, U, V, J^z, J^{xy}) wiedergegeben. Für die Parameter habe ich realistische Werte gewählt, wobei die Relationen $U \ge V \ge t \ge J^z \ge J^{xy}$ berücksichtigt wurden. Die Angaben sind in den oberen vier Bildern in t-Einheiten und in den unteren zwei Bildern in eV-Einheiten. Die schattierten Bereiche geben dabei den stabilen Bereich des „η-pairing“-Grundzustandes wieder. Es zeigt sich, daß eine lokale Erweiterung auf drei Gitterpunkte eine deutliche Verbesserung des Stabilitätsbereiches zufolge hat. Dagegen ist eine Erweiterung auf vier Gitterpunkte nur beschränkt besser, d.h. nur der $U-V$-Schnitt zeigt hier eine Verbesserung. Für den $J^z - J^{xy}$-Schnitt wird dieses Resultat auch in [38] bestätigt. Insgesamt ist eine „schnelle“ Konvergenz der Stabilitätsbereiche zu beobachten. Ausgehend von den vorliegenden Resultaten kann gefolgert werden, daß es sich hierbei um einen lokalen Effekt handelt. Außerdem beachte man, daß $U > 0$ erlaubt ist.

4.2.1.2 Stabilitätsbereiche mit nnN

In diesem Abschnitt wird die *nnN*-Wechselwirkung in die Rechnung einbezogen. Interessant ist hierbei nicht nur die Auswirkung auf die Größe des Stabilitäts-

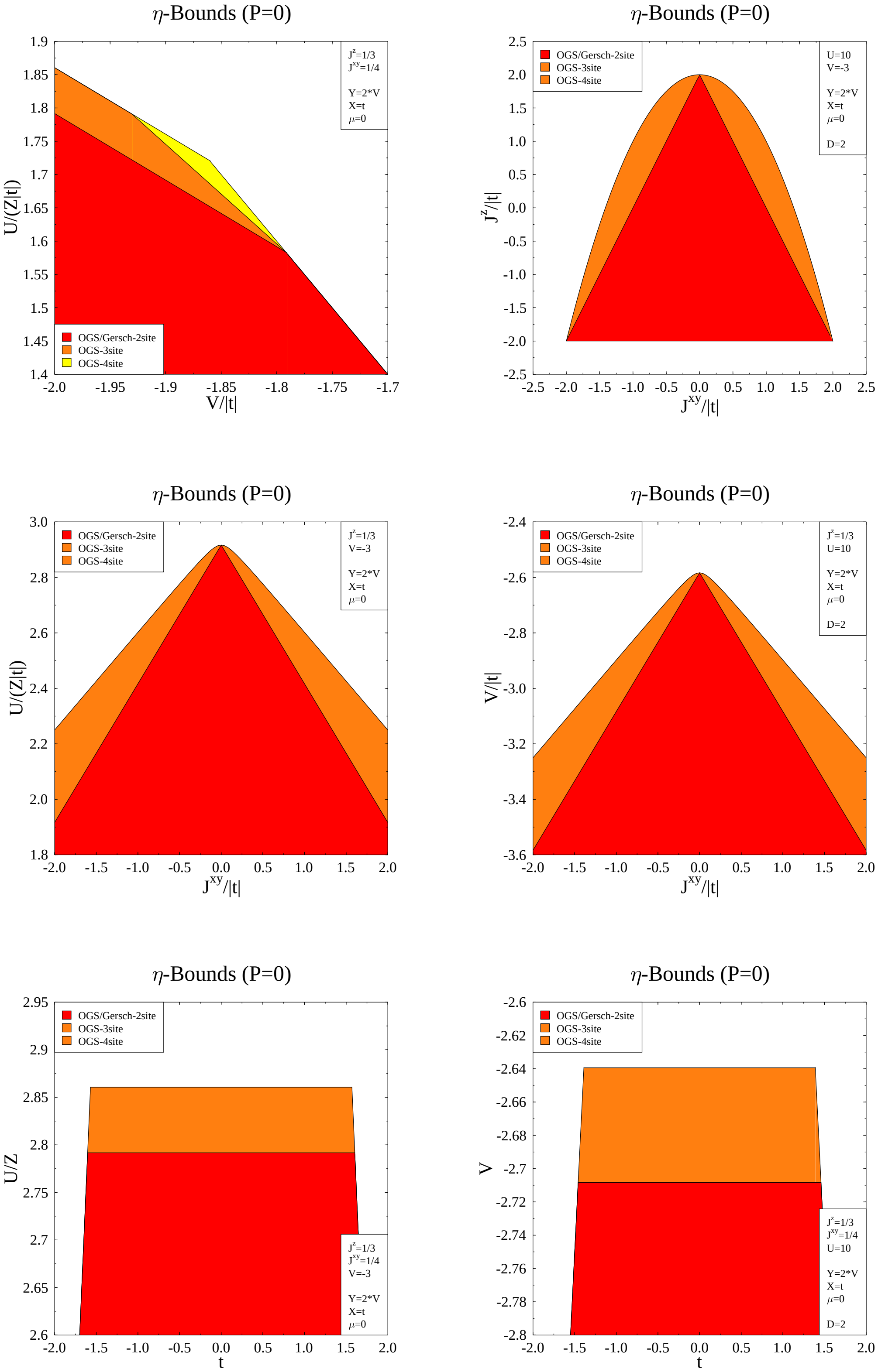


Abbildung 4.4: *Schranken des „η-pairing“-Grundzustandes in verschiedenen Parameterregimen.*

bereiches, sondern auch auf das Verhältnis der *nN*-Parameter zu ihren komplementären *nnN*-Parametern. Ich werde mich jedoch nur auf den zweidimensionalen Fall $D = 2$ beschränken.
Die lokale Energie ist durch $e_0 = U/(2Z_1) + V_1 + V_2$ gegeben und entspricht bis auf den letzten Term der lokalen *nN*-Energie. Die lokalen Grundzustände sind dabei wie im vorherigen Abschnitt zu wählen. In diesem Fall können nur die *Three-Site*-Zustände betrachten werden, da der *Four-Site*-Hamiltonoperator nicht analytisch diagonalisierbar war. Für die Schranken erhält man folgendes Resultat:

$$\boxed{\begin{aligned}
&V_1 \leq -4V_2, \qquad \frac{U}{Z_1} \leq \min\{\mathfrak{b}_1,\ \mathfrak{b}_{2,3},\ \mathfrak{b}_4,\ \mathfrak{b}_5, \dots\} \\
\\
\mathfrak{b}_1 &:= -V_1 - V_2 + \frac{1}{4}\left(J_1^z + J_2^z\right) \\
\mathfrak{b}_{2,3} &:= 2\left(-t_2 - V_1 - V_2 \pm \sqrt{\left(t_2 + V_2\right)^2 + t_1^2}\right) \\
\mathfrak{b}_4 &:= \frac{1}{8}\left(-8\left(V_1 + V_2\right) - J_1^z + 2J_2^{xy} - \sqrt{\left(J_1^z - 2J_2^z + 2J_2^{xy}\right)^2 + 8(J_1^{xy})^2}\right) \\
\mathfrak{b}_5 &:= \frac{1}{3}\left(-2|t_2| - 5\left(V_1 + V_2\right) - \frac{1}{4}\left(J_1^z + 3J_2^z\right) + \frac{1}{2}\left(|J_1^{xy}| + 3|J_2^{xy}|\right)\right) \\
&\quad - \frac{1}{12}\left(\sqrt{\left(-8|t_2| + 4\left(V_1 + V_2\right) - J_1^z + 3J_2^z + 2|J_1^{xy}| - 6|J_2^{xy}|\right)^2 + 192t_1^2}\right)
\end{aligned}} \tag{4.35}$$

Auch hier sind nur die Schranken angegeben, die in folgenden Abbildungen die Grenzen bilden. Zudem entsprechen sie den Grenzen in (4.34), wenn alle *nnN*-Terme gleich Null gesetzt werden. Nun werden einige Schnitte des neunparametrigen Raumes $(t_\alpha, U, V_\alpha, J_\alpha^z, J_\alpha^{xy})$ untersucht. Dazu muß aber der Parameterraum reduziert werden. In realen Systemen ist die *nnN*-Wechselwirkung kleiner als die korrespondierende *nN*-Wechselwirkung. Das Verhältnis der Wechselwirkungen zueinander ist jedoch unterschiedlich und hängt insbesondere vom Material ab. Somit können die Parameter (der korrespondierenden Wechselwirkungen) durch die allgemeine Bedingung $P_2 = P_1/k$ verknüpft werden, wobei $P_\alpha \in \{t_\alpha, V_\alpha, J_\alpha^z, J_\alpha^{xy}\}$

ist und $k \in \mathfrak{R}$ die Kopplung zwischen den Parametern charakterisiert[6]. Hiermit wird der neunparametrige Raum auf fünf Dimensionen reduziert. In der nun folgenden *Abbildung* 4.5 ist eine Auswahl von zweidimensionalen Schnitten dieses Parameterraumes wiedergegeben. Allerdings habe ich nur für den Wert $k = 3$ (bei alle Parameterpaaren) die Ergebnisse graphisch dargestellt und möchte gleichzeitig hinzufügen, daß erst für sehr große/kleine k eine minimale Verkleinerung/Vergrößerung der Stabilitätsbereiche zu erkennen ist. Auf der linken Seite findet man die analytischen Resultate des *Three-Site*-Hamiltonians. Dabei ist eine deutliche Vergrößerung der Stabilitätsbereiche erkennbar. Zudem stellt man in den ersten beiden Bildern unsymmetrische Grenzen fest, die sich letztendlich aus dem „unsymmetrischen" Term $\widetilde{h}_{ik}^{(2)}$ des lokalen Hamiltonoperators (4.2) ergeben. Aus diesem Grund habe ich auf der rechten Seite die entsprechenden Schnitte für den *Four-Site*-Hamiltonoperator, die numerisch berechnet worden sind (siehe [38]), zusammengestellt. Die unteren Bilder sind der Vollständigkeit halber angegeben und zeigen ebenfalls eine Verbesserung der Grenzen.

Im letzten Punkt möchte ich auf das Verhalten der *nN*-Parameter zu ihren komplementären *nnN*-Parametern näher eingehen. Da der „η-pairing"-Zustand aus lokalen Elektronenpaaren gebildet wird, ist es insbesondere interessant das Paarhüpfen (Y_1, Y_2) für verschiedene U, d.h. sowohl für anziehende $(U < 0)$ als auch abstoßende $(U > 0)$ „on-site"-Coulomb-Wechselwirkung, zu untersuchen. In *Abbildung* 4.6 wurde aufgrund der Beziehung $Y = 2V$ nicht das Paar (Y_1, Y_2), sondern das Paar (V_1, V_2) dargestellt. Hierbei sieht man, daß die zwei Parameter V_1 und V_2 dem U stark entgegenwirken. Beispielsweise bei wachsendem U, was einer Coulomb-Abstoßung entspricht, versuchen die zwei Parameter den Grundzustand zu stabilisieren, indem sie die Elektronenpaare stärker binden, was durch das negative Vorzeichen von V zum Ausdruck kommt. Dabei können V_1 und V_2 auch positive Werte annehmen, jedoch muß immer die Bedingung $V_1 = kV_2$ mit $k = 3$ erfüllt werden. In [38] wurde eine entsprechende Untersuchung für den „η-pairing"-Zustand mit Impuls $P = \pi$ durchgeführt. Dabei zeigt sich allerdings ein anderes Grenzverhalten. Aus der Illustration ist erkennbar, daß für die drei

[6]Dabei kann k bei jedem Parameterpaar $(P_1 P_2)$ anders definiert sein.

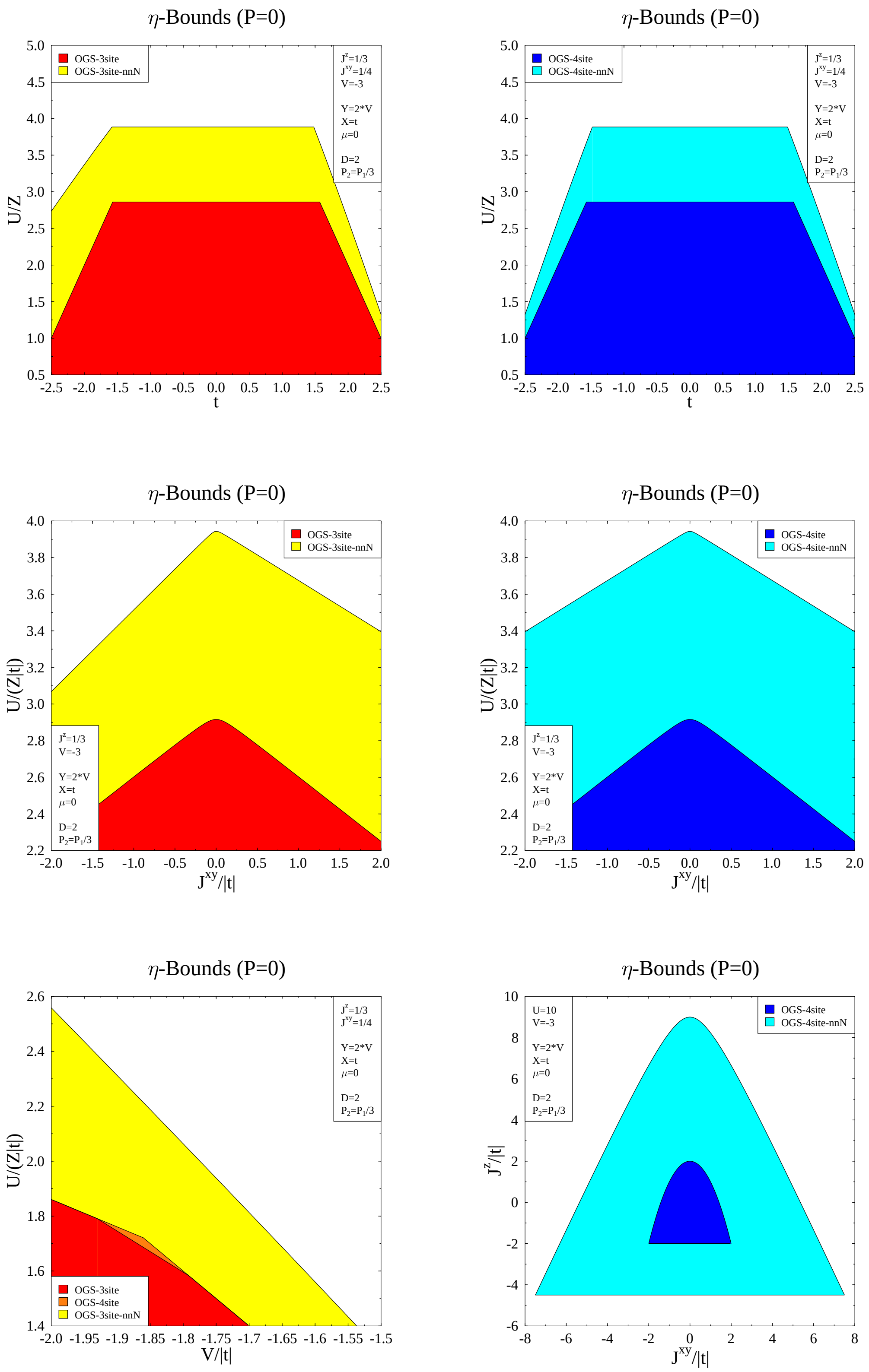


Abbildung 4.5: *Ein Vergleich zwischen* nN-*Wechselwirkung und* nnN-*Wechselwirkung des „η-pairing"-Grundzustandes in verschiedenen Parameterregimen.*

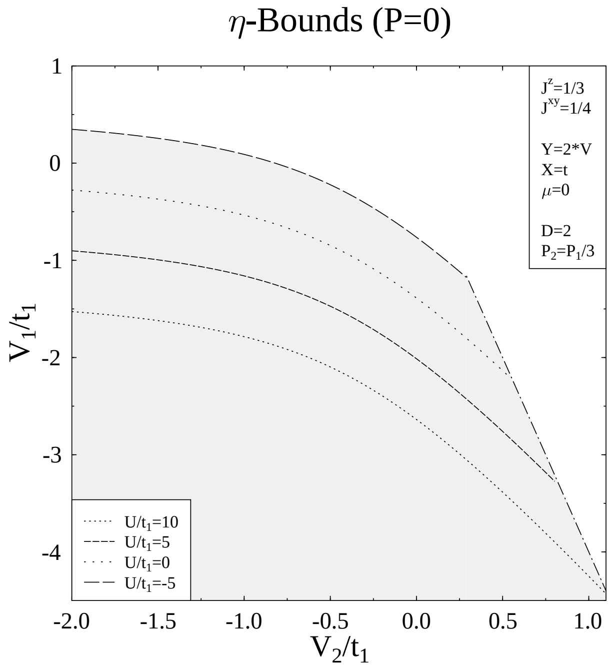


Abbildung 4.6: *Das Verhalten der Parameter V_1 und V_2 bei unterschiedlicher Coulomb-Wechselwirkung U.*

verschiedenen $U \geq 0$ stets $V_1 \leq 0$ gilt. Dabei sind für V_2 auch positive Werte möglich.

4.2.2 Ferromagnetismus ($X = t$)

Der voll-polarisierte ferromagnetische Zustand ist durch den Ausdruck

$$|\mathrm{F}\rangle = \prod_{i=1}^{L} \hat{c}^{\dagger}_{i\uparrow}|0\rangle \tag{4.36}$$

beschrieben. Bei halber Bandfüllung ($N = L$) befindet sich auf jedem Gitterplatz genau ein Elektron (siehe *Abbildung* 4.7). Einschränkungen an die Wechselwirkungsparameter, wie beim „η-pairing“, sind hier nicht gegeben. Man muß jedoch die Einschränkung $X = t$ vornehmen, da sonst die Matrizen nicht analytisch diagonalisierbar sind. Der lokale Zustand des *Bond*-Hamiltonoperators ist $|\sigma\sigma\rangle$

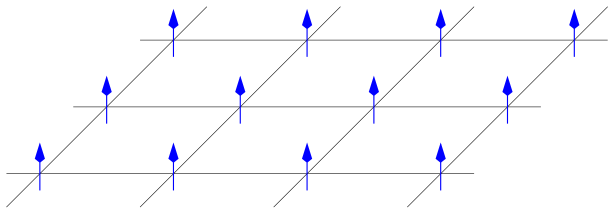


Abbildung 4.7: Voll-polarisierte ferromagnetische Zustand auf einem Quadratgitter bei halber Bandfüllung.

und besitzt die lokale Grundzustandsenergie $e_0 = -U/(2Z) + J^z/4 - 2\mu/Z$. Diese muß nun kleiner als alle anderen lokalen Energien sein, woraus sich folgende Ungleichungen ergeben:

$$\begin{aligned} -J^z \geq |J^{xy}|, \qquad & \frac{U}{Z} \geq \max\{\mathfrak{s}_1,\, \mathfrak{s}_2,\, \mathfrak{s}_3\}, \\ \mathfrak{s}_1 &:= 2|t| + \frac{J^z}{2} + \frac{2|\mu|}{Z}, \\ \mathfrak{s}_2 &:= -V + \frac{J^z}{4} - \frac{2|\mu|}{Z}, \\ \mathfrak{s}_3 &:= V + |Y| + \frac{J^z}{4}. \end{aligned} \tag{4.37}$$

Bei einer fest vorgegebenen Teilchenzahl kann man die Grenzen auch mittels μ optimieren. Findet man beispielsweise Ungleichungen der Form $U \geq a + \mu$ und $U \geq b - \mu$, so ist der beste μ-Wert gleich $(b-a)/2$, woraus $U \geq (a+b)/2$ folgt. Im Fall (4.37) erhalten wir $\mu = 0$ und somit

$$\begin{aligned} & \frac{U}{Z} \geq \max\{\mathfrak{s}_1,\, \mathfrak{s}_2,\, \mathfrak{s}_3,\, \mathfrak{s}_4\}, \\ & \mathfrak{s}_1 := 2|t| + \frac{J^z}{2}, \qquad \mathfrak{s}_2 := -V + \frac{J^z}{4}, \qquad \mathfrak{s}_4 := |t| - \frac{V}{2} + \frac{3J^z}{8}, \\ & \mathfrak{s}_3 = V + |Y| + \frac{J^z}{4}. \end{aligned} \tag{4.38}$$

Im folgenden Abschnitt wird gezeigt, daß der Wert $\mu = 0$ auch für den *Three-Site-* und *Four-Site*-Hamiltonian die besten Schranken liefert. Allerdings werde ich von $\mu \neq 0$ ausgehen, und dies durch einen Vergleich bestätigen.

4.2.2.1 Stabilitätsbereiche ohne nnN

In diesem Abschnitt führt man die Untersuchungen ohne *nnN*-Wechselwirkung aus. Die lokale Energie $e_0 = -U/(2Z) + J^z/4 - 2\mu/Z$ erhalten wir direkt aus dem zugehörigen lokalen Eigenzustand $|\sigma\sigma\sigma\rangle$ bzw. $|\sigma\sigma\sigma\sigma\rangle$. Aus der Annahme, daß alle anderen lokalen Energien größer sind als e_0, folgen die unten stehenden Ungleichungen.

$$\boxed{\begin{aligned} & -J^z \geq |J^{xy}|, \qquad \frac{U}{Z} \geq \max\left\{\mathfrak{s}_1,\, \mathfrak{s}_2,\, \mathfrak{b}_1^{(3)},\, \mathfrak{b}_2^{(4)}, \dots\right\} \\ & \mathfrak{b}_1^{(3)} := \frac{1}{2}\left(V + \frac{J^z}{2} + \frac{|\mu|}{Z} + \sqrt{\left(V + \frac{|\mu|}{2}\right)^2 + 2Y^2}\right) \\ & \mathfrak{b}_2^{(4)} := \frac{1}{2}\left(V + \frac{J^z}{2} + \sqrt{V^2 + 2Y^2}\right) \end{aligned}} \tag{4.39}$$

Natürlich existieren noch andere Schranken, die hier aber ausgelassen wurden, da sie in den untersuchten Parameterregimen keinen Einfluß auf die Grenzen des Stabilitätsbereiches haben. Aus den vorherigen Resultaten („η-pairing“) ist bekannt, daß $\mathfrak{b}_2^{(4)} \geq \mathfrak{b}_1^{(3)}$ gilt, d.h. $\mathfrak{b}_2^{(4)}$ liefert eine bessere (oder zumindest gleich gute) Schranke. Ein Vergleich dieser Schranken deutet bereits darauf hin, daß sich für $\mu = 0$ die besten Grenzen ergeben müssen. Die Auswahl einiger Schnitte des siebenparametrigen Raumes $(t, U, V, Y, J^z, J^{xy}, \mu)$, die in *Abbildung* 4.8 gegeben ist, zeigt links die entsprechenden Stabilitätsbereiche für $\mu = 0$ und rechts für $\mu = 5$. Die oberen vier Schnitte sind in t-Einheiten und die unteren zwei in eV-Einheiten berechnet worden. Beim Vergleich der jeweiligen Schnitte wird deutlich, daß alle Werte $\mu \neq 0$ einen kleineren Stabilitätsbereich liefern. Folglich erhält man mit dem Wert $\mu = 0$ die besten Schranken. Außerdem ist eine Vergrößerung des Stabilitätsbereiches aufgrund der lokalen Erweiterung von zwei auf drei Gitterpunkte erkennbar. Dagegen ist bei der Hinzunahme eines vierten Gitterpunktes, zumindest in den untersuchten Parameterregimen, kein besseres Resultat zu sehen. Damit ist auch hier eine „schnelle Konvergenz“ der Schranken gegeben.

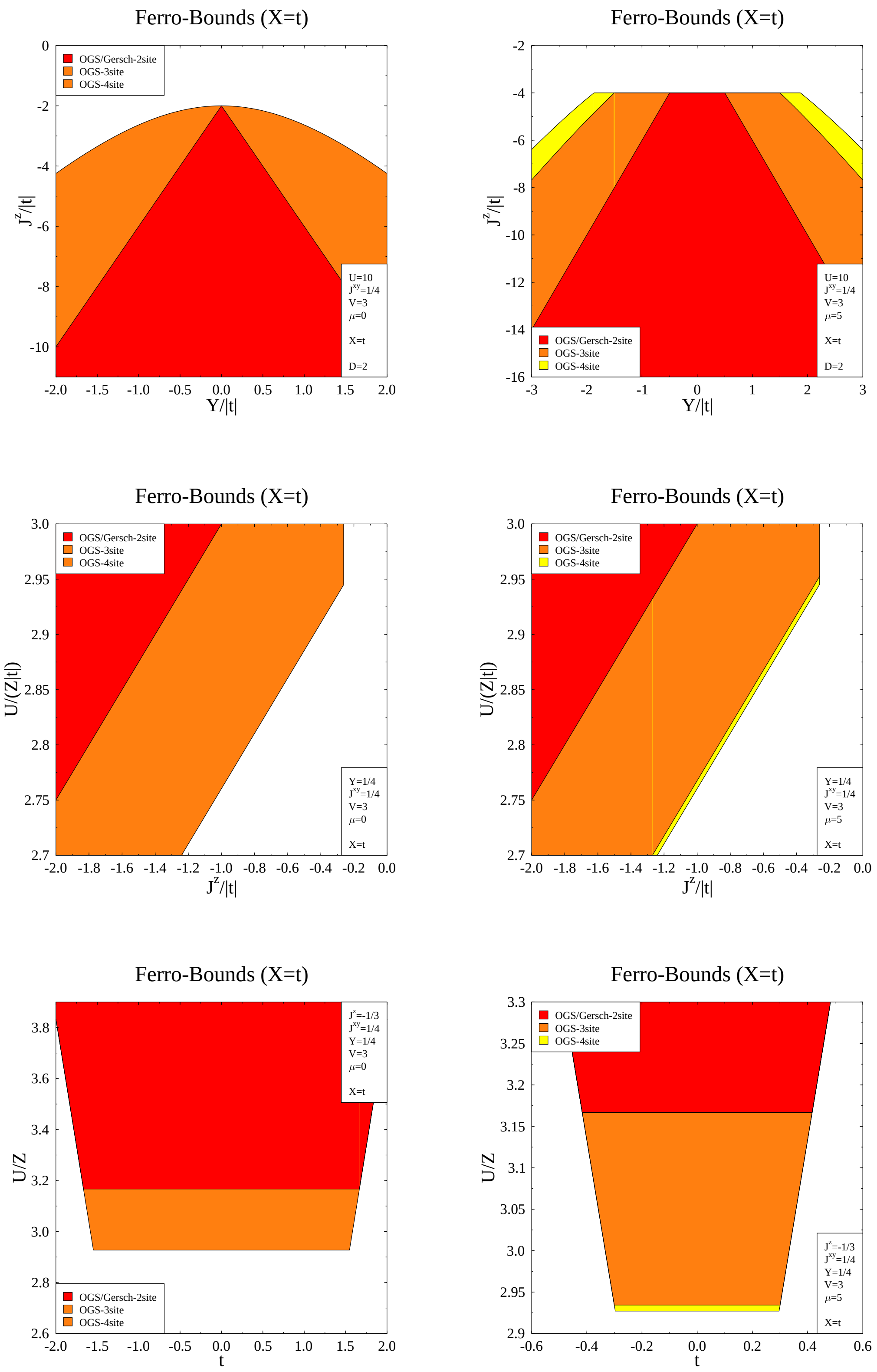


Abbildung 4.8: *Ein Vergleich der Schranken des voll-polarisierten ferromagnetischen Grundzustandes in verschiedenen Parameterregimen für $\mu = 0$ und $\mu \neq 0$.*

4.2.2.2 Stabilitätsbereiche mit nnN

Die Einbeziehung der *nnN*-Wechselwirkung kann, wie man auch schon im vorherigen Abschnitt gesehen hat, einen Einfluß auf den Stabilitätsbereich haben. Beispielsweise zeigt das reine Hubbard-Modell $H = H(t, U)$ bei halber Bandfüllung keinen ferromagnetischen Grundzustand. Lediglich in Spezialfällen, wie z.B. beim Nagaoka-Zustand, hat man einen voll-polarisierten ferromagnetischen Grundzustand. Was passiert aber, wenn man bei halber Bandfüllung einen zusätzlichen Parameter t_2 einführt? Eine entsprechende Studie, in der der Einfluß des langreichweitigen Hüpfens t_n auf den Ferromagnetismus untersucht wird, wurde von Farkašovský *et al.* durchgeführt [43]. Das Ergebnis zeigt, daß bei halber Bandfüllung der voll-polarisierte ferromagnetische Zustand mit wachsendem n unterdrückt wird. Bevor ich auf dieses Resultat näher eingehe, werde ich zunächst die Schranken berechnen. Dazu setzt man $\mu = 0$, wodurch die lokale Grundzustandsenergie den Wert $e_0 = -U/(2Z_1) + J_1^z/4 + J_2^z/4$ erhält. Der entsprechende Eigenzustand lautet $|\sigma\sigma\sigma\rangle$. Folglich ist:

$$\boxed{\begin{aligned}
&J_1^z \leq -2\left(J_2^z + J_2^{xy}\right), \qquad \left(J_1^z\right)^2 - \left(J_1^{xy}\right)^2 \leq -2\left(J_2^z - J_2^{xy}\right) J_1^z, \\
&\frac{U}{Z_1} \geq \max\left\{\mathfrak{b}_1,\ \mathfrak{b}_{2,3},\ \mathfrak{b}_4,\ \mathfrak{b}_{5,6}, \ldots\right\} \\
&\\
\mathfrak{b}_1 &:= -V_1 - V_2 + \frac{1}{4}\left(J_1^z + J_2^z\right) \\
\mathfrak{b}_{2,3} &:= 2t_2 + \frac{1}{2}\left(J_1^z + J_2^z\right) \pm \frac{1}{2}\sqrt{\left(4t_2 + J_2^z\right)^2 + 16t_1^2} \\
\mathfrak{b}_4 &:= \frac{1}{2}V_1 - \frac{1}{2}Y_2 + \frac{1}{4}\left(J_1^z + J_2^z\right) + \frac{1}{2}\sqrt{\left(V_1 + Y_2\right)^2 + 2Y_1^2 - 4V_2\left(V_1 + Y_2 - V_2\right)} \\
\mathfrak{b}_{5,6} &:= 2t_2 + J_1^z + J_2^z - \frac{1}{2}\left(J_1^{xy} + J_2^{xy}\right) \\
&\quad \pm \frac{1}{2}\sqrt{\left(4t_2 + J_2^{xy}\right)^2 + \left(J_1^z - J_1^{xy}\right)\left(J_1^z - J_1^{xy} + 2J_2^{xy}\right) + 8t_2\left(J_1^z - J_1^{xy}\right) + 16t_1^2}
\end{aligned}} \tag{4.40}$$

Die Schranken $\mathfrak{b}_{2,3}$, $\mathfrak{b}_4$ und $\mathfrak{b}_{5,6}$ bilden hierbei die Stabilitätsgrenzen der untersuchten Parameterregimen. Werden alle *nnN*-Wechselwirkungen ausgeschaltet, so erhält man (mit Ausnahme von $\mathfrak{b}_{5,6}$) die in (4.39) aufgeführten Schranken. In *Abbildung* 4.9 sind links die analytischen *Three-Site*-Schranken und rechts die numerischen *Plaquetten*-Schranken für den $U - t$-Schnitt wiedergegeben. Im Gegensatz zum „η-pairing"-Grundzustand ist hier in einigen Bereichen eine Verkleinerung des Stabilitätsbereiches zu erkennen. Dagegen zeigen die beiden Schnitte

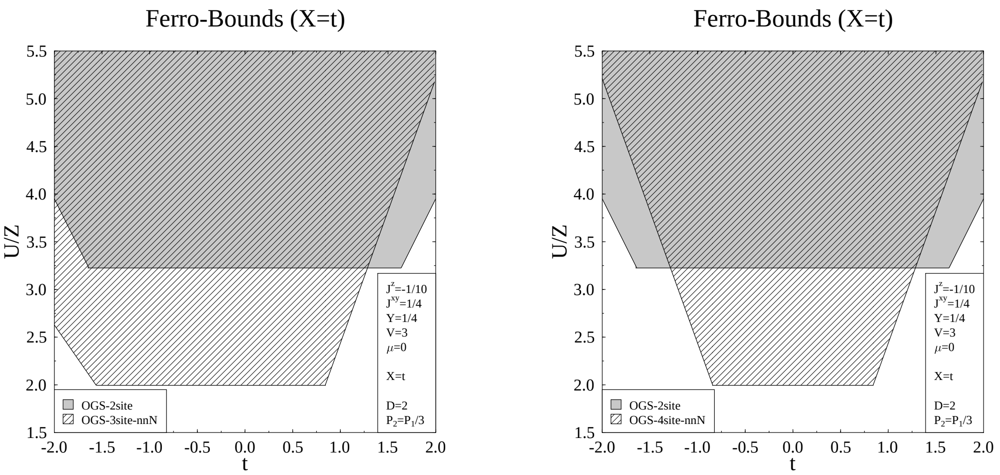
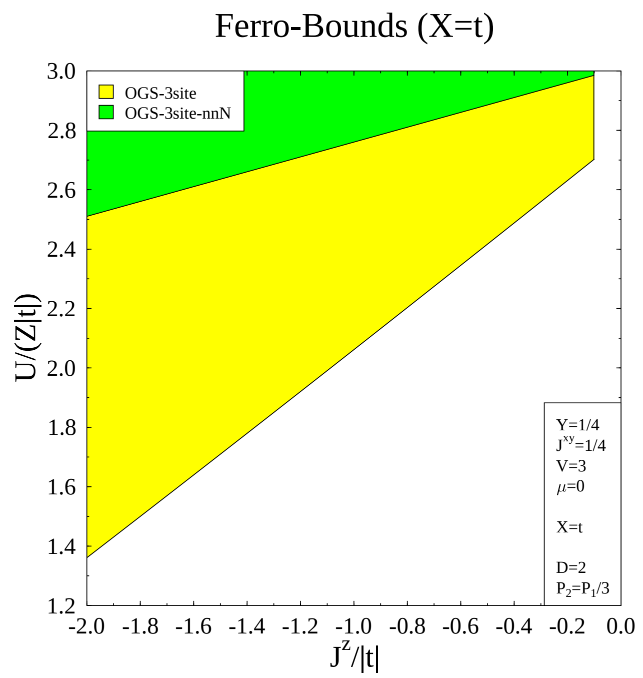


Abbildung 4.9: *Ein Vergleich zwischen* nN-*Wechselwirkung und* nnN-*Wechselwirkung des voll-polarisierten ferromagnetischen Grundzustandes für den $U - t$-Schnitt.*

in *Abbildung* 4.10 eine Vergrößerung des Stabilitätsbereiches. Das unsymmetrische Verhalten der Grenzen beim *Three-Site*-Hamiltonian ist natürlich auch hier festzustellen, so daß zumindest für den $U - t$-Schnitt ein numerisches Resultat einbezogen wurde. Ferner kann gezeigt werden, daß ein zusätzlicher Term t_2, der hier mit $t_2 = t_1/3$ in die Berechnung eingegangen ist, den Bereich des ferromagnetischen Grundzustandes verkleinert. Damit wird das Ergebnis von FARKAŠOVSKÝ *et al.* (eingeschränkt) bestätigt.



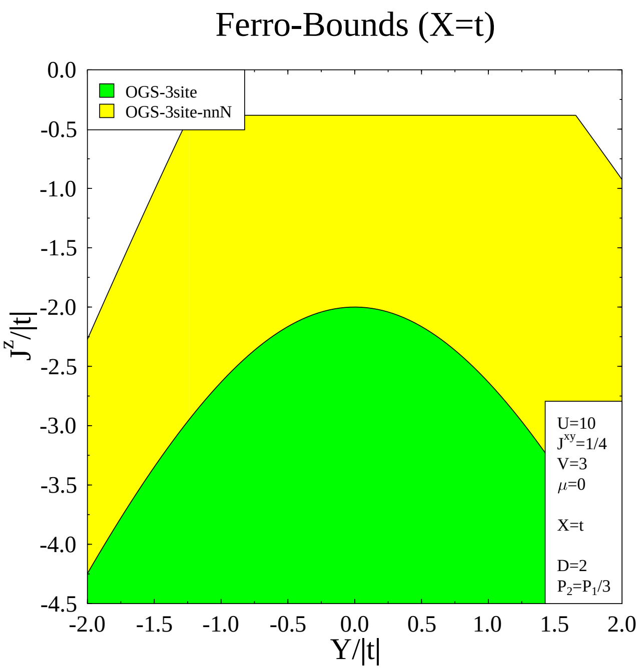


Abbildung 4.10: *Ein Vergleich zwischen* nN-*Wechselwirkung und* nnN-*Wechselwirkung des voll-polarisierten ferromagnetischen Grundzustandes in verschiedenen Parameterregimen.*

Kapitel 5

Schlußbetrachtungen

5.1 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden exakte Grundzustände für verallgemeinerte Hubbard-Modelle untersucht. Dabei wurde zunächst das „reine" Hubbard-Modell auf das verallgemeinerte Modell erweitert, indem zusätzlich zu den Termen t und U die Terme V, X, Y, J^z, J^{xy} und μ einbezogen wurden. Damit vergrößerte sich der Parameterraum von zwei auf acht Dimensionen. Zudem wurden, im Hinblick auf die Untersuchung der Zustände, das *Gerschgorin-Theorem*, die *Strack-Vollhardt-Methode* und der *Optimum-Grundzustand-Ansatz* vorgestellt, wovon sich das letztgenannte Verfahren als das beste erwiesen hat, da es einfacher als die anderen ist, und zudem die größten Stabilitätsbereiche liefert.
Mittels analytischer Rechnungen konnte gezeigt werden, daß eine lokale Erweiterung von zwei auf drei bzw. vier Gitterpunkte eine Vergrößerung des Stabilitätsbereiches zufolge hat. Dabei hat man eine „schnelle Konvergenz" der Grenzen registriert. Außerdem wurde die Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung berücksichtigt, wodurch neue Erkenntnisse zum jeweiligen Zustand gewonnen werden konnten. Beispielsweise wurde beim „η-pairing"-Zustand gezeigt, daß sowohl Y_1, als auch Y_2 für die Stabilisierung des Zustandes verantwortlich sind. Die Reduzierung des 14-parametrigen Raumes erfolgte zunächst durch die Berücksichtigung, daß

nnN-Wechselwirkungen schwächer als ihre komplementären *nN*-Wechselwirkungen sind, wodurch man, mittels eines Verhältnisses der jeweiligen Parameter, den Raum auf insgesamt acht Parameter verkleinern konnte. Bei der Untersuchung von „η-pairing“ als Eigenzustand ergaben sich weitere Einschränkungen, nämlich die Bedingungen $X = t$ und $2V = Y$ (für $P = 0$). Durch die Festlegung der lokalen Grundzustandsenergie resultierte die Bedingung $\mu = 0$, womit sich der Parameterraum auf fünf Dimensionen reduzierte. Dagegen ergab sich aus der Untersuchung des ferromagnetischen Zustandes keine Einschränkung. Die Bedingung $X = t$ wurde gesetzt, da sonst die Matrix nicht analytisch diagonalisierbar wäre. Folglich ergab sich hier (mit $\mu = 0$) ein sechsparametriger Raum.
In Abbildung 5.1 ist ein $U-t$-Phasendiagramm des Hubbard-Models illustriert. Die beiden Phasen werden aus den untersuchten Zuständen gebildet. Wie man sieht, hat man mit den hier betrachteten Zuständen den Grundzustand in einem großen Bereich des Parameterraumes gefunden.

5.2 Offene Fragen und Ausblicke

Das betrachtete Modell hat, insbesondere mit *nnN*-Wechselwirkung, sehr viele Parameter. Deshalb konnten nur exemplarische Ergebnisse präsentiert werden. Es existieren sicher noch eine Reihe weiterer interessanter Fragestellungen, die sich mit den Resultaten dieser Arbeit untersuchen lassen. Ferner könnte man weitere Zustände, wie den *Charge-Density-Wave*-Zustand oder den Néelzustand, untersuchen. Interessant wäre auch zu erfahren, ob durch die Diagonalisierung von weiteren *Cluster-Größen* eine Gesetzmäßigkeit für das Konvergenzverhalten der Stabilitätsbereiche gegeben werden kann, wodurch Rückschlüsse auf den maximalen Bereich gezogen werden können. Hierbei ist allerdings die analytische Untersuchung an ihre Grenzen gestoßen. Es zeigte sich bereits im Fall der Plaquette, für die eine 256×256-Matrix zu diagonalisieren war, daß nur für $X = t$ und ohne *nnN*-Terme die Rechnungen fortgeführt werden konnten. Eine Alternative bietet hier die numerische Diagonalisierung. Man hat hier ledig-

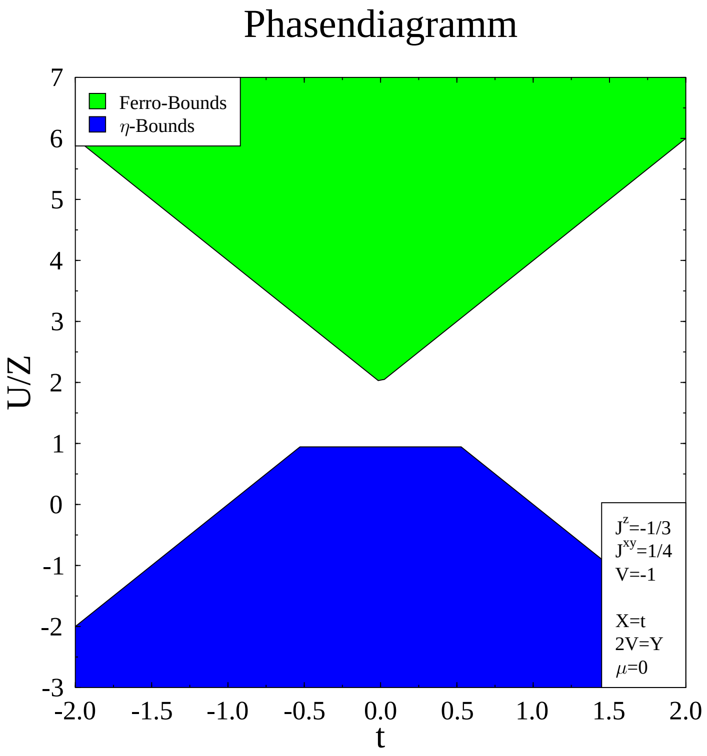


Abbildung 5.1: *Phasendiagramm des verallgemeinerten Hubbard-Modells.*

lich die Rechenzeit, die mit steigender *Cluster*-Größe wächst, als Hindernis gegeben. Weiterhin könnte man andere Modelle, wie z.B. das *Emery-Modell* oder das *Anderson-Modell*, in Betracht ziehen. Eine andere interessante Aufgabe würden *Leitersysteme*, insbesondere die *Hubbard-Leitern*, bieten. Zudem ist das Interesse an der $SO(5)$-*Symmetrie*, die die Vereinigung von Supraleitung und Antiferromagnetismus ermöglicht, in letzter Zeit stark gewachsen. Dadurch bietet sich die Möglichkeit an, neue Zustände, z.B. mit Hilfe des Matrix-Produkt-Ansatzes, zu konstruieren.

Anhang A

A.1 Kommutator-Algebra

Hier stehen einige hilfreiche Kommutator-Relationen von Fermi-Operatoren, d.h. von Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren.

- $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ und $[\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$

- $\hat{c}_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma'} = -\hat{c}_{j\sigma'}\hat{c}_{i\sigma}$
- $\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}^\dagger_{j\sigma'} = -\hat{c}^\dagger_{j\sigma'}\hat{c}^\dagger_{i\sigma}$
- $\hat{c}_{i\sigma}\hat{c}^\dagger_{j\sigma'} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'} - \hat{c}^\dagger_{j\sigma'}\hat{c}_{i\sigma}$

- $[\hat{c}_{i\sigma}, \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}] = \delta_{ki}\delta_{\sigma\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow} - \delta_{ki}\delta_{\sigma\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}$
- $[\hat{n}_{i\sigma}, \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}] = [\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{i\sigma}, \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}] = \delta_{ki}\delta_{\sigma\downarrow}\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow} - \delta_{ki}\delta_{\sigma\uparrow}\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}$
- $[\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma}, \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}] = \delta_{kj}\delta_{\sigma\downarrow}\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow} - \delta_{kj}\delta_{\sigma\uparrow}\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}$
- $[\hat{n}_{i\sigma}\hat{n}_{j\sigma'}, \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}] = \hat{n}_{i\sigma}[\hat{n}_{j\sigma'}, \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}] + [\hat{n}_{i\sigma}, \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}]\hat{n}_{j\sigma'}$
- $[\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma}\hat{n}_{i\sigma'}, \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}] = \hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma}[\hat{n}_{i\sigma'}, \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}] + [\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma}, \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}]\hat{n}_{i\sigma'}$
- $[\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma}\hat{n}_{j\sigma'}, \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}] = \hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma}[\hat{n}_{j\sigma'}, \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}] + [\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma}, \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}]\hat{n}_{j\sigma'}$
- $[\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma}, \hat{c}^\dagger_{k\downarrow}\hat{c}^\dagger_{k\uparrow}] = -[\hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma}, \hat{c}^\dagger_{k\uparrow}\hat{c}^\dagger_{k\downarrow}]$

A.2 Hubbard-Operatoren

Es ist oft praktisch, den lokalen Hamiltonoperator mittels der sogenannten *Hubbard-Operatoren* auszudrücken, da dadurch die lokalen Zustände bequemer zu berechnen sind. Die Wirkungsweise dieser Operatoren ist in folgender Abbildung am Beispiel $\chi^{\downarrow\uparrow}$ illustriert. Um die Darstellung des Hamiltonians zu ändern, müssen

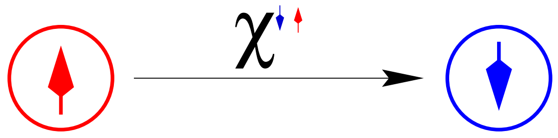


Abbildung A.1: *Das Verhalten des Hubbard-Operators* $\chi^{\downarrow\uparrow}$

die Fermiteilchen-Operatoren $\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}$ und $\hat{c}_{i\sigma}$ transformiert werden:

$$\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma} = \chi_i^{\sigma 0} + \sigma \chi_i^{2,-\sigma}, \quad \hat{c}_{i\sigma} = \chi_i^{0\sigma} + \sigma \chi_i^{-\sigma 2}, \quad \hat{n}_{i\sigma} = \chi_i^{\sigma\sigma} + \chi_i^{22}.$$

Eine Rücktransformation ist durch

$$\begin{aligned} \chi_i^{\sigma 0} &= (1 - \hat{n}_{i,-\sigma})\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma} & \qquad \chi_i^{2,-\sigma} &= \hat{n}_{i,-\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma} \\ \chi_i^{\sigma\sigma} &= (1 - \hat{n}_{i,-\sigma})\hat{n}_{i\sigma} & \qquad \chi_i^{00} &= (1 - \hat{n}_{i\downarrow})(1 - \hat{n}_{i\uparrow}) \end{aligned}$$

gegeben. Somit kann der lokale *Bond*-Hamiltonoperator in der Form

$$\begin{aligned} h_{ij} = &- t \sum_\sigma (\chi_i^{\sigma 0}\chi_j^{0\sigma} + \chi_j^{\sigma 0}\chi_i^{0\sigma}) \\ &+ (2X - t) \sum_\sigma (\chi_i^{2,-\sigma}\chi_j^{-\sigma 2} + \chi_j^{2,-\sigma}\chi_i^{-\sigma 2}) \\ &+ (X - t) \sum_\sigma \sigma(\chi_i^{\sigma 0}\chi_j^{-\sigma 2} + \chi_i^{2,-\sigma}\chi_j^{0\sigma} + \chi_j^{2,-\sigma}\chi_i^{0\sigma} + \chi_j^{\sigma 0}\chi_i^{-\sigma 2}) \\ &+ Y(\chi_i^{20}\chi_j^{02} + \chi_j^{20}\chi_i^{02}) \\ &- \left(\frac{y}{Z} + V + \frac{U}{2Z}\right)\left(2\chi_i^{22} + 2\chi_j^{22} + \sum_\sigma(\chi_i^{\sigma\sigma} + \chi_j^{\sigma\sigma})\right) \\ &+ \frac{U}{Z}(\chi_i^{22} + \chi_j^{22}) + V_\alpha + \frac{U}{2Z} \\ &+ \frac{J^z}{4}\sum_\sigma(\chi_i^{\sigma\sigma}\chi_j^{\sigma\sigma} - \chi_i^{\sigma\sigma}\chi_j^{-\sigma,-\sigma}) + \frac{J^{xy}}{2}\sum_\sigma \chi_i^{\sigma,-\sigma}\chi_j^{-\sigma\sigma} \end{aligned}$$

geschrieben werden.

A.3 64-dimensionaler Hilbertraum

Hier sind die lokalen Schrödinger-Gleichungen des 64-dimensionalen Hilbertraumes zusammengefaßt. Die Reihenfolge wurde nach der lokalen Teilchenzahldichte (mit Ausnahme der Eigenzustände, die die ersten drei Gleichungen bilden) gewählt. Die markierten Terme entfallen für den Fall $X = t$.

$$\begin{aligned}
h_{ijk}|000\rangle &= \left(V_1 + V_2 + \frac{U}{2Z_1}\right)|000\rangle \\
h_{ijk}|\sigma\sigma\sigma\rangle &= \left(\frac{J_1^z}{4} + \frac{J_2^z}{4} - \frac{U}{2Z_1} - \frac{2\mu}{Z_1}\right)|\sigma\sigma\sigma\rangle \\
h_{ijk}|222\rangle &= \left(V_1 + V_2 + \frac{U}{2Z_1} - \frac{4\mu}{Z_1}\right)|222\rangle \\
h_{ijk}|00\sigma\rangle &= \left(\frac{V_1}{2} + \frac{U}{4Z_1} - \frac{\mu}{2Z_1}\right)|00\sigma\rangle - \frac{t_1}{2}|0\sigma0\rangle - t_2|\sigma00\rangle \\
h_{ijk}|0\sigma0\rangle &= \left(V_2 - \frac{\mu}{Z_1}\right)|0\sigma0\rangle - \frac{t_1}{2}(|\sigma00\rangle + |00\sigma\rangle) \\
h_{ijk}|\sigma00\rangle &= \left(\frac{V_1}{2} + \frac{U}{4Z_1} - \frac{\mu}{2Z_1}\right)|\sigma00\rangle - \frac{t_1}{2}|0\sigma0\rangle - t_2|00\sigma\rangle \\
h_{ijk}|002\rangle &= \left(-V_2 + \frac{U}{2Z_1} - \frac{\mu}{Z_1}\right)|002\rangle + \frac{Y_1}{2}|020\rangle + Y_2|200\rangle \\
&\quad -\frac{X_1 - t_1}{2}(|0\downarrow\uparrow\rangle - |0\uparrow\downarrow\rangle) - (X_2 - t_2)(|\downarrow 0\uparrow\rangle - |\uparrow 0\downarrow\rangle) \\
h_{ijk}|020\rangle &= \left(-V_1 + V_2 + \frac{U}{2Z_1} - \frac{2\mu}{Z_1}\right)|020\rangle + \frac{Y_1}{2}(|200\rangle + |002\rangle) \\
&\quad -\frac{X_1 - t_1}{2}(|\downarrow\uparrow 0\rangle - |\uparrow\downarrow 0\rangle - |0\downarrow\uparrow\rangle + |0\uparrow\downarrow\rangle) \\
h_{ijk}|200\rangle &= \left(-V_2 + \frac{U}{2Z_1} - \frac{\mu}{Z_1}\right)|200\rangle + \frac{Y_1}{2}|020\rangle + Y_2|002\rangle \\
&\quad -\frac{X_1 - t_1}{2}(|\uparrow\downarrow 0\rangle - |\downarrow\uparrow 0\rangle) - (X_2 - t_2)(|\uparrow 0\downarrow\rangle - |\downarrow 0\uparrow\rangle) \\
h_{ijk}|\sigma\sigma0\rangle &= \left(\frac{J_1^z}{8} - \frac{U}{4Z_1} - \frac{3\mu}{2Z_1}\right)|\sigma\sigma0\rangle - \frac{t_1}{2}|\sigma0\sigma\rangle - t_2|0\sigma\sigma\rangle \\
h_{ijk}|\sigma0\sigma\rangle &= \left(\frac{J_2^z}{4} - \frac{\mu}{Z_1}\right)|\sigma0\sigma\rangle - \frac{t_1}{2}(|0\sigma\sigma\rangle + |\sigma\sigma0\rangle) \\
h_{ijk}|0\sigma\sigma\rangle &= \left(\frac{J_1^z}{8} - \frac{U}{4Z_1} - \frac{3\mu}{2Z_1}\right)|0\sigma\sigma\rangle - \frac{t_1}{2}|\sigma0\sigma\rangle - t_2|\sigma\sigma0\rangle
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
h_{ijk}|\uparrow\downarrow 0\rangle &= \left(-\frac{J_1^z}{8}-\frac{U}{4Z_1}-\frac{3\mu}{2Z_1}\right)|\uparrow\downarrow 0\rangle+\frac{J_1^{xy}}{4}|\downarrow\uparrow 0\rangle-\frac{t_1}{2}|\uparrow 0\downarrow\rangle-t_2|0\downarrow\uparrow\rangle \\
&\quad -\frac{X_1-t_1}{2}(|200\rangle-|020\rangle) \\
h_{ijk}|\downarrow\uparrow 0\rangle &= \left(-\frac{J_1^z}{8}-\frac{U}{4Z_1}-\frac{3\mu}{2Z_1}\right)|\downarrow\uparrow 0\rangle+\frac{J_1^{xy}}{4}|\uparrow\downarrow 0\rangle-\frac{t_1}{2}|\downarrow 0\uparrow\rangle-t_2|0\uparrow\downarrow\rangle \\
&\quad -\frac{X_1-t_1}{2}(|020\rangle-|200\rangle) \\
h_{ijk}|\uparrow 0\downarrow\rangle &= \left(-\frac{J_2^z}{4}-\frac{\mu}{Z_1}\right)|\uparrow 0\downarrow\rangle+\frac{J_2^{xy}}{2}|\downarrow 0\uparrow\rangle-\frac{t_1}{2}(|0\uparrow\downarrow\rangle+|\uparrow\downarrow 0\rangle) \\
&\quad -(X_2-t_2)(|200\rangle-|002\rangle) \\
h_{ijk}|\downarrow 0\uparrow\rangle &= \left(-\frac{J_2^z}{4}-\frac{\mu}{Z_1}\right)|\downarrow 0\uparrow\rangle+\frac{J_2^{xy}}{2}|\uparrow 0\downarrow\rangle-\frac{t_1}{2}(|0\downarrow\uparrow\rangle+|\downarrow\uparrow 0\rangle) \\
&\quad -(X_2-t_2)(|002\rangle-|200\rangle) \\
h_{ijk}|0\uparrow\downarrow\rangle &= \left(-\frac{J_1^z}{8}-\frac{U}{4Z_1}-\frac{3\mu}{2Z_1}\right)|0\uparrow\downarrow\rangle+\frac{J_1^{xy}}{4}|0\downarrow\uparrow\rangle-\frac{t_1}{2}|\uparrow 0\downarrow\rangle-t_2|\downarrow\uparrow 0\rangle \\
&\quad -\frac{X_1-t_1}{2}(|020\rangle-|002\rangle) \\
h_{ijk}|0\downarrow\uparrow\rangle &= \left(-\frac{J_1^z}{8}-\frac{U}{4Z_1}-\frac{3\mu}{2Z_1}\right)|0\downarrow\uparrow\rangle+\frac{J_1^{xy}}{4}|0\uparrow\downarrow\rangle-\frac{t_1}{2}|\downarrow 0\uparrow\rangle-t_2|\uparrow\downarrow 0\rangle \\
&\quad -\frac{X_1-t_1}{2}(|002\rangle-|020\rangle) \\
h_{ijk}|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle &= \left(-\frac{J_2^z}{4}-\frac{U}{2Z_1}-\frac{2\mu}{Z_1}\right)|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle+\frac{J_1^{xy}}{4}|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle+\frac{J_2^{xy}}{2}|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\
&\quad -\frac{X_1-t_1}{2}(|\uparrow 20\rangle-|\uparrow 02\rangle)-(X_2-t_2)(|2\uparrow 0\rangle-|0\uparrow 2\rangle) \\
h_{ijk}|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle &= \left(-\frac{J_2^z}{4}-\frac{U}{2Z_1}-\frac{2\mu}{Z_1}\right)|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle+\frac{J_1^{xy}}{4}|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle+\frac{J_2^{xy}}{2}|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\
&\quad -\frac{X_1-t_1}{2}(|\downarrow 02\rangle-|\downarrow 20\rangle)-(X_2-t_2)(|0\downarrow 2\rangle-|2\downarrow 0\rangle) \\
h_{ijk}|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle &= \left(-\frac{J_1^z}{4}+\frac{J_2^z}{4}-\frac{U}{2Z_1}-\frac{2\mu}{Z_1}\right)|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle+\frac{J_1^{xy}}{4}(|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle+|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) \\
&\quad -\frac{X_1-t_1}{2}(|20\uparrow\rangle)-|02\uparrow\rangle-|\uparrow 20\rangle+|\uparrow 02\rangle) \\
h_{ijk}|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle &= \left(-\frac{J_1^z}{4}+\frac{J_2^z}{4}-\frac{U}{2Z_1}-\frac{2\mu}{Z_1}\right)|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle+\frac{J_1^{xy}}{4}(|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle+|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle) \\
&\quad -\frac{X_1-t_1}{2}(|02\downarrow\rangle-|20\downarrow\rangle)+|\downarrow 20\rangle-|\downarrow 02\rangle)
\end{aligned}
$$

$$\begin{aligned}
h_{ijk}|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle &= \left(-\frac{J_2^z}{4}-\frac{U}{2Z_1}-\frac{2\mu}{Z_1}\right)|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle+\frac{J_1^{xy}}{4}|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle+\frac{J_2^{xy}}{2}|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle\\
&\quad -\frac{X_1-t_1}{2}(|02\uparrow\rangle-|20\uparrow\rangle)-(X_2-t_2)(|0\uparrow 2\rangle-|2\uparrow 0\rangle)\\
h_{ijk}|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle &= \left(-\frac{J_2^z}{4}-\frac{U}{2Z_1}-\frac{2\mu}{Z_1}\right)|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle+\frac{J_1^{xy}}{4}|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle+\frac{J_2^{xy}}{2}|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle\\
&\quad -\frac{X_1-t_1}{2}(|20\downarrow\rangle-|02\downarrow\rangle)-(X_2-t_2)(|2\downarrow 0\rangle-|0\downarrow 2\rangle)\\
h_{ijk}|02\sigma\rangle &= \left(-\frac{V_1}{2}+\frac{U}{4Z_1}-\frac{5\mu}{2Z_1}\right)|02\sigma\rangle+\frac{Y_1}{2}|20\sigma\rangle-\left(X_1-\frac{t_1}{2}\right)|0\sigma 2\rangle-t_2|\sigma 20\rangle\\
&\quad -\frac{X_1-t_1}{2}(|\downarrow\uparrow\sigma\rangle)-|\uparrow\downarrow\sigma\rangle)\\
h_{ijk}|0\sigma 2\rangle &= \left(-V_2-\frac{2\mu}{Z_1}\right)|0\sigma 2\rangle+Y_2|2\sigma 0\rangle-\frac{t_1}{2}|\sigma 02\rangle-\left(X_1-\frac{t_1}{2}\right)|02\sigma\rangle\\
&\quad -(X_2-t_2)(|\downarrow\sigma\uparrow\rangle-|\uparrow\sigma\downarrow\rangle)\\
h_{ijk}|\sigma 02\rangle &= \left(-\frac{V_1}{2}+\frac{U}{4Z_1}-\frac{3\mu}{2Z_1}\right)|\sigma 02\rangle+\frac{Y_1}{2}|\sigma 20\rangle-(2X_2-t_2)|20\sigma\rangle-\frac{t_1}{2}|0\sigma 2\rangle\\
&\quad -\frac{X_1-t_1}{2}(|\sigma\downarrow\uparrow\rangle-|\sigma\uparrow\downarrow\rangle)\\
h_{ijk}|\sigma 20\rangle &= \left(-\frac{V_1}{2}+\frac{U}{4Z_1}-\frac{5\mu}{2Z_1}\right)|\sigma 20\rangle+\frac{Y_1}{2}|\sigma 02\rangle-\left(X_1-\frac{t_1}{2}\right)|2\sigma 0\rangle-t_2|02\sigma\rangle\\
&\quad -\frac{X_1-t_1}{2}(|\sigma\uparrow\downarrow\rangle-|\sigma\downarrow\uparrow\rangle)\\
h_{ijk}|20\sigma\rangle &= \left(-\frac{V_1}{2}+\frac{U}{4Z_1}-\frac{3\mu}{2Z_1}\right)|20\sigma\rangle+\frac{Y_1}{2}|02\sigma\rangle-(2X_2-t_2)|\sigma 02\rangle-\frac{t_1}{2}|2\sigma 0\rangle\\
&\quad -\frac{X_1-t_1}{2}(|\uparrow\downarrow\sigma\rangle-|\downarrow\uparrow\sigma\rangle)\\
h_{ijk}|2\sigma 0\rangle &= \left(-V_2-\frac{2\mu}{Z_1}\right)|2\sigma 0\rangle+Y_2|0\sigma 2\rangle-\left(X_1-\frac{t_1}{2}\right)|\sigma 20\rangle-\frac{t_1}{2}|20\sigma\rangle\\
&\quad -(X_2-t_2)(|\uparrow\sigma\downarrow\rangle-|\downarrow\sigma\uparrow\rangle)\\
h_{ijk}|\uparrow\downarrow 2\rangle &= \left(-\frac{J_1^z}{8}-\frac{U}{4Z_1}-\frac{5\mu}{2Z_1}\right)|\uparrow\downarrow 2\rangle+\frac{J_1^{xy}}{4}|\downarrow\uparrow 2\rangle\\
&\quad -\left(X_1-\frac{t_1}{2}\right)|\uparrow 2\downarrow\rangle-(2X_2-t_2)|2\downarrow\uparrow\rangle-\frac{X_1-t_1}{2}(|202\rangle-|022\rangle)\\
h_{ijk}|\downarrow\uparrow 2\rangle &= \left(-\frac{J_1^z}{8}-\frac{U}{4Z_1}-\frac{5\mu}{2Z_1}\right)|\downarrow\uparrow 2\rangle+\frac{J_1^{xy}}{4}|\uparrow\downarrow 2\rangle\\
&\quad -\left(X_1-\frac{t_1}{2}\right)|\downarrow 2\uparrow\rangle-(2X_2-t_2)|2\uparrow\downarrow\rangle-\frac{X_1-t_1}{2}(|022\rangle-|202\rangle)\\
h_{ijk}|\uparrow 2\downarrow\rangle &= \left(-\frac{J_2^z}{4}-\frac{3\mu}{Z_1}\right)|\uparrow 2\downarrow\rangle+\frac{J_2^{xy}}{2}|\downarrow 2\uparrow\rangle\\
&\quad -\left(X_1-\frac{t_1}{2}\right)(|\uparrow\downarrow 2\rangle+|2\uparrow\downarrow\rangle)-(X_2-t_2)(|220\rangle-|022\rangle)
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
h_{ijk}|\downarrow 2\uparrow\rangle &= \left(-\frac{J_2^z}{4}-\frac{3\mu}{Z_1}\right)|\downarrow 2\uparrow\rangle+\frac{J_2^{xy}}{2}|\uparrow 2\downarrow\rangle \\
&\quad -\left(X_1-\frac{t_1}{2}\right)(|\downarrow\uparrow 2\rangle+|2\downarrow\uparrow\rangle)-(X_2-t_2)(|022\rangle-|220\rangle) \\
h_{ijk}|2\uparrow\downarrow\rangle &= \left(-\frac{J_1^z}{8}-\frac{U}{4Z_1}-\frac{5\mu}{2Z_1}\right)|2\uparrow\downarrow\rangle+\frac{J_1^{xy}}{4}|2\downarrow\uparrow\rangle \\
&\quad -\left(X_1-\frac{t_1}{2}\right)|\uparrow 2\downarrow\rangle-(2X_2-t_2)|\downarrow\uparrow 2\rangle-\frac{X_1-t_1}{2}(|220\rangle-|202\rangle) \\
h_{ijk}|2\downarrow\uparrow\rangle &= \left(-\frac{J_1^z}{8}-\frac{U}{4Z_1}-\frac{5\mu}{2Z_1}\right)|2\downarrow\uparrow\rangle+\frac{J_1^{xy}}{4}|2\uparrow\downarrow\rangle \\
&\quad -\left(X_1-\frac{t_1}{2}\right)|\downarrow 2\uparrow\rangle-(2X_2-t_2)|\uparrow\downarrow 2\rangle-\frac{X_1-t_1}{2}(|202\rangle-|220\rangle) \\
h_{ijk}|220\rangle &= \left(-V_2+\frac{U}{2Z_1}-\frac{3\mu}{Z_1}\right)|220\rangle+\frac{Y_1}{2}|202\rangle+Y_2|022\rangle \\
&\quad -\frac{X_1-t_1}{2}(|2\uparrow\downarrow\rangle-|2\downarrow\uparrow\rangle)-(X_2-t_2)(|\uparrow 2\downarrow\rangle-|\downarrow 2\uparrow\rangle) \\
h_{ijk}|202\rangle &= \left(-V_1+V_2+\frac{U}{2Z_1}-\frac{2\mu}{Z_1}\right)|202\rangle+\frac{Y_1}{2}(|022\rangle+|220\rangle) \\
&\quad -\frac{X_1-t_1}{2}(|\uparrow\downarrow 2\rangle-|\downarrow\uparrow 2\rangle+|2\downarrow\uparrow\rangle-|2\uparrow\downarrow\rangle) \\
h_{ijk}|022\rangle &= \left(-V_2+\frac{U}{2Z_1}-\frac{3\mu}{Z_1}\right)|022\rangle+\frac{Y_1}{2}|202\rangle+Y_2|220\rangle \\
&\quad -\frac{X_1-t_1}{2}(|\downarrow\uparrow 2\rangle-|\uparrow\downarrow 2\rangle)-(X_2-t_2)(|\downarrow 2\uparrow\rangle-|\uparrow 2\downarrow\rangle) \\
h_{ijk}|2\sigma\sigma\rangle &= \left(\frac{J_1^z}{8}-\frac{U}{4Z_1}-\frac{5\mu}{2Z_1}\right)|2\sigma\sigma\rangle-\left(X_1-\frac{t_1}{2}\right)|\sigma 2\sigma\rangle-(2X_2-t_2)|\sigma\sigma 2\rangle \\
h_{ijk}|\sigma 2\sigma\rangle &= \left(\frac{J_2^z}{4}-\frac{3\mu}{Z_1}\right)|\sigma 2\sigma\rangle-\left(X_1-\frac{t_1}{2}\right)(|2\sigma\sigma\rangle+|\sigma\sigma 2\rangle) \\
h_{ijk}|\sigma\sigma 2\rangle &= \left(\frac{J_1^z}{8}-\frac{U}{4Z_1}-\frac{5\mu}{2Z_1}\right)|\sigma\sigma 2\rangle-\left(X_1-\frac{t_1}{2}\right)|\sigma 2\sigma\rangle-(2X_2-t_2)|2\sigma\sigma\rangle \\
h_{ijk}|22\sigma\rangle &= \left(\frac{V_1}{2}+\frac{U}{4Z_1}-\frac{7\mu}{2Z_1}\right)|22\sigma\rangle-\left(X_1-\frac{t_1}{2}\right)|2\sigma 2\rangle-(2X_2-t_2)|\sigma 22\rangle \\
h_{ijk}|2\sigma 2\rangle &= \left(V_2-\frac{3\mu}{Z_1}\right)|2\sigma 2\rangle-\left(X_1-\frac{t_1}{2}\right)(|22\sigma\rangle+|\sigma 22\rangle) \\
h_{ijk}|\sigma 22\rangle &= \left(\frac{V_1}{2}+\frac{U}{4Z_1}-\frac{7\mu}{2Z_1}\right)|\sigma 22\rangle-\left(X_1-\frac{t_1}{2}\right)|2\sigma 2\rangle-(2X_2-t_2)|22\sigma\rangle
\end{aligned}
$$

A.4 256-dimensionaler Hilbertraum

Hier sind die verschiedenen Diagonaleinträge der 256×256-Matrix zusammengefaßt, wobei nur die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung berücksichtigt wurde. Die Numerierung weist auf die Anzahl der Untermatrizen hin.

- 1×1-Matrizen

$$\begin{aligned}
&\text{Nr. 1} && d := \langle 0000|h_{ijkl}|0000\rangle = 2V + \frac{U}{Z} \\
&\text{Nr. 2,3} && d := \langle \sigma\sigma\sigma\sigma|h_{ijkl}|\sigma\sigma\sigma\sigma\rangle = \frac{J^z}{2} - \frac{U}{Z} - \frac{4\mu}{Z} \\
&\text{Nr. 4} && d := \langle 2222|h_{ijkl}|2222\rangle = 2V + \frac{U}{Z} - \frac{8\mu}{Z}
\end{aligned}$$

- 4×4-Matrizen

$$\begin{aligned}
&\text{Nr. 1,2} && d^{(a)} := \langle 000\sigma|h_{ijkl}|000\sigma\rangle = V + \frac{U}{2Z} - \frac{\mu}{Z} \\
&\text{Nr. 3,4} && d^{(a)} := \langle 0\sigma\sigma\sigma|h_{ijkl}|0\sigma\sigma\sigma\rangle = \frac{J^z}{4} - \frac{U}{2Z} - \frac{3\mu}{Z} \\
&\text{Nr. 5,6} && d^{(a)} := \langle \sigma\sigma\sigma 2|h_{ijkl}|\sigma\sigma\sigma 2\rangle = \frac{J^z}{4} - \frac{U}{2Z} - \frac{5\mu}{Z} \\
&\text{Nr. 7,8} && d^{(a)} := \langle \sigma 222|h_{ijkl}|\sigma 222\rangle = V + \frac{U}{2Z} - \frac{7\mu}{2Z} \\
&\text{Nr. 9} && d^{(b)} := \langle 0002|h_{ijkl}|0002\rangle = \frac{U}{Z} - \frac{2\mu}{Z} \\
&\text{Nr. 10} && d^{(b)} := \langle 0222|h_{ijkl}|0222\rangle = \frac{U}{Z} - \frac{6\mu}{Z}
\end{aligned}$$

- 6×6-Matrizen

$$\begin{aligned}
&\text{Nr. 1,2} && d_1^{(a)} := \langle 00\sigma\sigma|h_{ijkl}|00\sigma\sigma\rangle = \frac{V}{2} + \frac{J^z}{8} - \frac{2\mu}{Z} \\
& && d_2^{(a)} := \langle 0\sigma 0\sigma|h_{ijkl}|0\sigma 0\sigma\rangle = -\frac{2\mu}{Z} \\
&\text{Nr. 3,4} && d_1^{(a)} := \langle \sigma\sigma 22|h_{ijkl}|\sigma\sigma 22\rangle = \frac{V}{2} + \frac{J^z}{8} - \frac{6\mu}{Z} \\
& && d_2^{(a)} := \langle \sigma 2\sigma 2|h_{ijkl}|\sigma 2\sigma 2\rangle = -\frac{6\mu}{Z} \\
&\text{Nr. 5} && d_1^{(b)} := \langle 0022|h_{ijkl}|0022\rangle = \frac{U}{Z} - \frac{4\mu}{Z} \\
& && d_2^{(b)} := \langle 0202|h_{ijkl}|0202\rangle = -2V + \frac{U}{Z} - \frac{4\mu}{Z}
\end{aligned}$$

- 12×12-Matrizen

$$\text{Nr. 1} \quad d_1^{(a)} := \langle 00\downarrow\uparrow|h_{ijkl}|00\downarrow\uparrow\rangle = \frac{V}{2} - \frac{J^z}{8} - \frac{2\mu}{Z}$$

$$d_2^{(a)} := \langle 0\downarrow 0\uparrow|h_{ijkl}|0\downarrow 0\uparrow\rangle = -\frac{2\mu}{Z}$$

$$\text{Nr. 2} \quad d_1^{(a)} := \langle\downarrow\uparrow 22|h_{ijkl}|\downarrow\uparrow 22\rangle = \frac{V}{2} - \frac{J^z}{8} - \frac{6\mu}{Z}$$

$$d_2^{(a)} := \langle\downarrow 2\uparrow 2|h_{ijkl}|\downarrow 2\uparrow 2\rangle = -\frac{6\mu}{Z}$$

$$\text{Nr. 3,4} \quad d_1^{(b)} := \langle 00\sigma 2|h_{ijkl}|00\sigma 2\rangle = \frac{U}{2Z} - \frac{3\mu}{Z}$$

$$d_2^{(b)} := \langle 0\sigma 02|h_{ijkl}|0\sigma 02\rangle = -V + \frac{U}{2Z} - \frac{3\mu}{Z}$$

$$\text{Nr. 5,6} \quad d_1^{(b)} := \langle 0\sigma\sigma 2|h_{ijkl}|0\sigma\sigma 2\rangle = -\frac{V}{2} + \frac{J^z}{8} - \frac{4\mu}{Z}$$

$$d_2^{(b)} := \langle 0\sigma 2\sigma|h_{ijkl}|0\sigma 2\sigma\rangle = -\frac{4\mu}{Z}$$

$$\text{Nr. 7,8} \quad d_1^{(c)} := \langle 0\sigma 22|h_{ijkl}|0\sigma 22\rangle = \frac{U}{2Z} - \frac{5\mu}{Z}$$

$$d_2^{(c)} := \langle \sigma 202|h_{ijkl}|\sigma 202\rangle = -V + \frac{U}{2Z} - \frac{5\mu}{Z}$$

- 14×14-Matrix

$$\text{Nr. 1} \quad d_1 := \langle\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow|h_{ijkl}|\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle = -\frac{U}{Z} - \frac{4\mu}{Z}$$

$$d_2 := \langle\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow|h_{ijkl}|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle = -\frac{J^z}{2} - \frac{U}{Z} - \frac{4\mu}{Z}$$

- 24×24-Matrizen

$$\text{Nr. 1} \quad d_1^{(a)} := \langle 0\downarrow\downarrow\uparrow|h_{ijkl}|0\downarrow\downarrow\uparrow\rangle = -\frac{U}{2Z} - \frac{3\mu}{Z}$$

$$d_2^{(a)} := \langle 0\downarrow\uparrow\downarrow|h_{ijkl}|0\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = -\frac{J^z}{4} - \frac{U}{2Z} - \frac{3\mu}{Z}$$

$$\text{Nr. 2} \quad d_1^{(a)} := \langle 2\downarrow\downarrow\uparrow|h_{ijkl}|2\downarrow\downarrow\uparrow\rangle = -\frac{U}{2Z} - \frac{5\mu}{Z}$$

$$d_2^{(a)} := \langle 2\downarrow\uparrow\downarrow|h_{ijkl}|2\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = -\frac{J^z}{4} - \frac{U}{2Z} - \frac{5\mu}{Z}$$

$$\text{Nr. 3} \quad d_1^{(b)} := \langle 0\downarrow\uparrow 2|h_{ijkl}|0\downarrow\uparrow 2\rangle = -\frac{V}{2} - \frac{J^z}{8} - \frac{4\mu}{Z}$$

$$d_2^{(b)} := \langle 0\downarrow 2\uparrow|h_{ijkl}|0\downarrow 2\uparrow\rangle = -\frac{4\mu}{Z}$$

Literaturverzeichnis

[1] J. Hubbard. *Proc. R. Soc. London*, **A 276**, 238, (1963).

[2] E. H. Lieb and F. Y. Wu. *Phys. Rev. Lett.*, **17**, 1133, (1966).

[3] U. Brandt and A. Giesekus. *Phys. Rev. Lett.*, **68**, 2648, (1992).

[4] R. Strack and D. Vollhardt. *Phys. Rev. Lett.*, **70**, 2637, (1993).

[5] R. Strack and D. Vollhardt. *Phys. Rev. Lett.*, **72**, 3425, (1994).

[6] A. A. Ovchinnikov. *J. Phys.*, **CM 6**, 11057, (1994).

[7] J. de Boer and A. Schadschneider. *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 4298, (1995).

[8] A. Klümper, A. Schadschneider, and J. Zittartz. *Europhys. Lett.*, **24**, 293, (1993).

[9] S. Kivelson, W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger. *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 1899, (1987).

[10] D. K. Campbell, J.Tinka Gammel, and Jr. E. Y. Loh. *Phys. Rev. B*, **38**, 12043, (1988).

[11] D. K. Campbell, J.Tinka Gammel, and Jr. E. Y. Loh. *Phys. Rev. B*, **42**, 475, (1990).

[12] J. E. Hirsch. *Phys. Rev. B*, **40**, 2354, (1989).

[13] J. Appel, M. Grodzicki, and F. Paulsen. *Phys. Rev. B*, **47**, 2812, (1993).

[14] R. G. Parr, D. P. Craig, and I. G. Ross. *J. Chem. Phys.*, **18**, 1561, (1950).

[15] D. Baeriswyl, P. Horsch, and K. Maki. *Phys. Rev. Lett.*, **60**, 70, (1988).

[16] N. D. Mermin and H. Wagner. *Phys. Rev. Lett.*, **17**, 1133, (1966).

[17] D. K. Gosh. *Phys. Rev. Lett.*, **27**, 1584, (1971).

[18] P. C. Hohenberg. *Phys. Rev.*, **158**, 383, (1967).

[19] G. Su, A. Schadschneider, and J. Zittartz. *Phys. Lett. A*, **230**, 99, (1997).

[20] P. W. Anderson. *Solid State Phys.*, **14**, 99, (1963).

[21] P. W. Anderson. *Science*, **235**, 1196, (1987).

[22] P. Schlottmann. *Phys. Rev. B*, **36**, 5177, (1987).

[23] P. A. Bares and G. Blatter. *Phys. Rev. Lett.*, **64**, 2567, (1990).

[24] E. H. Lieb. *Phys. Rev. Lett.*, **62**, 1201, Errata 1927, (1989).

[25] Y. Nagaoka. *Solid State Comm.*, **3**, 409, (1965).

[26] H. Tasaki. *Phys. Rev. B*, **40**, 9192, (1989).

[27] E. Müller-Hartmann. *J. Low Temp. Phys.*, **99**, 349, (1995).

[28] H. Tasaki. *J. Phys.*, **CM 10**, 4353, (1998).

[29] R. Zurmühl. *Matrizen.* Springer, Berlin, 1964.

[30] J. de Boer, V. E. Korepin, and A. Schadschneider. *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 789, (1995).

[31] A. Klümper, A. Schadschneider, and J. Zittartz. *Z. Phys. B*, **87**, 281, (1992).

[32] C. Lange, A. Klümper, and J. Zittartz. *Z. Phys. B*, **96**, 267, (1994).

[33] H. Niggemann and J. Zittartz. *Z. Phys. B*, **101**, 289, (1996).

[34] H. Niggemann, A. Klümper, and J. Zittartz. *Z. Phys. B*, **104**, 103, (1997).

[35] S. Albeverio and S. M. Fei. *Europhys. Lett.*, **41**, 665, (1998).

[36] E. Dagotto, J. Riera, and D. J. Scalapino. *Phys. Rev. B*, **45**, 5744, (1992).

[37] R. M. Noack, S. R. White, and D. J. Scalapino. *Europhys. Lett.*, **30**, 163, (1995).

[38] Z. Szabó. *cond-mat/9807083*, (1998).

[39] C. N. Yang. *Phys. Rev. Lett.*, **63**, 2144, (1989).

[40] C. N. Yang. *Rev. Mod. Phys.*, **34**, 694, (1962).

[41] C. A. Piguet, D. F. Wang, and C. Gruber. *J. Stat. Phys.*, **88**, 1363, (1997).

[42] A. Schadschneider. *Phys. Rev. B*, **51**, 10386, (1995).

[43] P. Farkašovský. *Int. J. Mod. Phys. B*, **12**, 803, (1997).

Danksagung

▷ Zunächst möchte ich mich bei Prof. Dr. J. Zittartz bedanken, der mir die Durchführung dieser Diplomarbeit ermöglicht hat.

▷ Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. A. Schadschneider für die hilfreiche Betreuung und Durchsicht meiner Arbeit.

▷ Außerdem bedanke ich mich bei Herrn Z. Szabó für die gute Zusammenarbeit und bei Herrn H. Niggemann für wertvolle physikalische Informationen, sowie für die „Vertex-Symbole".

▷ Weiterhin möchte ich meinen Zimmerkollegen und allen anderen Institutsangehörigen danken, die mir vor allem durch das freundliche Klima die Arbeit in schwierigen Phasen erleichtert haben.

▷ Natürlich sollen auch Bertram, Julia und Eva gewürdigt werden, die sich tatkräftig am Korrekturlesen beteiligt haben.

▷ Schließlich gilt mein besonderer Dank auch meinen Eltern, die mich während meines Studiums in jeder Hinsicht unterstützt haben.

Ich versichere, daß ich diese Diplomarbeit selbständig verfaßt und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet habe.

Köln, den 31. August 1998