



Universiteit Antwerpen  
Faculteit Wetenschappen  
Departement Fysica  
Academiejaar 2008-2009

Eindverhandeling voor het Masterdiploma

Een teloperatormethode voor analytische  
diagonalisatie van Hamiltonianen

*Auteur*  
Ben Anthonis

*Promotor*  
Prof. dr. Jan Naudts  
*Begeleider*  
Drs. Tobias Verhulst

## Samenvatting

In de moderne natuurkunde en meer specifiek de kwantummechanica worden fysische systemen beschreven door een wiskundig model waarin een Hamiltoniaan centraal staat. Het oplossen van het systeem correspondeert met het vinden van de eigenwaarden en eigentoestanden van deze Hamiltoniaan. In deze verhandeling wordt een analytische diagonalisatiemethode uitgewerkt die geen gebruik maakt van de symmetrie van het systeem. In plaats daarvan wordt gesteund op een veralgemening van de bekende ladderoperatoren uit de natuurkunde. Deze structuur staat toe dezelfde blokdiagonalisatie te bekomen als wanneer gebruik gemaakt wordt van de gemeenschappelijke symmetrieën van de Hamiltoniaan en de teloperator. Daarenboven biedt deze methode het voordeel dat de verschillende blokken allen een tridiagonaalvorm hebben. Dit uniforme wiskundig kader staat toe op eenvoudige wijze een aantal eigenschappen van het spectrum aan te tonen.

## Dankwoord

Graag wil ik een aantal mensen bedanken voor de rol die zij hebben gespeeld bij het tot stand komen van deze eindverhandeling.

Ik wil in de eerste plaats mijn promotor en begeleider, professor Jan Naudts en doctorandus Tobias Verhulst, bedanken. Net zoals tijdens het schrijven van mijn theoretische bachelorproef ervoer ik het samenwerken met hen als bijzonder aangenaam en vooral erg leerrijk.

Verder wil ik graag iedereen bedanken die deze verhandeling heeft nagelezen en raad heeft gegeven om de inhoud zo helder mogelijk te formuleren.

# Inhoudsopgave

<b>1</b>	<b>Inleiding</b>	<b>4</b>
1.1	Overzicht van de verhandeling . . . . .	4
1.2	Gebruikte notaties . . . . .	5
1.2.1	Algemeen . . . . .	5
1.2.2	Hogere orde commutatoren . . . . .	6
1.3	De harmonische oscillator . . . . .	7
1.4	De Dolan-Grady conditie . . . . .	9
1.5	Het Hubbard model . . . . .	10
1.5.1	De hopterm . . . . .	11
1.5.2	De interactieterm . . . . .	12
1.5.3	Spin . . . . .	13
1.5.4	Symmetrieën . . . . .	13
1.5.5	Systemen met half gevulde band . . . . .	14
<b>2</b>	<b>De diagonalisatiemethode</b>	<b>16</b>
2.1	Ladderoperatoren . . . . .	16
2.2	De hiërarchie . . . . .	19
2.3	De teloperatormethode . . . . .	23
2.3.1	Constructie van de eigentoestanden . . . . .	23
2.3.2	Toepassen van de diagonalisatiemethode . . . . .	25
2.4	Multipletten . . . . .	27
2.4.1	Definitie . . . . .	27
2.4.2	Eigenschappen . . . . .	28
<b>3</b>	<b>Toepassing</b>	<b>31</b>
3.1	Enkele eenvoudige voorbeelden . . . . .	31
3.1.1	De Pauli spin . . . . .	31
3.1.2	De harmonische oscillator . . . . .	32
3.1.3	Het Jaynes-Cummings model . . . . .	32
3.1.4	Supersymmetrische modellen . . . . .	33
3.1.5	Het transversaal Ising model . . . . .	34
3.1.6	Het Hubbard model . . . . .	34
3.2	De Hubbard ring met vier plaatsen . . . . .	35
3.3	De Hubbard ring met zes plaatsen . . . . .	42
<b>4</b>	<b>Besluit</b>	<b>47</b>

<b>A</b>	<b>Appendix</b>	<b>48</b>
A.1	De coëfficiënten $h_i$	48
A.2	De Hubbard ring met vier plaatsen	51
A.2.1	Tridiagonaalvorm van de Hamiltoniaan	51
A.2.2	De gebruikte basis	52
A.3	De Hubbard ring met zes plaatsen	55
A.3.1	Tridiagonaalvorm van de Hamiltoniaan	55
A.3.2	De gebruikte basis	56

# Hoofdstuk 1

## Inleiding

### 1.1 Overzicht van de verhandeling

De bedoeling van deze verhandeling is, gegeven een zelftoegevoegde operator  $H$  (Hamiltoniaan) met een discreet spectrum, om golffuncties  $\psi$  en getallen  $\varepsilon$  te vinden zodanig dat

$$H\psi = \varepsilon\psi. \quad (1.1)$$

Voor het vinden van eigenwaarden en eigenvectoren van lineaire operatoren bestaat reeds een algemeen bekend algoritme. De eigenwaarden  $\varepsilon$  zijn de nulpunten van de karakteristieke polynoom van  $H$ , gegeven door  $\det(H - \varepsilon)$  en de eigenruimte  $\mathcal{V}$  horend bij de eigenwaarde  $\varepsilon$  is de kern van de operator  $H - \varepsilon$ . Hoewel deze methode toestaat elke Hamiltoniaan numeriek te diagonaliseren, is het zo dat in het algemeen analytische oplossingen niet kunnen gevonden worden. Dit is een gevolg van het theorema van Abel dat stelt dat voor algemene polynomen van graad vijf of hoger de wortels niet als een analytische functie van de polynomiale coëfficiënten kunnen geschreven worden [1].

Een veelgebruikte methode om het factoriseren van de karakteristieke polynoom eenvoudiger te maken, is gebruik maken van de symmetrieën van de Hamiltoniaan, bijvoorbeeld [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]. De symmetriegroep van een systeem is echter niet altijd volledig gekend en een deel hiervan hangt af van de modelparameters.

In deze verhandeling zal de diagonalisatiemethode uit [9] en [10] verder worden uitgewerkt. Deze methode staat toe de eigenwaarden en eigentoestanden van Hamiltonianen te zoeken zonder de symmetrie van het bestudeerde systeem in rekening te brengen, hoewel dit nog steeds een vereenvoudiging kan betekenen. Hiertoe wordt de Hamiltoniaan geschreven als een som van een referentiehiltoniaan en twee ladderoperatoren. De ladderoperatoren voldoen aan een algebra die een veralgemening is van de algebra van ladderoperatoren zoals die onder meer voorkomen in de context van de harmonische oscillator. De representatietheorie hiervan zal een decompositie van de Hamiltoniaan in tridiagonale blokken mogelijk maken. Deze blokdiagonalisatie leidt tot een definitie van multipletten waarvan zal worden aangetoond dat ze aanleiding geeft tot eigenschappen die analoog zijn aan de eigenschappen van multipletten zoals deze in de context van storingstheorie werden gedefinieerd door E. Wigner en J. von Neumann [11].

In het eerste hoofdstuk wordt de verhandeling ingeleid, worden notaties ingevoerd, wordt een bekend voorbeeld van ladderoperatoren uitgewerkt en wordt achtergrond aangereikt over de Dolan-Grady conditie en het Hubbard model. Hoofdstuk 2 behandelt de theorie van ladderoperatoren en de diagonalisatiemethode evenals de definitie en de eigenschappen van de multipletten. Voorbeelden worden uitgewerkt in het derde hoofdstuk. Hoofdstuk 4 bevat het besluit. Als laatste onderdeel volgt de appendix en de bibliografie.

## 1.2 Gebruikte notaties

### 1.2.1 Algemeen

Een Hilbertruimte zal aangeduid worden met een kalligrafische hoofdletter. Het symbool  $\mathcal{H}$  zal staan voor de volledige Hilbertruimte waarin wordt gewerkt terwijl voor deelruimten van  $\mathcal{H}$  andere kalligrafische letters gekozen worden.

Golffuncties zijn vectoren in een Hilbertruimte en zullen genoteerd worden met een Griekse letter uit het einde van het alfabet, bijvoorbeeld  $\varphi, \chi$  of  $\psi$  terwijl letters uit het begin van het Griekse alfabet scalair voorstellen. Daar de toestand van een systeem de golffunctie bepaalt op een globale fasefactor na, zal in navolging van de natuurkundige traditie in deze verhandeling gesproken worden over toestanden. De verzameling van alle lineaire combinaties van een verzameling toestanden  $S = \{\varphi, \chi, \psi, \dots\}$  heet de span van  $S$  en zal genoteerd worden als  $\langle S \rangle$ .

Het inproduct van twee toestanden in een Hilbertruimte  $\varphi$  en  $\psi$  is de gebruikelijke kwadratische vorm en wordt genoteerd als  $\langle \varphi | \psi \rangle$ . In deze verhandeling wordt de conventie aangenomen dat het inproduct op  $\mathcal{H}$  lineair is in het tweede argument en antilineair in het eerste. Dit betekent in het bijzonder

$$\langle \alpha\varphi | \beta\psi \rangle = \bar{\alpha}\beta\langle \varphi | \psi \rangle \quad (1.2)$$

waarbij  $\bar{\alpha}$  de complex toegevoegde van  $\alpha$  voorstelt. De norm van een toestand  $\varphi$  zal genoteerd worden als  $\|\varphi\|$  en is gedefinieerd als de positieve wortel van het inproduct van  $\varphi$  met zichzelf:

$$\|\varphi\| = \sqrt{\langle \varphi | \varphi \rangle}. \quad (1.3)$$

Een toestand  $\varphi$  heet orthogonaal te staan op een andere toestand  $\psi$  wanneer  $\langle \varphi | \psi \rangle = 0$ . Het orthogonale complement van een deelruimte  $\mathcal{D}$  wordt aangeduid als  $\mathcal{D}^\perp$  en voldoet aan

$$\mathcal{D}^\perp = \{\varphi \in \mathcal{H} | \forall \psi \in \mathcal{D} : \langle \varphi | \psi \rangle = 0\}. \quad (1.4)$$

Een operator heeft de gebruikelijke betekenis van een lineaire afbeelding van de Hilbertruimte naar zichzelf en zal genoteerd worden met een Latijnse hoofdletter. Op operatoren wordt eveneens een norm gedefinieerd aan de hand van het gekozen inproduct:

$$\|A\| = \sup_{\|\varphi\|=1} \|A\varphi\|. \quad (1.5)$$

De kern van een operator  $A$ , aangeduid met  $\text{Ker}(A)$ , is de verzameling van vectoren die door  $A$  op nul afgebeeld worden:

$$\text{Ker}(A) = \{\varphi \in \mathcal{H} | A\varphi = 0\}. \quad (1.6)$$

Uit de lineariteit van operatoren volgt dat  $\text{Ker}(A)$  een deelruimte van  $\mathcal{H}$  vormt. De duale of hermitisch toegevoegde van een operator  $A$  wordt genoteerd als  $A^\dagger$  en voldoet aan drie definiërende eigenschappen

$$(A^\dagger)^\dagger = A \quad (1.7)$$

$$\|A^\dagger\| = \|A\| \quad (1.8)$$

$$\forall \varphi, \psi \in \mathcal{H} : \langle \varphi | A \psi \rangle = \langle A^\dagger \varphi | \psi \rangle. \quad (1.9)$$

Een operator  $A$  wordt hermitisch of zelfduaal genoemd wanneer  $A^\dagger = A$  en antihermitisch of antizelfduaal wanneer  $A^\dagger = -A$ . Unitaire operatoren voldoen aan de relatie  $A^\dagger A = A A^\dagger = 1$ .

Een operator heet een (orthogonale) projectieoperator wanneer deze voldoet aan  $A = A^2 = A^\dagger$ . Deze operatoren zullen geschreven worden met een kalligrafische letter  $\mathcal{P}$ . Wanneer meerdere dergelijke operatoren gelijktijdig voorkomen zullen indices gebruikt worden om het onderscheid te maken.

Wanneer een operator  $A$  inwerkt op een deelruimte  $\mathcal{D}$  zal met  $A\mathcal{D}$  bedoeld worden

$$A\mathcal{D} = \{\varphi \in \mathcal{H} | \exists \psi \in \mathcal{D} : \varphi = A\psi\}. \quad (1.10)$$

De commutator en anticommutator van twee operatoren  $A$  en  $B$  worden genoteerd met  $[A, B]$  en  $\{A, B\}$  respectievelijk. Deze uitdrukkingen zijn gedefinieerd volgens

$$[A, B] = AB - BA \quad (1.11)$$

$$\{A, B\} = AB + BA. \quad (1.12)$$

## 1.2.2 Hogere orde commutatoren

In deze verhandeling zal veelvuldig gebruik gemaakt worden van hogere orde commutatoren van twee operatoren. Definieer de  $n$ -de commutator van de operatoren  $A$  en  $B$  volgens het recursieve voorschrift

$$[A, B]_n = [[A, B]_{n-1}, B]_1 \quad (1.13)$$

waarbij  $[A, B]_1 \equiv [A, B]$ . Het recursieve voorschrift kan uitgewerkt worden om de  $n^e$  commutator te schrijven als  $n$  geneste eerste commutatoren:

$$[A, B]_n = \underbrace{[[\dots [ [A, B], B] \dots ], B]}_n. \quad (1.14)$$

Enkele eigenschappen van de uitdrukking  $[A, B]_n$  zijn

$$[A, B]_n = \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!(n-k)!} (-1)^k B^k A B^{n-k} \quad (1.15)$$

$$[A + A', B]_n = [A, B]_n + [A', B]_n \quad (1.16)$$

$$[\alpha A, \beta B]_n = \alpha \beta^n [A, B]_n \quad (1.17)$$

$$[A, B]_n^\dagger = (-1)^n [A^\dagger, B^\dagger]_n. \quad (1.18)$$

Al deze eigenschappen volgen door uitwerken van de definitie (1.13) en uit de eigenschappen van de hermitisch toegevoegde operator. De laatste vergelijking impliceert dat wanneer  $A$  en  $B$  hermitische operatoren zijn,  $[A, B]_n$  hermitisch is voor even  $n$  en antihermitisch voor oneven  $n$ .

### 1.3 De harmonische oscillator

In deze verhandeling zullen ladderoperatoren een belangrijke rol spelen. De harmonische oscillator is de meest bekende toepassing van dergelijke operatoren in de natuurkunde. Om een voorbeeld te geven van een systeem dat wordt beschreven door meerdere scheppings- en vernietigingsoperatoren, zal een driedimensionaal analogon van dit systeem besproken worden. Voor de eenvoud zal worden gewerkt op een vlak manifold. De Hamiltoniaan van de harmonische oscillator in een anisotrope potentiaal wordt gegeven door

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^j\nabla_j + \frac{1}{2}mq^kq_k \quad (1.19)$$

waarbij net als in de rest van dit voorbeeld de indices  $j$ ,  $k$  en  $l$  lopen van één tot en met drie en

$$q^k = \omega^k_l(x^l - a^l). \quad (1.20)$$

De symmetrische matrix  $\omega^k_l$  is onafhankelijk van de positie  $\vec{x}$  en heeft eigenwaarden verschillend van nul. De eenvoudigste keuze van coördinaten is een basis van orthonormale eigenvectoren van  $\omega^k_l$ , een conventie die in dit voorbeeld zal aangenomen worden. De keuze voor een carthesische basis betekent dat het onderscheid tussen boven- en onderindices van tensoriële grootheden enkel dient gemaakt te worden in het licht van de Einstein sommatieconventie.

De Hamiltoniaan (1.19) kan eenvoudig gediagonaliseerd worden wanneer de operatoren

$$b_j = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(-i\hbar\partial_j - imq_j) \quad (1.21)$$

ingevoerd worden, waarbij  $\omega = \frac{1}{3}\omega_k^k$ . Omdat  $\partial_j^\dagger = -\partial_j$  wordt de hermitisch toegevoegde operator van  $b_j$  gegeven door

$$b_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(-i\hbar\partial_j + imq_j). \quad (1.22)$$

Het is eenvoudig te verifiëren dat

$$[b_j, b_k^\dagger] = \frac{\omega_{jk}}{\omega}. \quad (1.23)$$

De commutatoren  $[b_j^\dagger, b_k^\dagger]$  en  $[b_j, b_k]$  zijn identiek gelijk aan nul. De anticommutator heeft de vorm

$$\{b_j^\dagger, b_k\} = -\frac{\hbar}{m\omega}\partial_j\partial_k + \frac{m}{\hbar\omega}q_jq_k \quad (1.24)$$

plus termen antisymmetrisch onder verwisseling van  $j$  en  $k$ . De Hamiltoniaan kan herschreven worden als

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hbar\omega}{2}g^{jk}\{b_j^\dagger, b_k\} \\ &= \hbar\omega\left(g^{jk}b_j^\dagger b_k + \frac{3}{2}\right) \end{aligned} \quad (1.25)$$

met  $g^{jk}$  de componenten van de metrische tensor. De anisotropie van de potentiaal is volledig vervat in de scheppings- en vernietigingsoperatoren. Het is mogelijk de onderling commuterende operatoren

$$N_j = b_j^\dagger b_j \quad (1.26)$$



te definiëren. De commutatierelaties met  $b_k$  en  $b_k^\dagger$  gegeven worden door

$$[b_k, N_j] = \omega^{-1} \omega_{jk} b_j \quad (1.27)$$

$$[b_k^\dagger, N_j] = -\omega^{-1} \omega_{jk} b_j^\dagger. \quad (1.28)$$

Gezien de keuze van basisvectoren voor de ruimte, definiëren deze commutatierelaties en relatie (1.23) drie onderling onafhankelijke operatoralgebra's.

De eigentoestanden van de Hamiltoniaan (1.19) zijn de gemeenschappelijke eigentoestanden van de teloperatoren  $N_j = b_j^\dagger b_j$ . De positierepresentaties  $\varphi(\vec{x})$  zijn eenvoudig te construeren door middel van deze operatoren. Voor de grondtoestand  $\varphi_{GS}(\vec{x})$  is voldaan aan

$$0 = i \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} b_j \varphi_{GS}(\vec{x}) = \left( \partial_j + \frac{m}{\hbar} \omega_{jk} (x^k - a^k) \right) \varphi_{GS}(x) \quad (1.29)$$

en dit  $\forall j$ . De grondtoestand wordt daarom gegeven door

$$\varphi_{GS}(\vec{x}) = \mathcal{N} \exp \left( -\frac{m}{2\hbar} \omega_{kl} (x^k - a^k)(x^l - a^l) \right) \quad (1.30)$$

met als normalisatiefactor

$$\mathcal{N} = \left( \frac{1}{\omega_{11}\omega_{22}\omega_{33}} \right)^{1/4} \left( \frac{\hbar\pi}{m} \right)^{3/4}. \quad (1.31)$$

De overige toestanden kunnen gevonden worden door de verschillende scheidingsoperatoren  $b_j^\dagger$  het gewenste aantal keer op deze grondtoestand te laten werken. Elke toepassing van  $b_j^\dagger$  verhoogt de oscillatiefrequentie in de richting van de basisvector  $\vec{a}_j$  met de waarde  $\frac{1}{2\pi} \omega_{jj}$ . Op deze manier kan de positierepresentatie van elke eigentoestand van de Hamiltoniaan (1.19) geconstrueerd worden.

## 1.4 De Dolan-Grady conditie

De Dolan-Grady conditie werd in 1981 voorgesteld door L. Dolan en M. Grady [12]. Zij bestudeerden kwantumhamiltonianen van de vorm

$$H = \alpha B + \beta \tilde{B} \quad (1.32)$$

waarbij de operator  $\tilde{B}$  de duale is van  $B$ . Deze dualiteitsrelatie voldoet aan eigenschappen (1.7) tot en met (1.9) maar wordt verder niet gespecificeerd. Dolan en Grady bewijzen onder de voorwaarde

$$[\tilde{B}, B]_3 = 16[\tilde{B}, B], \quad (1.33)$$

die de naam Dolan-Grady conditie draagt, dat een verzameling van behouden, onderling commuterende zelfduale ladingen bestaat. Deze ladingen worden gegeven door

$$Q_{2n} = \alpha(W_{2n} - \tilde{W}_{2n-2}) + \beta(\tilde{W}_{2n} - W_{2n-2}) \quad (1.34)$$

waarbij

$$W_{2n} = -\frac{1}{8}[[W_{2n-2}, \tilde{B}], B] \quad (1.35)$$

$$W_0 \equiv B \quad (1.36)$$

$$Q_0 \equiv H. \quad (1.37)$$

De operatoren  $Q_{2n}$  vormen een abelse symmetriegroep van  $H$  en staan blok-diagonalisatie van de Hamiltoniaan toe op basis van gelijktijdige diagonalisatie van deze onderling commuterende operatoren. Voor het bewijs van de vermelde relaties wordt verwezen naar het originele artikel [12].

De kracht van de Dolan-Grady conditie is dat deze niet afhangt van de dimensie van de Hilbertruimte of (indien van toepassing) de aard van het ruimtetijdmanifold waarop wordt gewerkt. Verder houdt het werk van Dolan en Grady verband met concepten als superintegrabiliteit en Onsageralgebra [13]. Desalniettemin is de praktische toepassing van de methode beperkt. De Hamiltoniaan (1.32) dient reële eigenwaarden te hebben opdat de tijdsevolutie een unitaire operatie zou zijn. Dit impliceert  $H = H^\dagger$ , ongeacht de definitie van de dualiteitsrelatie, die uniek bepaald wordt door de definitie van het inproduct. Niet elk inproduct garandeert dat een operator van de vorm (1.32) een reëel spectrum heeft. Deze beschouwingen betekenen in de praktijk vaak dat dergelijke Hamiltonianen beperkt zijn tot een erg eenvoudige klasse van operatoren. Voor veel van deze Hamiltonianen geldt  $[\tilde{B}, B] = 0$ , wat impliceert dat er een basis van gemeenschappelijke eigenvectoren van  $B$  en  $\tilde{B}$  bestaan alsook dat de methode van Dolan en Grady dan nutteloos is omdat  $Q_{2n} = 0$  voor  $n \geq 1$ .

Een veralgemeende vorm van de relatie (1.33) zal fungeren als startpunt voor de teloperatormethode die in deze verhandeling wordt uitgewerkt. Deze methode zal verder geen verband houden met de methode van Dolan en Grady.

## 1.5 Het Hubbard model

In deze verhandeling zullen twee eenvoudige voorbeelden uitgebreid opgelost worden ter illustratie van de diagonalisatiemethode die het onderwerp van deze thesis vormt. De voorbeeldsystemen worden beschreven door het Hubbard model. Daarom zal dit erg belangrijke model uit de theoretische vastestoffysica hier voorgesteld worden. Het artikel van H. Tasaki [14] vormde de leidraad bij het schrijven van dit deel van de inleiding. Een uitzondering wordt gevormd door het onderdeel over de symmetrieën van het Hubbard model dat is gebaseerd op [6]. Tenzij expliciet anders vermeld fungeren deze twee artikels als referenties voor de inhoud van deze inleiding tot het Hubbard model.

Het Hubbard model werd in 1963 voorgesteld door J. Hubbard in het artikel *Electron correlations in narrow energy bands* [15] als een eenvoudig benaderend model voor de behandelde elektroncorrelaties. Dit model heeft doorheen de jaren aan belang gewonnen daar het in staat is een groot spectrum aan fenomenen uit de vastestoffysica zoals geleider-isolator overgang, ferromagnetisme, antiferromagnetisme, ferrimagnetisme, Tomonaga-Luttinger vloeistof en supergeleiding te beschrijven. Desalniettemin blijft het Hubbard model echter veel te eenvoudig om werkelijke vaste stoffen correct te beschrijven – zo beschrijft het model geen fononen.

Het Hubbard model veronderstelt dat de vaste stof kan beschreven worden als een rooster  $\Lambda$  waarvan elk roosterpunt correspondeert met een atoom in het kristal. Elektronen kunnen in dit model instantaan tunnelen tussen de roosterpunten. In het standaard Hubbard model wordt aangenomen dat de temperatuur erg laag is, wat betekent dat slechts één niet-ontaard orbitaal van fysisch belang is. Hierdoor kan het Hubbard model beschouwd worden als een tight-bindingmodel dat eveneens interacties tussen elektronen onderling in rekening neemt.

De Hamiltoniaan van het Hubbard model wordt gegeven door

$$H = - \sum_{i,j \in \Lambda} t_{ij} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} + \alpha \sum_{i \in \Lambda} n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}. \quad (1.38)$$

De fermionische scheppings- en vernietigingsoperatoren  $b_{i,\sigma}^\dagger$  en  $b_{i,\sigma}$  creëren respectievelijk vernietigen een elektron met spin  $\sigma$  op roosterplaats  $i$ . Deze operatoren voldoen aan de canonische anticommutatierelaties

$$\{b_{i,\sigma}^\dagger, b_{j,\tau}\} = \delta_{ij} \delta_{\sigma\tau} \quad (1.39)$$

$$\{b_{i,\sigma}^\dagger, b_{j,\tau}^\dagger\} = \{b_{i,\sigma}, b_{j,\tau}\} = 0. \quad (1.40)$$

De operator  $n_{i,\sigma}$  wordt gedefiniëerd als

$$n_{i,\sigma} = b_{i,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} \quad (1.41)$$

en wordt teloperator genoemd daar de eigenwaarden van deze operator gelijk zijn aan het aantal elektronen op plaats  $i$  met spin  $\sigma$ . Het is eenvoudig te verifiëren dat is voldaan aan de commutatierelaties

$$[b_{i,\sigma}, n_{j,\tau}] = \delta_{ij} \delta_{\sigma\tau} b_{i,\sigma} \quad (1.42)$$

$$[b_{i,\sigma}^\dagger, n_{j,\tau}] = -\delta_{ij} \delta_{\sigma\tau} b_{i,\sigma}^\dagger. \quad (1.43)$$

Eveneens is voldaan aan

$$\sum_{i \in \Lambda} [H, n_{i,\sigma}] = 0 \quad (1.44)$$

voor zowel elektronen met spin op als met spin neer. Dit betekent dat het aantal elektronen van een bepaalde spin een behouden grootte is. Het is mogelijk extra termen in beschouwing te nemen die dit behoud schenden maar dergelijke veralgemeende modellen zullen niet beschouwd worden in deze verhandeling. De Hamiltoniaan (1.38) kan gesplitst worden in twee delen, een hopterm en een interactieterm. Hoewel het vinden van eigentoestanden voor hun som een allesbehalve triviaal probleem is, zijn beide termen afzonderlijk eenvoudig te diagonaliseren.

### 1.5.1 De hopterm

De hopterm wordt gegeven door

$$H_{\text{hop}} = - \sum_{i,j \in \Lambda} t_{ij} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma}. \quad (1.45)$$

Opdat dit deel van de Hamiltoniaan hermitisch zou zijn, dient  $t_{ij} = \bar{t}_{ji}$  gekozen te worden. Deze coëfficiënten zijn gerelateerd aan de waarschijnlijkheden waarmee elektronen kunnen tunnelen van roosterplaats  $j$  naar roosterplaats  $i$ . De hermiticiteit van de matrix  $t$  komt overeen met de eis dat het tunnelen tussen twee roosterplaatsen even waarschijnlijk is in beide richtingen. Het diagonale stuk van  $H_{\text{hop}}$  wordt bekomen door  $i = j$  te stellen. De coëfficiënten  $t_{ii}$  maken het mogelijk ééndeeltjespotentialen te beschrijven. In de voorbeelden die in deze verhandeling zullen behandeld worden, treden geen dergelijke potentialen op en zal  $t_{ii} = 0$  gekozen worden. Daar er geen interactie is in de uitdrukking (1.45) kunnen de verschillende één-elektrongolffuncties onafhankelijk bekomen worden. Wanneer gebruik wordt gemaakt van deze oplossingen, kan  $H_{\text{hop}}$  gediagonaliseerd worden door gebruik te maken van de operatoren

$$a_{n,\sigma}^\dagger = \sum_{i \in \Lambda} \varphi_i^{(n)} b_{i,\sigma}^\dagger \quad (1.46)$$

waarbij  $\varphi^{(n)} = (\varphi_i^{(n)})_{i \in \Lambda}$  de  $|\Lambda|$  orthonormale ééndeeltjeseigentoestanden zijn zodat

$$H_{\text{hop}} = \sum_{j=1}^{|\Lambda|} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \varepsilon_j a_{j,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma}. \quad (1.47)$$

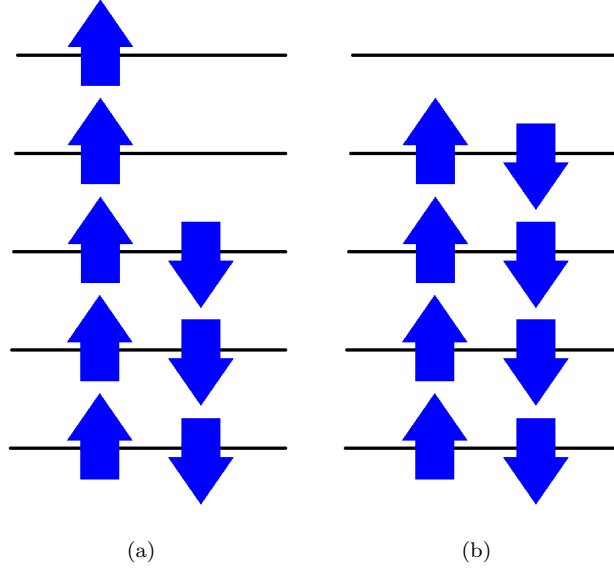
Wanneer  $A$  en  $B$  twee willekeurige verzamelingen eigentoestanden zijn waarvoor  $|A| + |B|$  gelijk is aan het aantal elektronen, is de toestand

$$\Phi_{AB} = \left( \prod_{j \in A} a_{j,\uparrow}^\dagger \right) \left( \prod_{j \in B} a_{j,\downarrow}^\dagger \right) \Phi_{\text{vac}} \quad (1.48)$$

eveneens een eigentoestand van  $H_{\text{hop}}$  met energie

$$\varepsilon_{A,B} = \sum_{j \in A} \varepsilon_j + \sum_{j \in B} \varepsilon_j. \quad (1.49)$$

Deze energie kan geminimaliseerd worden door  $A$  en  $B$  zodanig te kiezen dat de energiniveaus per spin opgevuld worden van onder te beginnen. De grondtoestand voor alle spinconfiguraties is de toestand met de kleinste totale spin zoals gedemonstreerd in figuur (1.1). De gedelokaliseerde oplossingen van  $H_{\text{hop}}$  vormen een aanwijzing dat dit deel van de Hamiltoniaan het golfkarakter van de elektronen beschrijft.



Figuur 1.1: Een schematische voorstelling van twee grondtoestanden. In het algemeen hoeven de energiniveaus niet equidistant te zijn. (a) De grondtoestand van  $H_{\text{hop}}$  voor een systeem met 8 elektronen waarvan 5 met spin op. (b) De laagst haalbare energie kan verwezenlijkt worden met evenveel spins op als spins neer.

### 1.5.2 De interactieterm

De tweede term die voorkomt in de Hamiltoniaan (1.38) is de interactieterm, gegeven door

$$H_{\text{int}} = \alpha \sum_{i \in \Lambda} n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}. \quad (1.50)$$

De parameter  $\alpha$  stelt de sterkte van interactie tussen de elektronen onderling voor. Opdat  $H_{\text{int}}$  hermitisch zou zijn moet  $\alpha$  reëel zijn. De uitdrukking (1.50) is diagonaal in een basis van toestanden waar alle elektronen gelokaliseerd zijn op een roosterplaats. Dit wijst er op dat de interactieterm het deeltjeskarakter van de elektronen beschrijft. Een algemene eigentoestand wordt gegeven door

$$\Phi_{A,B} = \left( \prod_{j \in A} b_{j,\uparrow}^\dagger \right) \left( \prod_{j \in B} b_{j,\downarrow}^\dagger \right) \Phi_{\text{vac}} \quad (1.51)$$

waarbij  $A$  en  $B$  delen van  $\Lambda$  zijn. De energie van deze toestand wordt gegeven door

$$\varepsilon_{A,B} = \alpha|A \cap B|. \quad (1.52)$$

Bijgevolg wordt de energie geminimaliseerd door de doorsnede van  $A$  en  $B$  te minimaliseren.

### 1.5.3 Spin

De spin is een belangrijke grootte in het Hubbard model en er bestaan verscheidene theorema's aangaande de spin van dit model. Eén daarvan, de stelling van Lieb, zal later in deze inleiding aan bod komen. De  $j$ -de component van de spinoperator op roosterplaats  $i$  wordt gedefinieerd door

$$S_i^{(j)} = \frac{1}{2} \sum_{\tau, \tau'=\uparrow, \downarrow} b_{i,\tau}^\dagger (\sigma_j)_{\tau, \tau'} b_{i,\tau'} \quad (1.53)$$

waarbij  $\sigma_j$  de Paulimatrices zijn. Deze operatoren commuteren elk met de interactieterm (1.50) maar niet met de hopterm (1.45). De operator voor totale spin in de  $j$ -richting wordt gegeven door

$$S_{\text{tot}}^{(j)} = \sum_{i \in \Lambda} S_i^{(j)}. \quad (1.54)$$

Deze operatoren commuteren met zowel  $H_{\text{hop}}$  en  $H_{\text{int}}$ . Dit betekent dat de Hamiltoniaan (1.38) invariant is onder gelijktijdige rotatie in de spinruimte van alle elektronen. Merk op dat net zoals voor andere systemen met spin de operatoren (1.54) onderling niet commuteren. De totale spin is gedefinieerd volgens

$$S_{\text{tot}}^2 = \sum_{j=1}^3 \left( S_{\text{tot}}^{(j)} \right)^2 \quad (1.55)$$

met eigenwaarden  $s_{\text{tot}}(s_{\text{tot}}+1)$  waarbij  $s_{\text{tot}} \in \{0, 1 \dots s_{\text{max}}\}$  voor een even aantal en  $s_{\text{tot}} \in \{1/2, 3/2 \dots s_{\text{max}}\}$  voor oneven aantal elektronen. Voor een vast aantal elektronen  $N$  wordt  $s_{\text{max}}$  gegeven door

$$s_{\text{max}} = \begin{cases} N/2 & 0 \leq N \leq |\Lambda| \\ |\Lambda| - (N/2) & |\Lambda| \leq N \leq 2|\Lambda|. \end{cases} \quad (1.56)$$

### 1.5.4 Symmetrieën

Voor het één-dimensionale Hubbard model met een even aantal roosterplaatsen bestaan twee  $\mathfrak{su}_2$ -algebra's waarvan de elementen commuteren met de Hamiltoniaan (1.38) en met elkaar, het aantal elektronen met spin op en spin neer. Beide algebra's commuteren onderling [6].

De eerste algebra werd reeds vermeld in de vorige sectie en is de totale spin. De generatoren van deze algebra zijn de operatoren  $S_{\text{tot}}^{(j)}$  zoals gedefinieerd in vergelijking (1.54). Deze algebra geeft aanleiding tot de behouden grootheden

$$S_{\text{tot}}^2 = \sum_{j=1}^3 \left( S_{\text{tot}}^{(j)} \right)^2 \quad (1.57)$$

$$S_{\text{tot}}^{(z)} = \frac{\hbar}{2} \sum_{i \in \Lambda} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}). \quad (1.58)$$

Deze algebra kan eenvoudig veralgemeend worden naar roosters van alle dimensies, zoals reeds is te zien aan de notatie.

De tweede algebra, die pseudospin wordt genoemd, heeft als generatoren

$$R^+ = \sum_{i \in \Lambda} (-1)^i b_{i,\uparrow}^\dagger b_{i,\downarrow}^\dagger \quad (1.59)$$

$$R^- = \sum_{i \in \Lambda} (-1)^i b_{i,\uparrow} b_{i,\downarrow} \quad (1.60)$$

$$R_z = \frac{1}{2} \sum_{i \in \Lambda} (n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow} - 1). \quad (1.61)$$

Deze uitdrukkingen zijn slecht gedefinieerd op roosters in meer dan één dimensie en op ééndimensionale roosters met een oneven aantal plaatsen en periodische randvoorwaarden.

De pseudospin geeft eveneens aanleiding tot twee behouden grootheden. Deze zijn de generator  $R_z$  en

$$R_{\text{tot}}^2 = \frac{1}{2} \{R^+, R^-\} + R_z^2. \quad (1.62)$$

In de literatuur is vaak gebruik gemaakt van deze commutatierelaties en van ruimtelijke symmetrieën om het ééndimensionale Hubbard model te diagonaliseren [4, 5, 6, 7, 8]. In het bijzonder werd het eerste voorbeeld dat volledig zal opgelost worden in deze verhandeling, de Hubbard ring met vier roosterplaatsen en vier elektronen, bestudeerd in [5] en [6] aan de hand van symmetrie.

### 1.5.5 Systemen met half gevulde band

Een systeem wordt een systeem met half gevulde band genoemd wanneer het totale aantal elektronen precies gelijk is aan het aantal roosterplaatsen. Dit komt onder andere voor wanneer elk atoom één elektron afstaat aan de geleidingsband. Dit is een fysisch erg relevante situatie. In 1989 publiceerde Lieb in [16] het bewijs voor een belangrijk theorema dat veel inzicht geeft in de magnetische eigenschappen van de grondtoestand in een Hubbard model met halfgepulde band. Hiervoor is het begrip *tweedelig* nodig.

**Definitie 1.** *Veronderstel een Hubbard model op een rooster  $\Lambda$ . Het systeem wordt tweedelig genoemd wanneer het rooster kan opgedeeld worden in twee disjuncte deelverzamelingen  $A$  en  $B$  zodat  $\Lambda = A \cup B$  en  $t_{ij} = 0$  wanneer roosterplaatsen  $i$  en  $j$  beiden in zowel  $A$  of  $B$  bevinden en dus enkel sprongen tussen de beide deelroosters zijn toegestaan.*

**Stelling 1.** *(Theorema van Lieb) Veronderstel een Hubbard model op een tweedelig rooster  $\Lambda = A \cup B$  met een even aantal roosterplaatsen. Veronderstel eveneens dat het mogelijk is om voor alle paren  $i, j \in \Lambda$  een sequentie van roosterplaatsen te vinden zodat sprongen van  $i$  naar  $j$  mogelijk zijn langs deze sequentie en dat de interactieparameter  $\alpha$  strikt positief is. Dan geldt dat de grondtoestanden van het model de spinontaarding als enige ontaarding hebben en dat de totale spin in de grondtoestand wordt gegeven door  $(|A| - |B|)/2$ .*

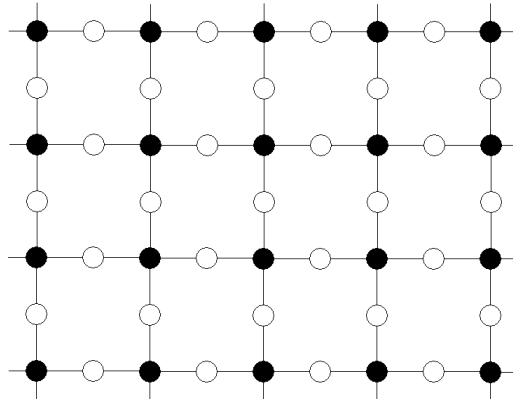
Voor het bewijs hiervan wordt verwezen naar het artikel van Lieb [16]. De voorwaarden voor de stelling gaan op voor beide uitgewerkte voorbeelden in

deze verhandeling, tenminste wanneer  $\alpha > 0$  wordt gekozen. De gevolgen van dit theorema zijn verstrekkend. Zo impliceert het dat wanneer  $|A| = |B|$  de grondtoestand uniek is en een totale spin  $s_{\text{tot}} = 0$  heeft. Een ander gevolg voor de grondtoestand  $\varphi_{GS}$  onder de condities van het theorema van Lieb is

$$\langle \varphi_{GS} | \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \varphi_{GS} \rangle = \begin{cases} > 0 & i, j \in A \text{ of } i, j \in B \\ < 0 & i \in A, j \in B \text{ of } i \in B, j \in A. \end{cases} \quad (1.63)$$

Dit doet de grondtoestand neigen naar antiferromagnetisme zoals dit ook wordt waargenomen in het Heisenbergmodel.

Ook ferrimagnetisme wordt voorspeld door dit theorema. Veronderstel een tweedelig rooster zoals afgebeeld in figuur (1.2). Elektronen kunnen enkel tunnelen langs de horizontale en verticale verbindingen tussen twee atomen van een verschillende kleur. Het rooster is tweedelig en dus zal volgens het theorema van Lieb de oriëntatie van de spins op de zwartgekleurde roosterplaatsen tegengesteld zijn aan die op de witgekleurde roosterplaatsen. Door het ongelijke aantal witte en zwarte roosterpunten zal het totale rooster een netto magnetisch moment verkrijgen. Een dergelijke ordening van spins noemt men ferrimagnetisme.



Figuur 1.2: Een voorbeeld van een assymetrisch tweedelig rooster. De roosterplaatsen in de onderste en bovenste rij dienen met elkaar geïdentificeerd te worden en analoog voor de linkse en rechtse kolom. Er zijn meer witte dan zwarte roosterplaatsen in elke eenheidscel waardoor de grondtoestand van het systeem in het geval van een halfgevulde band ferrimagnetisme zal vertonen.



## Hoofdstuk 2

# De diagonalisatiemethode

### 2.1 Ladderoperatoren

In deze verhandeling zullen ladderoperatoren een erg belangrijke rol spelen. De ladderoperatoren die zullen voorkomen zijn veralgemeningen van de bekendste voorbeelden uit de natuurkunde, namelijk de ladderoperatoren voor de harmonische oscillator en de scheppings- en vernietigingsoperatoren voor (quasi)deeltjes. Daarom zal hier de theoretische achtergrond van de ladderoperatoren die nodig is voor de diagonalisatiemethode uitgewerkt worden.

Ladderoperatoren  $R$  en  $R^\dagger$  worden in deze verhandeling gedefinieerd als operatoren die voldoen aan twee equivalente relaties

$$[R, M] = \gamma R \quad (2.1)$$

$$[R^\dagger, M] = -\gamma R^\dagger \quad (2.2)$$

waarbij  $\gamma > 0$  een reële constante en  $M$  een zelftoegevoegde operator is. Deze laatste operator zal teloperator genoemd worden.

De commutatierelaties (2.1) en (2.2) impliceren dat  $R$  ( $R^\dagger$ ) werkt op een eigentoestand van  $M$  door deze te transformeren naar een andere eigentoestand met een eigenwaarde die  $\gamma$  lager (hoger) is of naar de nulvector. Inderdaad, stel  $\varphi$  een eigentoestand van  $M$  met eigenwaarde  $\mu$ , dan geldt

$$M(R\varphi) = R(M\varphi) - [R, M]\varphi = \mu R\varphi - \gamma R\varphi = (\mu - \gamma)R\varphi \quad (2.3)$$

en analoog voor  $R^\dagger$ . Deze eigenschap kan worden gezien als het vernietigen (scheppen) van een excitatie in het spectrum van  $M$ . Dit verantwoordt de naamgeving vernietigingsoperator (scheppingsoperator) voor  $R$  ( $R^\dagger$ ) en teloperator voor  $M$ . De vergelijkingen (2.1) en (2.2) impliceren dat de teloperator commuteert met  $RR^\dagger$  en  $R^\dagger R$ . Er is immers voldaan aan

$$\begin{aligned} [M, RR^\dagger] &= [M, R]R^\dagger + R[M, R^\dagger] \\ &= -\gamma RR^\dagger + \gamma RR^\dagger \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.4)$$

en analoog voor  $R^\dagger R$ .

Het is mogelijk de algebra die wordt voortgebracht door  $M$ ,  $R$  en  $R^\dagger$  te beschouwen.

**Definitie 2.** Een algebra  $\mathfrak{g}$  is een vectorruimte  $V$  waarop een bilineaire afbeelding  $\circ$

$$\begin{aligned} \circ : V \times V &\rightarrow V \\ (v, w) &\mapsto v \circ w \end{aligned}$$

is gedefinieerd.

Voorbeelden van algebra's zijn de  $n \times n$ -matrices met de matrixvermenigvuldiging en  $\mathbb{R}^3$  met het vectorproduct. De algebra die wordt voortgebracht door  $R$ ,  $R^\dagger$  en  $M$  zal benoemd worden als een *ladder algebra* of kortweg  $\mathfrak{l}$ . Als bilineaire vorm zal de samenstelling van operatoren gekozen worden. Een algebra zal heten voortgebracht te zijn door een verzameling elementen  $\{A_i\}$  wanneer elk element in de algebra kan worden geschreven als een lineaire combinatie van producten van de elementen  $A_i$ .

De ladder- en teloperatoren die het bekendst zijn in de fysica voldoen allen aan de commutatierelaties (2.1) en (2.2). Deze operatoren vormen dus allemaal ladder algebra's. Een belangrijke opmerking is echter dat de bilineaire relatie werkend op de scheppings- en vernietigingsoperatoren telkens is gespecificeerd voor deze algebra's. Zo geldt bijvoorbeeld voor de scheppings- en vernietigingsoperatoren voor bosonische (-) of fermionische (+) deeltjes

$$b_i b_j^\dagger \pm b_j^\dagger b_i = \delta_{ij}. \quad (2.5)$$

Voor een algemene ladder algebra zoals die wordt beschouwd in deze verhandeling hoeft de commutator of anticommutator van  $R$  en  $R^\dagger$  niet gespecificeerd te zijn. Dit verschil zal een belangrijke rol spelen in de uitwerking van de theoretische achtergrond van de diagonalisatiemethode.

In deze verhandeling zal de representatietheorie van de ladder algebra een belangrijke rol spelen.

**Definitie 3.** Een  $n$ -dimensionale representatie van een algebra  $\mathfrak{g}$  is een algebramorforme  $\rho$  van  $\mathfrak{g}$  naar de ruimte van  $n \times n$ -matrices

$$\rho : \mathfrak{g} \rightarrow M_n(\mathbb{C}).$$

Dat  $\rho$  een algebramorforme is, betekent dat dit een lineaire afbeelding is die voldoet aan

$$\forall x, y \in \mathfrak{g} : \rho(x \circ y) = \rho(x)\rho(y).$$

Het is gebruikelijk zowel het algebramorforme  $\rho$  als de  $n$ -dimensionale vectorruimte waarop  $\rho(\mathfrak{g})$  werkt te benoemen als de representatie. Beide definities zijn equivalent. Het zal in deze verhandeling vaak praktischer zijn de vectorruimte te benoemen als representatie van  $\mathfrak{l}$ . Net zoals bij groepen is het concept van een simpele of irreduciebele representatie erg belangrijk.

**Definitie 4.** Een representatie wordt simpel genoemd wanneer geen unitaire transformatie bestaat zodanig dat alle matrices in de representatie gelijktijdig blokdiagonaal kunnen gemaakt worden door toepassing van deze transformatie.

Analoog aan het benoemen van een vectorruimte als representatie zal het eenvoudiger zijn de deelruimten die invariant zijn onder alle drie de operatoren  $R$ ,  $R^\dagger$  en  $M$  te benoemen als simpele representatie. Het is mogelijk de elke representatie van de ladder algebra te schrijven als directe som van simpele representaties.

**Stelling 2.** *Elke representatie van de ladder algebra  $\mathfrak{l}$  is isomorf met een directe som van simpele representaties.*

*Bewijs.* Het volstaat aan te tonen dat wanneer een representatie  $\mathcal{V}$  een invariante deelruimte  $\mathcal{W}$  heeft, het orthogonale complement  $\mathcal{W}^\perp$  eveneens invariant is onder de algebra.

Stel  $A \in \mathfrak{l}$ ,  $\varphi \in \mathcal{W}$  en  $\varphi' \in \mathcal{W}^\perp$ . Dat  $\mathcal{W}$  invariant is onder de ladder algebra betekent

$$\langle \varphi' | A\varphi \rangle = 0. \quad (2.6)$$

Aangezien  $\mathfrak{l}$  gesloten is onder hermitisch toevoegen, geldt ook

$$\langle \varphi' | A^\dagger \varphi \rangle = 0. \quad (2.7)$$

Deze relatie impliceert door de definitie van de duale operator en de eigenschappen van het inproduct

$$\langle \varphi | A\varphi' \rangle = 0. \quad (2.8)$$

Dit betekent dat ook  $\mathcal{W}^\perp$  invariant is onder de ladder algebra, wat het gestelde per inductie op de dimensie van  $\mathcal{W}$  bewijst.  $\square$

Deze stelling is algemeen geldig in representatietheorie van eindige groepen, Lie groepen en associatieve algebra's [17]. Het bewijs dat hier gegeven wordt is dat niet.

Een laatste opmerking die belangrijk zal zijn, betreft de eigenwaarden van  $RR^\dagger$  en  $R^\dagger R$ . Deze zijn positief aangezien de verwachtingswaarden gelijk zijn aan het kwadraat van de norm van een toestand. Inderdaad,

$$\langle \varphi | RR^\dagger \varphi \rangle = \langle R^\dagger \varphi | R^\dagger \varphi \rangle = \|R^\dagger \varphi\|^2 \quad (2.9)$$

en analoog voor  $R^\dagger R$ . Wanneer  $|\xi|^2$  de eigenwaarde van  $RR^\dagger$  of  $R^\dagger R$  is, zal in deze verhandeling de conventie aangenomen worden dat  $\xi$  eveneens een positief reëel getal is.

## 2.2 De hiërarchie

De eerste stap in de teloperatormethode die in deze verhandeling besproken wordt, is het zoeken van een teloperator voor de Hamiltoniaan [9, 10].

**Definitie 5.** *Een hermitische operator  $M$  is een teloperator voor de Hamiltoniaan  $H$  als er een reële  $\gamma > 0$  bestaat zodat*

$$[H, M]_3 = \gamma^2 [H, M]. \quad (2.10)$$

Deze relatie is een veralgemening van de Dolan-Grady conditie (1.33) in de zin dat hier niet geëist wordt dat er een bijkomende relatie is tussen  $H$  en  $M$ . De naam teloperator zal dadelijk verantwoord worden. Merk op dat deze operator niet noodzakelijk een fysische betekenis dient te hebben en dus zuiver de rol van wiskundig hulpmiddel speelt. Wanneer voor een gegeven Hamiltoniaan een teloperator werd gedefiniëerd, is het mogelijk de Hamiltoniaan te schrijven als

$$H = H_{\text{ref}} + R + R^\dagger \quad (2.11)$$

waarbij

$$R = \frac{1}{2\gamma^2} [H, M]_2 + \frac{1}{2\gamma} [H, M] \quad (2.12)$$

$$R^\dagger = \frac{1}{2\gamma^2} [H, M]_2 - \frac{1}{2\gamma} [H, M] \quad (2.13)$$

$$H_{\text{ref}} = H - R - R^\dagger \quad (2.14)$$

$$= H - \frac{1}{\gamma^2} [H, M]_2. \quad (2.15)$$

Uit deze definities en vergelijking (1.18) volgt dat de definities van  $R$  en  $R^\dagger$  consistent zijn met de definitie van de hermitisch toegevoegde en dat  $H_{\text{ref}}$  zelftoegevoegd is. Deze operatoren voldoen allen aan eenvoudige commutatierelaties met de teloperator. De referentiehiltoniaan  $H_{\text{ref}}$  commuteert met de teloperator. Inderdaad,

$$\begin{aligned} [H_{\text{ref}}, M] &= [H, M] - \frac{1}{\gamma^2} [H, M]_3 \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.16)$$

waarbij de laatste gelijkheid geldt door vergelijking (2.10). Gebruikmakende van definities (2.10) en (2.12) kan aangetoond worden dat

$$\begin{aligned} [R, M] &= \frac{1}{2\gamma^2} [H, M]_3 + \frac{1}{2\gamma} [H, M]_2 \\ &= \frac{1}{2} [H, M] + \frac{1}{2\gamma} [H, M]_2 \\ &= \gamma R. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Equivalent hiermee is

$$[R^\dagger, M] = -\gamma R^\dagger. \quad (2.18)$$

Hieruit volgt dat  $R$  en  $R^\dagger$  de ladderoperatoren zijn voor de teloperator  $M$ , wat de naaming voor deze drie operatoren verantwoordt. De commutatoren

$[R, R^\dagger]$  en  $[H_{\text{ref}}, R]$  zijn niet eenvoudig uit te drukken als functie van  $H$  en  $M$ . Het is om deze reden dat de algebra van ladderoperatoren in zijn meest algemene vorm wordt beschouwd.

Daar de teloperator hermitisch is, kan een basis voor  $\mathcal{H}$  gevonden worden waarin  $M$  diagonaal is. Dit betekent dat elke toestand  $\psi \in \mathcal{H}$  door projectie op de verschillende eigenruimten kan geschreven worden als

$$\psi = \sum_{\mu} \mathcal{P}_{\mu} \psi \quad (2.19)$$

waarbij  $\mathcal{P}_{\mu}$  projecteert op de deelruimte van eigenvectoren van  $M$  met eigenwaarde  $\mu$ :

$$M(\mathcal{P}_{\mu} \psi) = \mu(\mathcal{P}_{\mu} \psi). \quad (2.20)$$

De Hamiltoniaan werkend op de toestand  $\psi$  kan geschreven worden als

$$H\psi = \sum_{\mu} (H_{\text{ref}} + R + R^\dagger)(\mathcal{P}_{\mu} \psi). \quad (2.21)$$

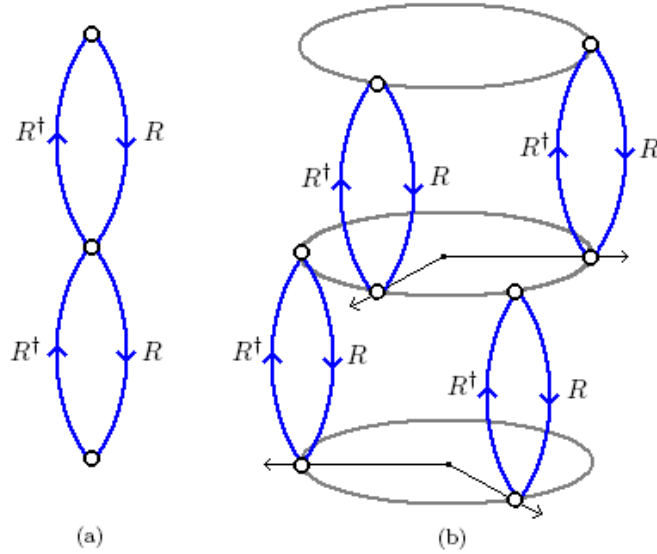
Deze vergelijking opnieuw projecteren op de eigenruimten van de teloperator staat toe de eigenwaardenvergelijking (1.1) te schrijven als een hiërarchie van vergelijkingen

$$(H_{\text{ref}} - \varepsilon)(\mathcal{P}_{\mu} \psi) + R(\mathcal{P}_{\mu+\gamma} \psi) + R^\dagger(\mathcal{P}_{\mu-\gamma} \psi) = 0. \quad (2.22)$$

Deze hiërarchie geeft een voorkeur aan een specifieke klasse van simpele representaties van de ladder algebra, namelijk simpele representaties waarvoor geen onttaarding optreedt in het spectrum van de teloperator. Dit impliceert dat de verschillende toestanden in de basis van eigentoestanden van  $M$  in elkaar transformeren door de ladderoperatoren. Een voorstelling hiervan werd gemaakt in figuur (2.1a). De kleine zwarte cirkels zijn de eigentoestanden van de teloperator. De blauwe pijlen stellen de werking van de ladderoperatoren voor. De representaties van de spingroep  $\mathfrak{su}_2$  zijn speciale gevallen van deze representaties.

Niet alle simpele representaties van de ladder algebra zijn van deze vorm. Figuur (2.1b) toont een zesdimensionale representatie van de ladder algebra. Elk van de kleine zwarte cirkels is een eigentoestand van  $M$ . De grote grijze cirkels stellen de eigenruimten van deze operator voor. Wanneer het spectrum van  $RR^\dagger$  niet ontaard is in zowel de onderste als de middelste deelruimte van de teloperator, is de representatie simpel. De getekende basis van gemeenschappelijke eigenvectoren van  $M$  en  $RR^\dagger$  zijn dan uniek. Wanneer  $RR^\dagger$  wel ontaard is op minstens één van deze eigenruimten, kan binnen deze ruimte een basisverandering worden uitgevoerd zodanig dat de representatie een directe som is van twee simpele representaties die de vorm van figuur (2.1a) hebben. Wanneer alle simpele representaties van de ladder algebra een vorm hebben zoals getoond in figuur (2.1a), is het eenvoudig deze allemaal te construeren. De methode die hiervoor kan gebruikt worden is analoog aan de constructie van de simpele representaties van  $\mathfrak{su}_2$ , door middel van de methode van de hoogste (of laagste) gewichtsfactoren. Deze constructie is niet geldig voor representaties met ontaarde teloperatoren zoals deze getoond in figuur (2.1b).

De kern van de vernietigingsoperator  $R$  is een deelruimte en kan ingedeeld worden volgens de eigenwaarden van de teloperator. Definieer de deelruimten  $\mathcal{D}_{\mu}$



Figuur 2.1: Twee representaties van de ladder algebra. De zwarte cirkels stellen genormeerde toestanden voor, de blauwe pijlen stellen de werking van de ladder operatoren voor. (a) Een representatie waarop de teloperator niet ontaard is. Deze representatie is simpel. (b) Een representatie waarop de teloperator wel ontaard is. Of deze representatie reduceibel is, hangt af van de eigenwaarden van  $RR^\dagger$ .

volgens

$$\mathcal{D}_\mu = \{\varphi \in \text{Ker}(R) | M\varphi = \mu\varphi\}, \quad (2.23)$$

dan volgt onmiddellijk dat  $\text{Ker}(R)$  kan geschreven worden als directe som van deze deelruimten:

$$\text{Ker}(R) = \bigoplus_{\mu} \mathcal{D}_\mu. \quad (2.24)$$

Daar de teloperator commuteert met  $RR^\dagger$  kunnen elk van deze deelruimten ook ingedeeld worden volgens de eigenwaarde horend bij deze laatste operator:

$$\text{Ker}(R) = \bigoplus_{\mu, \xi_0} \mathcal{D}_{\mu, \xi_0} \quad (2.25)$$

waarbij analoog aan vergelijking (2.23)

$$\mathcal{D}_{\mu, \xi_0} = \{\varphi \in \text{Ker}(R) | M\varphi = \mu\varphi \text{ en } RR^\dagger\varphi = \xi_0^2\varphi\}. \quad (2.26)$$

Het is mogelijk  $\text{Ker}(R)$  nog verder op te delen. Beschouw de deelruimte  $R^\dagger\mathcal{D}_{\mu, \xi_0}$ . De toestanden in deze deelruimten zijn allemaal eigentoestanden van  $M$  met eigenwaarde  $\mu + \gamma$  maar een opdeling in deelruimten van  $RR^\dagger$  zal in het algemeen niet-triviaal zijn. Definieer daarom

$$\mathcal{D}'_{\mu, \xi_0, \xi_1} = \{\varphi \in R^\dagger\mathcal{D}_{\mu, \xi_0} | RR^\dagger\varphi = \xi_1^2\varphi\}. \quad (2.27)$$

Het is mogelijk om op deze deelruimten opnieuw de vernietigingsoperator te laten werken. Voor de kern van  $R$  betekent dit door de lineariteit van de operatoren

$$\begin{aligned}\text{Ker}(R) &= \bigoplus_{\mu, \xi_0, \xi_1} R\mathcal{D}'_{\mu, \xi_0, \xi_1} \\ &= \bigoplus_{\mu, \xi_0, \xi_1} \mathcal{D}_{\mu, \xi_0, \xi_1}\end{aligned}\quad (2.28)$$

waarbij de laatste gelijkheid de definitie van  $\mathcal{D}_{\mu, \xi_0, \xi_1}$  is. Dit procédé kan herhaald worden door de deelruimten

$$(R^\dagger)^n \mathcal{D}_{\mu, \xi_0, \xi_1, \dots} \quad (2.29)$$

onder te verdelen in eigenruimten van  $RR^\dagger$  en door toepassen van de vernietigingsoperator deze indeling te induceren op  $\text{Ker}(R)$ . Na een eindig aantal stappen zal een verdere indeling niet meer mogelijk zijn. Dan geldt

$$\text{Ker}(R) = \bigoplus_{\mu, \xi_0, \xi_1, \dots} \mathcal{D}_{\mu, \xi_0, \xi_1, \dots} \quad (2.30)$$

Op elk van deze termen kan de methode van de laagste gewichtsfactor toegepast worden. Kies voor  $\mathcal{D}_{\mu, \xi_0, \xi_1, \dots}$  een orthonormale basis van vectoren  $\chi_{j, \mu, \xi_0, \xi_1, \dots}$ . Het voorgaande impliceert dat

$$\mathcal{L}_j = \left\langle \left\{ (R^\dagger)^n \chi_{j, \mu, \xi_0, \xi_1, \dots} \mid n \in \mathbb{N} \right\} \right\rangle \quad (2.31)$$

een simpele representatie van de ladder algebra vormt. Wanneer alle simpele representaties van deze vorm zijn, kan de volledige decompositie van de ladder algebra representatie bekomen worden door het toepassen van bovenstaande methode.

Sectie 2.3 gaat dieper in op het verband tussen de hiërarchie en de bijzondere klasse van simpele representaties, wat aanleiding zal geven tot de diagonalisatiemethode.

## 2.3 De teloperatormethode

### 2.3.1 Constructie van de eigentoestanden

Eerder in deze verhandeling werd aangetoond dat  $[H_{\text{ref}}, M] = 0$ , wat impliceert dat er een basis van gemeenschappelijke eigentoestanden voor beide operatoren bestaat. Eveneens werd aangetoond dat een decompositie van de ladderalgebra in simpele representaties bestaat alsook dat één klasse van deze simpele representaties een bijzondere vorm aanneemt. De volgende stelling toont aan dat deze eigenschappen kunnen gebruikt worden om eigentoestanden van  $H$  te construeren. Daarom zal deze stelling een centrale rol spelen in de teloperatormethode.

**Stelling 3.** (*Constructiestelling*) Gegeven een verzameling eigentoestanden van  $M$   $\varphi_0 \dots \varphi_{N-1}$  die voldoen aan

$$\begin{cases} H_{\text{ref}}\varphi_i &= \lambda_i\varphi_i \\ R\varphi_i &= \xi_{i-1}\varphi_{i-1} \\ R^\dagger\varphi_i &= \xi_i\varphi_{i+1} \end{cases}$$

waarbij  $\xi_{N-1}$  de enige  $\xi_i$  is die gelijk aan 0 is, dan bestaan er getallen  $h_i$  zodat

$$\psi = \sum_{i=0}^{N-1} h_i \varphi_i$$

een eigentoestand is van  $H$  met eigenwaarde

$$\varepsilon = \lambda_0 + \xi_0 \frac{h_1}{h_0}.$$

*Bewijs.* Het is duidelijk dat de toestanden  $\varphi_i$  een geprefereerde simpele representatie van de ladderalgebra opspannen. Noem deze representatie  $\mathcal{S}$ . Uit de voorwaarden volgt eveneens dat  $\mathcal{S}$  invariant is onder  $H$  zodat het mogelijk is om in deze deelruimte precies  $N$  orthonormale eigentoestanden van  $H$  te vinden. Het is mogelijk de vergelijkingen voor de coëfficiënten  $h_i$  te schrijven als een stelsel van vergelijkingen dat enkel afhangt van  $\lambda_i$  en  $\xi_i$ . Beschouw

$$H\psi = (H_{\text{ref}} + R + R^\dagger) \left( \sum_{i=0}^{N-1} h_i \varphi_i \right) \quad (2.32)$$

$$= \sum_{i=0}^{N-1} h_i (H_{\text{ref}} + R + R^\dagger) \varphi_i \quad (2.33)$$

$$= \sum_{i=0}^{N-1} h_i (\lambda_i \varphi_i + \xi_{i-1} \varphi_{i-1} + \xi_i \varphi_{i+1}) \quad (2.34)$$

$$= \sum_{i=0}^{N-1} (h_i \lambda_i + h_{i+1} \xi_i + h_{i-1} \xi_{i-1}) \varphi_i \quad (2.35)$$

waarbij  $h_{-1} \xi_{-1} = 0$  werd ingevoerd om de notatie te vereenvoudigen. De eigenwaardenvergelijking (1.1) impliceert dat de uitdrukking (2.35) gelijk dient te zijn aan

$$\varepsilon \psi = \sum_{i=0}^{N-1} \varepsilon h_i \varphi_i. \quad (2.36)$$



Opdat aan aan deze eigenwaardenvergelijking zou voldaan zijn, dient daarom

$$\forall k : \quad h_k(\lambda_k - \varepsilon) + h_{k+1}\xi_k + h_{k-1}\xi_{k-1} = 0 \quad (2.37)$$

waaruit de uitdrukking voor de energie volgt door  $k$  gelijk aan 0 te stellen.  $\square$

Om de energie  $\varepsilon$  en de coëfficiënten  $h_i$  te berekenen, kan tewerk gegaan worden zoals bij de bekende diagonalisatieprocedure. Eerst dient de energie bepaald te worden als nulpunt van de determinant van het stelsel (2.37). Daarna kan dit stelsel opgelost worden voor elk energieniveau. Dit stelsel is een homogeen stelsel en bijgevolg is het nodig één van de coëfficiënten  $h_i$  vast te leggen. Definieer daarom de nieuwe variabelen

$$g_k = \frac{h_k}{h_0} \quad (2.38)$$

en dus  $g_0 \equiv 1$ . Deze uitdrukking is welgedefinieerd daar uit het stelsel (2.37) volgt dat  $h_0 = 0$  impliceert  $\psi = 0$ . Het opleggen van de normalisatieconditie

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (2.39)$$

kan als laatste stap gebeuren. Het op te lossen stelsel is nu van de vorm

$$\forall k : \quad g_k(\lambda_k - \varepsilon) + g_{k+1}\xi_k + g_{k-1}\xi_{k-1} = 0. \quad (2.40)$$

Dit stelsel kan voor een gegeven waarde voor  $\varepsilon$  eenvoudig opgelost worden door voorwaartse substitutie. De oplossingen voor  $N = 1$  tot en met  $N = 4$  zijn uitgewerkt in de appendix.

Het belangrijkste voordeel van het gebruik van deze stelling is dat de blokken waarin de Hamiltoniaan wordt opgedeeld veel kleiner zijn dan de dimensie van de volledige Hilbertruimte. Zo zal de dimensie van de grootste simpele representatie die voorkomen in de uitgewerkte voorbeelden in het derde hoofdstuk gelijk zijn aan vier terwijl de dimensie van  $\mathcal{H}$  voor beide voorbeelden gelijk is aan 36.

Een bijkomend praktisch voordeel van de tridiagonaalvorm die de blokken van de Hamiltoniaan aannemen op één van de simpele ladder-algebrerepresentaties is dat de overeenkomstige karakteristieke determinanten aan elkaar gerelateerd zijn door een eenvoudige recursieformule. Noem de karakteristieke determinant van  $H$  op een  $n + 1$ -dimensionale simpele representatie  $D_n$ . Dan volgt uit de vorm van het stelsel (2.37) onmiddellijk

$$D_n = (\lambda_n - \varepsilon)D_{n-1} - \xi_{n-1}^2 D_{n-2}. \quad (2.41)$$

In principe kan het stelsel (2.40) ook opgelost worden door gebruik te maken van de uitdrukking

$$\varepsilon = \lambda_0 + \xi_0 g_1 \quad (2.42)$$

om de energie te elimineren uit de vergelijkingen. In de praktijk blijkt deze werkwijze niet voordelig.

### 2.3.2 Toepassen van de diagonalisatiemethode

#### Het algoritme

Op dit punt is het mogelijk de diagonalisatiemethode samen te vatten in een algoritme. In wat volgt zal een teloperator waarmee het volledige spectrum geconstrueerd kan worden een *ideale teloperator* heten. Deze eigenschap garandeert dat voor elke simpele representatie van de ladder algebra een basis bestaat die voldoet aan de voorwaarden nodig voor het toepassen van de constructiestelling.

De volgende vier stappen zijn voldoende om het spectrum te bepalen.

1. Zoek een ideale teloperator voor  $H$ .
2. Construeer  $R$ ,  $R^\dagger$  en  $H_{\text{ref}}$  aan de hand van vergelijkingen (2.12), (2.13) en (2.14) respectievelijk.
3. Bepaal de simpele representaties van de ladder algebra gebruikmakend van het algoritme beschreven in sectie 2.2.
4. Pas de constructiestelling toe op deze toestanden.

#### Toepasbaarheid

Een eerste vereiste opdat dit algoritme kan toegepast worden, is het bestaan van een teloperator voor de bestudeerde Hamiltoniaan. Naast symmetrieën van  $H$  is de relatie (2.10) altijd voldaan voor orthogonale projectieoperatoren [9]. Inderdaad,

$$\begin{aligned}
 [H, \mathcal{P}]_3 &= H\mathcal{P}^3 - 3\mathcal{P}H\mathcal{P}^2 + 3\mathcal{P}^2H\mathcal{P} - \mathcal{P}^3H \\
 &= H\mathcal{P} - 3\mathcal{P}H\mathcal{P} + 3\mathcal{P}H\mathcal{P} - \mathcal{P}H \\
 &= [H, \mathcal{P}].
 \end{aligned} \tag{2.43}$$

In principe volstaan dergelijke operatoren om het volledige spectrum te vinden. In de praktijk blijkt de keuze voor projectieoperatoren als teloperatoren ver van efficiënt. Bijgevolg stelt zich de vraag onder welke voorwaarden een algemene teloperator ideaal is.

Een ideale teloperator is een teloperator zodanig dat alle simpele representaties van de ladder algebra voldoen aan de voorwaarden nodig voor de constructiestelling (Stelling 3). Deze representaties zijn voorgesteld in figuur (2.1a), wat de reden is dat deze familie van representaties in sectie 2.2 als geprefereerd werd bestempeld.

Gegeven een vaste teloperator  $M$ , noem  $\mathfrak{L}$  de veralgemeende ladder algebra voortgebracht door de operatoren

$$H_{\text{ref}}, R \text{ en } R^\dagger. \tag{2.44}$$

Het is eenvoudig te verifiëren dat wanneer de teloperator ideaal is, de verzameling

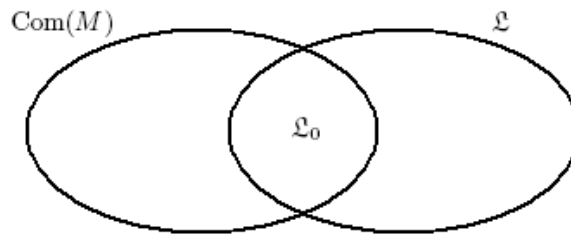
$$\mathfrak{L}_0 = \{A \in \mathfrak{L} | [A, M] = 0\} \tag{2.45}$$

een abelse deelruimte van  $\mathfrak{L}$  is. Dit is een natuurlijk gevolg van het ontbreken van ontarding in het spectrum van  $M$ . Elke operator in  $\mathfrak{L}_0$  zal een toestand

$\varphi_i$  uit de constructiestelling immers afbeelden op zichzelf. Het is eenvoudig te verifiëren dat  $\mathfrak{L}_0$  gesloten is onder de vermenigvuldiging van operatoren. Dit betekent dat op deze deelruimte een algebrastructuur is gedefinieerd.

De voorwaarde dat de deelalgebra  $\mathfrak{L}_0$  abels is, vormt duidelijk een noodzakelijke voorwaarde voor het ideaal zijn van de teloperator. Het is echter ook een voldoende voorwaarde. Daar  $\mathfrak{L}_0$  zowel abels is als gesloten onder hermitische toevoeging, commuteert elk element van  $\mathfrak{L}_0$  met zijn hermitisch toegevoegde. Dit betekent dat elk element van deze algebra diagonaliseerbaar is. Net zoals bij groepen zijn de simpele representaties van abelse algebra's ééndimensionaal. Dit kan worden ingezien door op te merken dat de operatoren in een abelse algebra allen samen diagonaliseerbaar zijn, wat betekent dat elke representatie kan worden geschreven als een directe som van ééndimensionale representaties. Toegepast op het specifieke geval van  $\mathfrak{L}_0$  betekent dit dat het spectrum van de teloperator geen ontarding vertoont op een simpele representatie van  $\mathfrak{L}$ .

Op het ogenblik van schrijven is niet geweten aan welke voorwaarden een Hamiltoniaan dient te voldoen opdat een ideale teloperator zou bestaan. Een methode om een dergelijke teloperator te construeren bestaat ook nog niet. Een belangrijk deel van toekomstig onderzoek in deze context zal uitgemaakt worden door het formuleren van een antwoord op deze vragen.



Figuur 2.2: Een symbolische voorstelling van de conditie opdat een teloperator ideaal zou zijn. Links de verzameling van symmetrieën van  $M$ , rechts de algebra  $\mathfrak{L}$ . Wanneer  $\mathfrak{L}_0$  abels is, kan de teloperator gebruikt worden om het volledige spectrum van de Hamiltoniaan te construeren.

## 2.4 Multipletten

### 2.4.1 Definitie

Het is duidelijk dat er een natuurlijke indeling van het spectrum van de Hamiltoniaan bestaat door de blokdiagonalisatie van  $H$  die wordt opgelegd door de constructiestelling. Eigentoestanden van  $H$  die op deze manier ingedeeld worden zullen heten een multiplet te vormen.

**Definitie 6.** *Een multiplet ten opzichte van de teloperator  $M$  is een verzameling eigentoestanden van  $H$  die een basis vormen voor een simpele representatie van de ladderalgebra.*

Wigner en von Neumann [11] definieerden multipletten in de context van storingsrekening als een collectie van eigentoestanden waarvan de eigenwaarden ontaard zijn in het ongestoorde systeem en waarvan de ontaarding wordt opgebroken wanneer een storing wordt aangelegd. Het zal blijken dat beide definities aanleiding geven tot analoge eigenschappen hoewel de opdeling van het spectrum erg verschillend kan zijn in beide gevallen.

De eerste belangrijke opmerking waarmee rekening dient gehouden te worden is dat de indeling van het spectrum in multipletten afhangt van de teloperator. Een spectrum kan op verschillende manieren ingedeeld worden in multipletten door een andere teloperator te kiezen. Een tweede opmerking is dat de definitie van de multipletten impliceert dat de representatie van de ladderalgebra simpel is. In het algemeen zullen de parameters  $\xi_j$  functies van de modelparameters zijn en deze kunnen ook nulpunten hebben voor bepaalde waarden van de modelparameters. Een representatie die simpel is op een deel van de parameter ruimte kan dus reducibel zijn in een ander deel van deze ruimte. Dit hoeft echter geen fundamenteel probleem te zijn. Een eenvoudig voorbeeld van een systeem waarin een multiplet opbreekt wordt beschreven door de Hamiltoniaan

$$H = \begin{pmatrix} 0 & x \\ x & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.46)$$

Het is eenvoudig in te zien dat het spectrum bestaat uit een doublet ten opzichte van de teloperator  $\sigma_z$  met energieën

$$\varepsilon_{\pm}(x) = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 + 4x^2} \quad (2.47)$$

maar dat het spectrum opsplitst in twee singletten voor  $x = 0$ .

Bij het bewijzen van de eigenschappen van de multipletten zal telkens aangenomen worden dat alle  $\xi_j$  ( $0 \leq j \leq N-1$ ) verschillen van nul. In de nulpunten van deze parameters hoeven deze stellingen bijgevolg niet te gelden. Deze opmerking is vooral belangrijk daar het mogelijk is voor elk paar eigentoestanden van  $H$  een teloperator te vinden zodanig dat deze toestanden een doublet vormen in alle punten waar hun energieën verschillende waarden hebben. In deze punten kunnen parameterafhankelijke symmetrieën geïdentificeerd worden. De auteurs van [3] tonen in het geval van het ééndimensionale Hubbard model aan dat deze ontaarding verband houden met parameterafhankelijke behouden grootheden. In de systemen beschreven door het Hubbard model die later in deze verhandeling bestudeerd worden, zullen de  $\xi_j$  niet afhangen van de modelparameter.

## 2.4.2 Eigenschappen

In deze sectie zullen enkele eenvoudige eigenschappen van multipletten besproken worden. Het zal duidelijk blijken dat een aantal van deze eigenschappen rechtstreeks volgen uit de hiërarchie of equivalent daarmee het stelsel (2.37). Dit illustreert een voordeel van de teloperatormethode vanuit theoretisch oogpunt. De eerste stelling is algemeen geldig en kan aangewend worden om een uitspraak te doen over de transformatie-eigenschappen van eigentoestanden binnen één multiplet.

**Stelling 4.** *Stel  $A = A^\dagger$  en  $\psi_1$  en  $\psi_2$  twee (genormaliseerde) toestanden die voldoen aan*

$$\forall \alpha : \langle \psi_1 | \mathcal{P}_\alpha \psi_1 \rangle = 0 \Leftrightarrow \langle \psi_2 | \mathcal{P}_\alpha \psi_2 \rangle = 0$$

*waarbij  $\forall \psi \in \mathcal{H} : A(\mathcal{P}_\alpha \psi) = \alpha(\mathcal{P}_\alpha \psi)$ . Dan bestaat er een inverteerbare symmetrie  $T$  van  $A$  zodat  $\psi_2 = T\psi_1$ .*

*Bewijs.* De operator

$$T = T' \oplus 1_{\text{Ker}(T')} \quad (2.48)$$

waarbij

$$T' = \sum_{\mathcal{P}_\alpha \psi_1 \neq 0} \frac{|\mathcal{P}_\alpha \psi_2\rangle \langle \mathcal{P}_\alpha \psi_1|}{\langle \mathcal{P}_\alpha \psi_1 | \mathcal{P}_\alpha \psi_1 \rangle} \quad (2.49)$$

commuteert met  $A$  en kan geïnverteerd worden door de rol van  $\psi_1$  en  $\psi_2$  om te keren in de definitie.  $\square$

De betekenis van deze stelling in de context van deze verhandeling is dat zij een voorwaarde legt op het bestaan van symmetrieën van  $H_{\text{ref}}$  die twee toestanden binnen een multiplet in elkaar transformeren. Dit is een eigenschap die analoog is aan een eigenschap van multipletten uit de storingsrekening. Wigner en von Neumann toonden aan dat de toestanden binnen hun multipletten in elkaar transformeren door een symmetrie van het ongestoorde systeem dat werd gebroken door de storing. In het geval van deze verhandeling is het mogelijk

$$H(s) = H_{\text{ref}} + s(R + R^\dagger) \quad (2.50)$$

te beschouwen als  $H_{\text{ref}}$  waarop een storing werd aangelegd met storingsparameter  $s = 1$ . De storing  $R + R^\dagger$  zal een deel van de symmetrie van  $H_{\text{ref}}$  breken waardoor het spectrum van  $H$  minder sterk ontaard is dan dat van de referentiehamiltoniaan.

Terwijl voor de multipletten van Wigner en von Neumann altijd een symmetrie van de ongestoorde Hamiltoniaan bestaat, is het niet gegarandeerd dat er altijd symmetrieën van  $H_{\text{ref}}$  bestaan die de toestanden binnen de multipletten zoals gedefinieerd in deze verhandeling in elkaar transformeren. Beschouw een Hamiltoniaan van de vorm

$$H = H_{\text{ref}} + (R + R^\dagger) \equiv \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_1 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \xi_0 & 0 \\ \xi_0 & 0 & \xi_1 \\ 0 & \xi_1 & 0 \end{pmatrix}$$

met  $\lambda_1 \neq \lambda_0$ . De eigentoestanden van deze Hamiltoniaan vormen een triplet ten opzichte van de teloperator

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}. \quad (2.51)$$

Voor één van de eigentoestanden geldt  $\mathcal{P}_{\lambda_1} \psi = 0$  terwijl deze projectie voor de andere toestanden niet gelijk is aan nul. De operator  $T$  die deze eigentoestand transformeert tot een andere eigentoestand zal niet commuteren met  $H_{\text{ref}}$  want hij kan niet geschreven worden als een directe som van operatoren die werken op de eigenruimten van  $H_{\text{ref}}$ . Dit betekent dat de toestanden binnen het triplet niet in elkaar transformeren door toepassing van een symmetrie van  $H_{\text{ref}}$ . Als speciaal geval kan gekeken worden naar multipletten waarvoor Stelling 4 is voldaan voor de  $A$  gelijk aan de teloperator. Deze stelling impliceert dat wanneer is voldaan aan de condities voor elk koppel  $\{\psi_i, \psi_j\}$  van eigentoestanden van  $H$  in het multiplet, het mogelijk is een polynomen  $f_{ij}(x)$  te construeren zodat

$$\psi_i = f_{ij}(M)\psi_j. \quad (2.52)$$

De operator  $f_{ij}(M)$  kan inverteerbaar gekozen worden door op te leggen dat  $f_{ij}(\mu) \neq 0$  voor alle eigenwaarden  $\mu$  van  $M$ , ook die eigenwaarden waarvan de eigenruimten loodrecht staan op alle toestanden in het multiplet.

Het is mogelijk precies te bepalen wanneer aan de vorige stelling is voldaan voor  $A = M$ , met andere woorden een nodige en voldoende voorwaarde te formuleren opdat één of meer van de coëfficiënten  $g_k$  gelijk zijn aan nul.

**Stelling 5.** *Een coëfficiënt  $g_k$  ( $k > 0$ ) in een oplossing van het stelsel (2.40) is gelijk aan nul als en slechts als de energie horend bij die oplossing gelijk is aan de energie van een multiplet met  $k$  toestanden en parameters  $\lambda_0 \dots \lambda_{k-1}$  en  $\xi_0 \dots \xi_{k-2}$ .*

*Bewijs.* Stel dat de energie  $\varepsilon$  van een toestand in een multiplet gelijk is aan de energie van een kleiner multiplet zoals beschreven in de formulering van deze stelling. De oplossingen van het kleinere stelsel kunnen ingevuld worden in het volledige stelsel en dan volgt uit de  $k$ -de vergelijking  $g_k = 0$ .

Stel  $g_k$  gelijk aan nul. Dan zijn de eerste  $k$  vergelijkingen uit het stelsel (2.40) precies van de vorm van een analoog stelsel voor een kleiner multiplet zoals beschreven in de formulering van de stelling. Dit stelsel is oplosbaar onafhankelijk van de  $N - k$  laatste vergelijkingen. De energie die uit deze eerste  $k$  vergelijkingen volgt, is bijgevolg precies dezelfde waarde als wanneer de laatste  $N - k$  vergelijkingen niet zouden bestaan. De vergelijking

$$\xi_{k-1}g_{k-1} + \xi_k g_{k+1} = 0 \quad (2.53)$$

kan gebruikt worden om  $g_{k+1}$  vast te leggen teneinde de  $N - k$  laatste vergelijkingen op te lossen wanneer  $g_{k-1}$  is bepaald uit de eerste  $k$  vergelijkingen. Dit is analoog aan de opgelegde vergelijking  $g_0 \equiv 1$  die eerder werd ingevoerd.  $\square$

**Stelling 6.** *Als de energieniveaus van twee verschillende eigentoestanden van  $H$  in hetzelfde  $M$ -multiplet elkaar kruisen, dan hebben in dat punt één of meer  $\xi_j$  een nulpunt.*

*Bewijs.* Beschouw twee oplossingen  $(g_k)_{k \in \mathbb{N}}$  en  $(g'_k)_{k \in \mathbb{N}}$  van het stelsel (2.40) met dezelfde energie  $\varepsilon$ . Stel eveneens dat alle  $\xi_j$  verschillen van nul. Gelijkstellen van de uitdrukkingen voor de energie als functie van  $g_1$  en  $g'_1$  levert

$$(\lambda_0 - \varepsilon) + \xi_0 g_1 = (\lambda_0 - \varepsilon) + \xi_0 g'_1. \quad (2.54)$$

Omdat  $\xi_0 \neq 0$ , volgt hieruit  $g_1 = g'_1$ . Stel dat  $g_{k-1} = g'_{k-1}$  en  $g_k = g'_k$ . Gelijkstellen van het linkerlid van de  $k+1$ -ste vergelijking van het stelsel zonder accent met het linkerlid van dezelfde vergelijking in het stelsel met accent levert

$$\xi_{k-1} g_{k-1} + (\lambda_k - \varepsilon) g_k + \xi_k g_{k+1} = \xi_{k-1} g'_{k-1} + (\lambda_k - \varepsilon) g'_k + \xi_k g'_{k+1}. \quad (2.55)$$

Omdat  $\xi_k \neq 0$ , volgt hieruit  $g_{k+1} = g'_{k+1}$ . Per inductie impliceert dit dat beide toestanden gelijk zijn, wat een contradictie is. De enige manier om dit besluit te vermijden is wanneer één of meerdere  $\xi_j$  gelijk zijn aan nul.  $\square$

De voornaamste toepassing van deze eigenschap is dat deze bewijst dat wanneer de coëfficiënten  $\xi_j$  geen nulpunten hebben, de energieniveaus binnen een multiplet elkaar nooit kruisen. In de uitgewerkte voorbeelden is dit het geval. Ook wanneer de  $\xi_j$  wel nulpunten hebben zullen er geen kruisingen tussen energieniveaus optreden tenzij in die punten. Het is niet zo dat een nulpunt van een  $\xi_j$  ook een kruising impliceert, dit hangt af van de waarden van de andere parameters.

Een laatste stelling legt het verband met de blokdiagonalisatie met behulp van symmetriemethoden.

**Stelling 7.** *Eigentoestanden van  $H$  in eenzelfde  $M$ -multiplet hebben dezelfde eigenwaarde voor gemeenschappelijke symmetrieën van  $H$  en  $M$ .*

*Bewijs.* Stel  $[H, S] = [M, S] = 0$ . Zonder verlies van algemeenheid kan het bewijs beperkt worden tot de simpele representatie van de ladderalgebra in kwestie. Voor deze deelruimte bestaat een basis waarin  $H_{\text{ref}}$ ,  $RR^\dagger$ ,  $M$  en  $S$  gelijktijdig diagonaal zijn. Omdat  $M$  niet ontaard is op deze deelruimte, is deze basis uniek en meer precies is dit de basis van  $\varphi_i$  uit de constructiestelling. Dit betekent dat elk van de  $\varphi_i$  ook eigentoestanden van  $S$  zijn. Aangezien uit de voorwaarden volgt dat  $[R, S] = 0$  moeten alle  $\varphi_i$  dezelfde eigenwaarde van  $S$  hebben, wat impliceert dat  $S$  constant is op de deelruimte.  $\square$

Deze laatste stelling toont dat de blokdiagonalisatie door middel van de tel-operatormethode en door middel van gemeenschappelijke symmetrieën van  $H$  en  $M$  dezelfde blokdiagonalisatie zal opleveren. Een voorbeeld hiervan zijn de resultaten bekomen in [5], waarin de Hubbard ring met vier plaatsen werd bestudeerd aan de hand van symmetrie. De auteurs van dit artikel bekwamen dezelfde blokdiagonalisatie voor de Hamiltoniaan als werd verwezenlijkt in [10] en deze verhandeling.

# Hoofdstuk 3

## Toepassing

### 3.1 Enkele eenvoudige voorbeelden

Eerst zullen een aantal voorbeelden van modellen opgesomd worden waarop de teloperatormethode op eenvoudige wijze kan toegepast worden. Sommige van deze modellen werden ook aangehaald in [9]. Alle teloperatoren in dit hoofdstuk werden gekozen zodat  $\gamma = 1$ .

#### 3.1.1 De Pauli spin

De Hamiltoniaan van de Pauli spin wordt gegeven door

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega\sigma_z. \quad (3.1)$$

Een gepaste  $M$  is

$$M = \frac{1}{2}\sigma_x. \quad (3.2)$$

Gebruikmakend van de commutatierelaties tussen de Paulimatrices kan afgeleid worden dat

$$[H, M] = \frac{i}{2}\hbar\omega\sigma_y \quad (3.3)$$

$$[H, M]_2 = \frac{1}{2}\hbar\omega\sigma_z. \quad (3.4)$$

Hieruit volgt

$$H_{\text{ref}} = 0 \quad (3.5)$$

$$R = \frac{1}{4}\hbar\omega(\sigma_z + i\sigma_y). \quad (3.6)$$

De Paulimatrices vormen een triviaal voorbeeld. Het zijn echter precies deze berekeningen die aantonen dat elke twee eigentoestanden van een willekeurige Hamiltoniaan in een doublet kunnen ingedeeld worden.



### 3.1.2 De harmonische oscillator

De Hamiltoniaan van de harmonische oscillator werd reeds vermeld in de inleiding, meerbepaald (1.25). Een mogelijke keuze voor de teloperator is de Hamiltoniaan van een andere harmonische oscillator die gecentreerd is rond een ander punt. Voor de eenvoud zal dit voorbeeld beperkt worden tot één dimensie. Dit betekent

$$M = \frac{1}{2}\{b^\dagger, b\} + i\frac{\zeta}{\hbar\omega}(b^\dagger - b) \quad (3.7)$$

waarbij  $\zeta$  een reële constante is. De commutatoren worden gegeven door

$$[H, M] = i\zeta(b + b^\dagger) \quad (3.8)$$

$$[H, M]_2 = i\zeta(b - b^\dagger) - 2\zeta. \quad (3.9)$$

Hieruit volgt

$$H_{\text{ref}} = \frac{\hbar\omega}{2}\{b^\dagger, b\} + i\zeta(b^\dagger - b) + 2\zeta \quad (3.10)$$

$$R = i\zeta b - \zeta. \quad (3.11)$$

Het is duidelijk dat het gebruik van deze teloperator geen praktisch voordeel oplevert bij het diagonaliseren. Wel is het interessant om op te merken dat de ladderoperator  $R$  op constanten na gelijk is aan de ladderoperator  $b$ .

### 3.1.3 Het Jaynes-Cummings model

Het Jaynes-Cummings model [18] is een model uit de kwantumoptica dat wordt gebruikt om de interactie van licht met een twee-niveausysteem te beschrijven. De Hamiltoniaan is van de vorm

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega\{b^\dagger, b\} + \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z + \hbar\kappa(b^\dagger\sigma_- + b\sigma_+). \quad (3.12)$$

Het fotonveld wordt beschreven door de bosonische ladderoperatoren  $b$  en  $b^\dagger$ , het atoom door de Paulimatrices  $\sigma_z$ ,  $\sigma_+$  en  $\sigma_-$ . Veronderstel  $\omega \neq \omega_0$  en kies voor de teloperator

$$M = \frac{\omega}{2(\omega - \omega_0)}\{b^\dagger, b\} + \frac{\omega_0}{2(\omega - \omega_0)}\sigma_z. \quad (3.13)$$

Dan geldt

$$[H, M] = \hbar\kappa(b^\dagger\sigma_- - b\sigma_+) \quad (3.14)$$

$$[H, M]_2 = \hbar\kappa(b^\dagger\sigma_- + b\sigma_+). \quad (3.15)$$

Dit heeft als gevolg

$$H_{\text{ref}} = \frac{1}{2}\hbar\omega\{b^\dagger, b\} + \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z \quad (3.16)$$

$$R = \hbar\kappa b^\dagger\sigma_-. \quad (3.17)$$

### 3.1.4 Supersymmetrische modellen

De niet-relativistische supersymmetrische Hamiltoniaan voor één deeltje in één dimensie zoals die werd voorgesteld door Edward Witten [19] wordt gegeven door

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2(x) + \frac{1}{2} \hbar \sigma_z \frac{d}{dx} \omega(x). \quad (3.18)$$

Men kan  $M$  opnieuw kiezen zoals in het voorbeeld van de Pauli spin, namelijk

$$M = \frac{1}{2} \sigma_x \quad (3.19)$$

zodat

$$[H, M] = \frac{i}{2} \hbar \sigma_y \frac{d}{dx} \omega(x) \quad (3.20)$$

$$[H, M]_2 = \frac{1}{2} \hbar \sigma_z \frac{d}{dx} \omega(x). \quad (3.21)$$

Dit heeft als gevolg dat

$$H_{\text{ref}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2(x) \quad (3.22)$$

$$R = \frac{1}{4} \hbar (\sigma_z + i \sigma_y) \frac{d}{dx} \omega(x). \quad (3.23)$$

Niet alleen dit eenvoudige model maar elk supersymmetrisch model kan herschreven worden naar de vorm van vergelijking (2.11). Beschouw een Hamiltoniaan die kan geschreven worden in de algemene supersymmetrische vorm [20]

$$H = \{Q, Q^\dagger\}. \quad (3.24)$$

De operator  $Q$  wordt superlading genoemd en voldoet aan de anticommutatierelaties

$$\{Q, Q\} = \{Q^\dagger, Q^\dagger\} = 0. \quad (3.25)$$

Definieer de operator

$$R = \sqrt{2m} Q - m \quad (3.26)$$

waarbij  $m$  een strikt positieve constante is met de dimensies van energie. Dan geldt

$$\begin{aligned} H &= \{Q, Q^\dagger\} \\ &= \frac{1}{2m} \{R + m, R^\dagger + m\} \\ &= \frac{1}{2m} (\{R, R^\dagger\} + 2m^2) + R + R^\dagger. \end{aligned} \quad (3.27)$$

### 3.1.5 Het transversaal Ising model

De Hamiltoniaan van het transversaal Ising model wordt gegeven door

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(j)} - h \sum_i \sigma_x^{(i)} \quad (3.28)$$

waarbij  $J_{ij} = J_{ji}$  en  $J_{ii} = 0$ . Een mogelijke teloperator is

$$M = \frac{1}{4} \sum_k \sigma_x^{(k)}. \quad (3.29)$$

Met deze keuze hebben de commutatoren van  $H$  en  $M$  de vorm

$$[H, M] = -\frac{i}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_y^{(i)} \sigma_z^{(j)} \quad (3.30)$$

$$[H, M]_2 = -\sum_{i,j} J_{ij} \sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(j)} + \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_y^{(i)} \sigma_y^{(j)}. \quad (3.31)$$

Dit betekent

$$H_{\text{ref}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(j)} - \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_y^{(i)} \sigma_y^{(j)} - h \sum_i \sigma_x^{(i)} \quad (3.32)$$

$$R = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(j)} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_y^{(i)} \sigma_y^{(j)} + \frac{i}{4} \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_y^{(i)} \sigma_z^{(j)}. \quad (3.33)$$

### 3.1.6 Het Hubbard model

Zoals reeds vermeld in de inleiding heeft het Hubbard model een Hamiltoniaan gegeven door

$$H = - \sum_{i,j \in \Lambda} t_{ij} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} + \alpha \sum_{k \in \Lambda} n_{k,\uparrow} n_{k,\downarrow}. \quad (3.34)$$

Een mogelijke keuze voor  $M$  is de potentiaal

$$M = \sum_{k \in \Lambda} n_{k,\uparrow} n_{k,\downarrow}. \quad (3.35)$$

Met deze definitie van de teloperator geldt

$$H_{\text{ref}} = - \sum_{i,j} t_{ij} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} (1 - (n_{i,\bar{\sigma}} - n_{j,\bar{\sigma}})^2) + \alpha \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \quad (3.36)$$

$$R = - \sum_{i,j} t_{ij} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} (1 - n_{i,\bar{\sigma}}) n_{j,\bar{\sigma}} \quad (3.37)$$

waarbij  $\bar{\uparrow} = \downarrow$  en omgekeerd. Dit is een notatie die verderop in deze verhandeling zal terugkeren.

## 3.2 De Hubbard ring met vier plaatsen

In deze sectie zal een eerste voorbeeldsysteem in detail uitgewerkt worden. In tegenstelling tot enkele eerder vermelde voorbeelden is de diagonalisatie van het Hubbardmodel niet-triviaal. De praktische aspecten van de berekening zullen tijdens het diagonaliseren toegelicht worden bij wijze van illustratie.

Het systeem dat zal behandeld worden, is een keten van vier roosterplaatsen met periodische randvoorwaarden waarop zich twee elektronen met spin op en twee elektronen met spin neer bevinden. Deze elektronen kunnen enkel naaste-nabuursprongen uitvoeren. Dit systeem is gekend als de Hubbard ring met vier plaatsen. Dit model is één van de meest bestudeerde systemen beschreven door het Hubbardmodel, zie bijvoorbeeld [5, 6, 10].

De Hamiltoniaan van het Hubbard model werd reeds uitgebreid besproken in de inleiding en wordt gegeven door

$$H = - \sum_{i,j=1}^4 t_{ij} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} + \alpha \sum_{i=1}^4 n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}. \quad (3.38)$$

Voor de eenvoud zal verondersteld worden dat  $t_{ij} = t$ , dit wil zeggen dat alle toegestane elektronsprongen dezelfde waarschijnlijkheid hebben. Deze keuze staat toe de parameter  $t$  op te nemen in de definitie van de interactieparameter  $\alpha$ . Deze parameter is dan de enige modelparameter voor dit systeem. Door de periodische randvoorwaarden dienen de indices van de fermionische ladder- en teloperatoren te worden geïnterpreteerd modulo 4.

Zoals gebruikelijk in de studie van het Hubbard model zal de computationele basis als basis voor de Hilbertruimte gekozen worden. Deze basis kan geconstrueerd worden uit het elektronvacuüm door het toepassen van de fermionische scheppingsoperatoren:

$$\chi_j = \left( \prod_{k \in \Lambda_{j,\uparrow}} b_{k,\uparrow}^\dagger \right) \left( \prod_{l \in \Lambda_{j,\downarrow}} b_{l,\downarrow}^\dagger \right) \Phi_{\text{vac}} \quad (3.39)$$

waarbij  $\Lambda_{j,\sigma}$  de deelroosters zijn waar zich in toestand  $\chi_j$  elektronen met spin  $\sigma$  bevinden en  $\Phi_{\text{vac}}$  het elektronvacuüm voorstelt. Daar de operatoren  $b_{i,\sigma}^\dagger$  anti-commuteren is het belangrijk een consistente volgorde aan te houden. Hier zal de conventie aangenomen worden dat eerst de elektronen met spin neer gecreëerd worden en daarna de elektronen met spin op. De volgorde waarin elektronen met dezelfde spin gecreëerd worden is de volgorde waarin de roosterplaatsen zijn genummerd. De computationele basistoestanden genoteerd worden als

$$\chi_j = |o_{1,j} o_{2,j} o_{3,j} o_{4,j}\rangle. \quad (3.40)$$

De symbolen  $o_{i,j}$  stellen de bezetting van roosterplaats  $i$  in basistoestand  $\chi_j$  voor en kunnen vier waarden aannemen

- “2” stelt een bezetting door een paar van elektronen voor,
- “u” stelt een bezetting door een elektron met spin op voor,
- “d” stelt een bezetting door een elektron met spin neer voor,
- “0” stelt een lege bezetting voor.

Eerder in deze verhandeling (meerbepaald vergelijking (3.35)) werd als teloperator voor het Hubbard model de interactieterm gekozen

$$M_{\text{int}} = \frac{1}{\alpha} H_{\text{int}} = \sum_{i=1}^4 n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}. \quad (3.41)$$

In [10] werd dit specifieke systeem opgelost met twee teloperatoren, gedefinieerd als

$$M_{\pm} = \sum_{i=1}^4 n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \left( 1 \pm \sum_{j \in \{-1,1\}} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} n_{i+j,\sigma} n_{i-j,\bar{\sigma}} \right). \quad (3.42)$$

Deze operatoren lijken erg op de potentiaal (3.35). Zoals reeds vermeld in de inleiding, telt de potentiaal het aantal roosterplaatsen waarop zich twee elektronen bevinden. Dit zal in wat volgt benoemd worden als een paar. De operator  $M_+$  telt eveneens het aantal paren maar telt de paren die zijn “omringd” door een vrij elektron aan elke zijde dubbel. Een voorbeeld van een toestand met een dergelijk paar is  $|u2d0\rangle$ . Deze paren zullen *omringde paren* heten. De operator  $M_-$  telt de paren die niet omringd zijn.

Geen van de operatoren  $M_{\text{int}}$ ,  $M_+$  en  $M_-$  is een ideale teloperator. Om die reden zal in deze verhandeling een andere keuze voor de teloperator gemaakt worden. Definieer eerst de operator  $F$  door

$$F = \prod_{i=1}^4 \left( b_{i,\uparrow}^\dagger b_{i,\downarrow}^\dagger + b_{i,\uparrow} b_{i,\downarrow} \right). \quad (3.43)$$

Deze operator vernietigt alle paren van elektronen en creëert paren van elektronen op roosterplaatsen die voorheen onbezet waren. De volgorde waarin dit product wordt uitgevoerd is dezelfde als voor (3.39), namelijk volgens de nummering van de roosterplaatsen.

De gebruikte teloperator wordt gegeven door

$$M = \sum_{i=1}^4 n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \left( 1 + \sum_{j \in \{-1,1\}} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} n_{i+j,\sigma} n_{i-j,\bar{\sigma}} F \right). \quad (3.44)$$

Wanneer deze uitdrukking wordt vergeleken met (3.42) is duidelijk dat  $M = M_+$  op de deelruimte van toestanden symmetrisch onder de verwisseling van lege en dubbel bezette roosterplaatsen en  $M = M_-$  op de deelruimte van toestanden antisymmetrisch onder deze operatie. Dit betekent dat de teloperator het totale aantal paren telt, plus of min het aantal omringde paren afhankelijk van de symmetrie van de toestand.

De berekening van de commutatoren van  $H$  en  $M$  gebeurde op analytische manier met het softwarepakket Maple. Deze commutatoren kunnen ook uitgerekend worden gebruikmakend van de uitdrukkingen (3.38) en (3.44). Dit is echter een bijzonder lijvige berekening. Daarenboven dient de derde commutator sterk vereenvoudigd te worden om te verifiëren dat is voldaan aan (2.10), waardoor deze methode in de praktijk niet efficiënt is. Aangezien dit voorbeeld een eenvoudig fermionisch systeem is, kan geopteerd worden voor een alternatieve methode om de operatoren  $H_{\text{ref}}$  en  $R$  te uit te drukken in functie van de fermionische ladder- en teloperatoren  $b_{i,\sigma}^{(\dagger)}$  en  $n_{i,\sigma}$ . Deze werkwijze is het eenvoudigst te begrijpen wanneer eerst wordt gerefereerd naar vergelijkingen (3.36)

en (3.37). Dit zijn uitdrukkingen voor  $H_{\text{ref}}$  en  $R$  zoals zij zijn berekend met de potentiaal als teloperator.

De voorwaarden opdat een elektronsprong een paar opbreekt zijn:

1. Het verplaatste elektron (met spin  $\sigma$ ) dient zich voor het springen te bevinden op een roosterplaats waar zich eveneens een elektron met tegengestelde spin bevindt. Dit is voldaan voor alle eigentoestanden van  $n_{j,\bar{\sigma}}$  met eigenwaarde één.
2. Het verplaatste elektron dient zich te verplaatsen naar een roosterplaats waar zich geen elektron met tegengestelde spin bevindt. Aan deze voorwaarde wordt beantwoord door eigentoestanden van de operator  $(1 - n_{i,\bar{\sigma}})$  met eigenwaarde één.

Deze observaties staan toe  $R_{\text{int}}$  te schrijven als een operator die werkt als de hopterm van het Hubbard model (1.45) wanneer aan de voorwaarden voor het opbreken van het paar is voldaan en als de nulafbeelding in alle andere gevallen. Een dergelijke operator wordt gegeven door

$$R_{\text{int}} = - \sum_{i,j=1}^4 t_{ij} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} (1 - n_{i,\bar{\sigma}}) n_{j,\bar{\sigma}}. \quad (3.45)$$

Dit is consistent met het resultaat in vergelijking (3.37) dat handmatig werd bekomen.

Voor het bepalen van de vernietigingsoperator  $R$  horend bij de teloperator  $M$  is het dus nodig operatoren  $A_{i,j,\sigma}$  te bepalen zodat

$$R = - \sum_{i,j=1}^4 t_{ij} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} A_{i,j,\sigma}. \quad (3.46)$$

Het bepalen van deze operatoren is volledig analoog aan het voorbeeld dat hierboven werd uitgewerkt. De ladderoperatoren worden gegeven door

$$R = - \sum_{i,j=1}^4 t_{ij} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left( b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} (1 - n_{i,\bar{\sigma}}) n_{j,\bar{\sigma}} + b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} \mathcal{P}_1 F \right) \quad (3.47)$$

$$R^\dagger = - \sum_{i,j=1}^4 t_{ij} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left( b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} n_{i,\bar{\sigma}} (1 - n_{j,\bar{\sigma}}) + \mathcal{P}_1 b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} F \right). \quad (3.48)$$

waarbij  $\mathcal{P}_1$  de projectieoperator op de deelruimte van toestanden met precies één omringd paar is. Het is eenvoudig in te zien dat

$$R + R^\dagger = - \sum_{i,j=1}^4 t_{ij} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} \quad (3.49)$$

daar geen enkele elektronsprong zowel het aantal paren als het aantal omringde paren behoudt. Uit vergelijking (2.11) volgt dan onmiddellijk

$$H_{\text{ref}} = \alpha \sum_{i=1}^4 n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}. \quad (3.50)$$

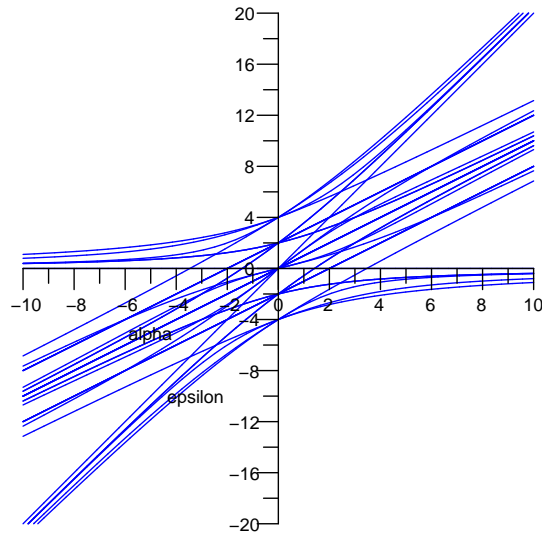
Gebruikmakend van de teloperator (3.44), de ladderoperatoren (3.47), (3.48) en de referentiehilbertiaan (3.50) kan het spectrum van de Hamiltoniaan (3.38) berekend worden. Met behulp van een softwarepakket zoals Maple kunnen de simpele representaties van de ladderalgebra eenvoudig geconstrueerd worden. De blokdiagonalisatie van de Hamiltoniaan die aldus wordt bekomen is precies diegene die werd bekomen in [5]. Dit is een gevolg van Stelling 7.

Tabel (3.1) bevat de eigenwaarden  $\lambda_i$  van  $H_{\text{ref}}$  en  $\xi_i$  van  $RR^\dagger$  voor elk van de multipletten. De uitdrukkingen voor de eigenwaarden zijn terug te vinden in tabel (3.2). Figuur (3.1) bevat het volledige spectrum terwijl figuren (3.2) en (3.3) de eigenwaarden tonen per multiplet. Bij wijze van overzicht werd in de appendix de Hamiltoniaan uitgeschreven in tridiagonaalvorm, samen met de basis van gemeenschappelijke eigentoestanden van  $H_{\text{ref}}$  en  $RR^\dagger$  waarin deze matrixelementen berekend werden.

Merk op dat er twee grondtoestanden zijn in dit model, één voor  $\alpha < 0$  en één voor  $\alpha > 0$ . Aangezien het rooster  $\Lambda$  uit dit voorbeeld tweedelig is, kan dit in verband gebracht worden met het theorema van Lieb (Stelling 2), die een voorspelling doet over de grondtoestand in het geval van afstotende interacties. De grondtoestand is niet ontaard voor  $\alpha \neq 0$  en in de limiet van sterke maar eindige afstoting geldt

$$\psi_{GS} \approx \frac{1}{\sqrt{12}} (|uudd\rangle + 2|udud\rangle + |uddu\rangle + |dwud\rangle + 2|dudu\rangle + |ddwu\rangle). \quad (3.51)$$

Deze toestand heeft een kleine bijdrage van paarvorming, wat kan gerelateerd worden aan antiferromagnetisme. Dat de spins niet uitsluitend afwisselend op en neer zijn geordend, kan aanzien worden als een gevolg van de eindige afmetingen van het systeem.



Figuur 3.1: Het volledige spectrum van de Hamiltoniaan (3.38) als functie van de interactieparameter  $\alpha$ . Merk op dat het spectrum symmetrisch is onder puntspiegeling door de oorsprong. Deze eigenschap zal opgaan voor elk van de multipletten afzonderlijk.

Multiplet	$\lambda_0$	$\lambda_1$	$\lambda_2$	$\xi_0$	$\xi_1$	Mult.
$S_1$	0					1
$S_2$	$\alpha$					6
$S_3$	$2\alpha$					1
$D_1$	$\alpha$	$\alpha$		2		4
$D_2$	0	$\alpha$		2		2
$D_3$	$\alpha$	$2\alpha$		2		2
$T_1$	0	$\alpha$	$2\alpha$	2	$\sqrt{12}$	1
$T_2$	0	$\alpha$	$2\alpha$	$\sqrt{12}$	2	1
$T_3$	0	$\alpha$	$\alpha$	$\sqrt{8}$	$\sqrt{8}$	1
$T_4$	$\alpha$	$\alpha$	$2\alpha$	$\sqrt{8}$	$\sqrt{8}$	1

Tabel 3.1: De  $\lambda_i$  en  $\xi_i$  voor alle multipletten. De multipliciteit stelt voor hoeveel multipletten bestaan met de gegeven parameters.

Multiplet	Eigenwaarde	Ontaarding
$S_1$	0	1
$S_2$	$\alpha$	6
$S_3$	$2\alpha$	1
$D_1$	$\alpha + 2$	4
$D_1$	$\alpha - 2$	4
$D_2$	$\frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2 + 16}$	2
$D_2$	$\frac{\alpha}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2 + 16}$	2
$D_3$	$\frac{3\alpha}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2 + 16}$	2
$D_3$	$\frac{3\alpha}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2 + 16}$	2
$T_1$	$\frac{1}{3}f_+(\alpha) + (\alpha^2 + 16)f_+(\alpha)^{-1} + \alpha$	1
$T_1$	$-\frac{1}{3}e^{-i\pi/3}f_+(\alpha) - e^{i\pi/3}(\alpha^2 + 16)f_+(\alpha)^{-1} + \alpha$	1
$T_1$	$-\frac{1}{3}e^{i\pi/3}f_+(\alpha) - e^{-i\pi/3}(\alpha^2 + 16)f_+(\alpha)^{-1} - \alpha$	1
$T_2$	$\frac{1}{3}f_-(\alpha) + (\alpha^2 + 16)f_-(\alpha)^{-1} + \alpha$	1
$T_2$	$-\frac{1}{3}e^{-i\pi/3}f_-(\alpha) - e^{i\pi/3}(\alpha^2 + 16)f_-(\alpha)^{-1} + \alpha$	1
$T_2$	$-\frac{1}{3}e^{i\pi/3}f_-(\alpha) - e^{-i\pi/3}(\alpha^2 + 16)f_-(\alpha)^{-1} - \alpha$	1
$T_3$	$\frac{1}{3}(g_+(\alpha) + (\alpha^2 + 48)g_+(\alpha)^{-1} + 2\alpha)$	1
$T_3$	$-\frac{1}{3}(e^{-i\pi/3}g_+(\alpha) + e^{i\pi/3}(\alpha^2 + 48)g_+(\alpha)^{-1} - 2\alpha)$	1
$T_3$	$-\frac{1}{3}(e^{i\pi/3}g_+(\alpha) + e^{-i\pi/3}(\alpha^2 + 48)g_+(\alpha)^{-1} + 2\alpha)$	1
$T_4$	$\frac{1}{3}(g_-(\alpha) + (\alpha^2 + 48)g_-(\alpha)^{-1} + 4\alpha)$	1
$T_4$	$-\frac{1}{3}(e^{-i\pi/3}g_-(\alpha) + e^{i\pi/3}(\alpha^2 + 48)g_-(\alpha)^{-1} - 4\alpha)$	1
$T_4$	$-\frac{1}{3}(e^{i\pi/3}g_-(\alpha) + e^{-i\pi/3}(\alpha^2 + 48)g_-(\alpha)^{-1} + 4\alpha)$	1

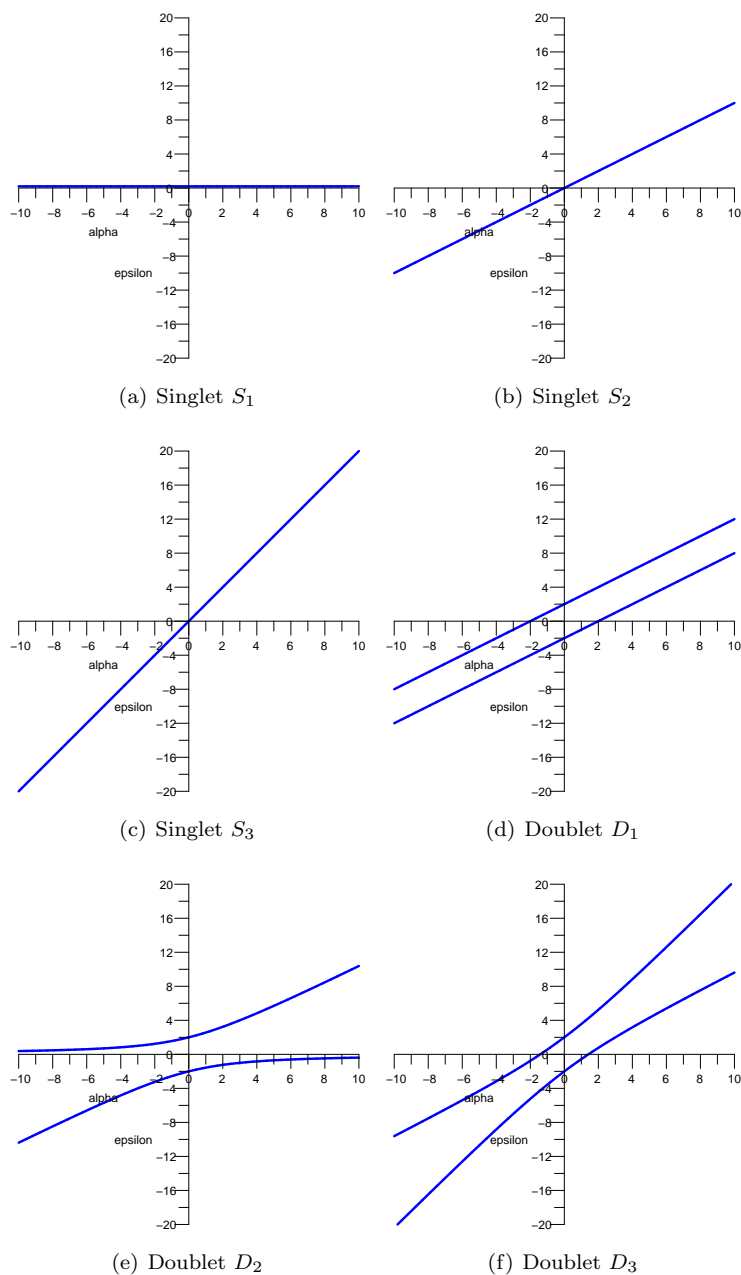
Tabel 3.2: De verschillende energieniveaus van dit systeem samen met de ont-aarding. De functies  $f_{\pm}(\alpha)$  en  $g_{\pm}(\alpha)$  worden gedefinieerd door

$$f_{\pm}(\alpha) = \sqrt[3]{\pm 108\alpha + \sqrt{-3\alpha^6 - 144\alpha^4 - 1008\alpha^2 - 12288}} \text{ en}$$

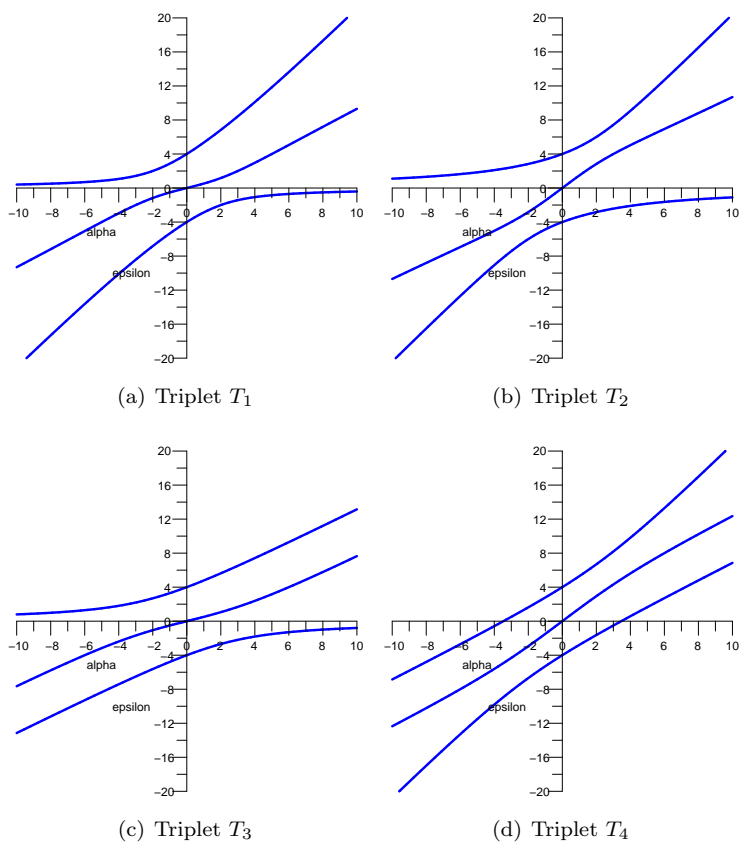
$$g_{\pm}(\alpha) = \sqrt[3]{\mp \alpha^3 \pm 36\alpha + 6\sqrt{-6\alpha^4 - 156\alpha^2 - 3072}}.$$

Deze resultaten zijn consistent met de resultaten bekomen in [5] en [6].





Figuur 3.2: De energieniveaus horend bij de  $M$ -singletten en -doubletten van de Hamiltoniaan (3.38).



Figuur 3.3: De energieniveaus horend bij de  $M$ -tripletten van de Hamiltoniaan (3.38). De grondtoestand van het systeem bevindt zich in het multiplet  $T_1$  wanneer  $\alpha < 0$  en in het multiplet  $T_2$  voor  $\alpha > 0$ . In afwezigheid van interacties is de grondtoestand viervoudig ontaard.

### 3.3 De Hubbard ring met zes plaatsen

Als tweede voorbeeld zal een Hubbard ring met zes plaatsen opgelost worden. Hoewel de meest interessante zesring die met spinneutrale halfgevulde band is, zal een ander voorbeeld opgelost worden. De reden daarvoor is dat er geen ideale teloperator gekens is voor dit systeem. Er bestaat echter een tweede interessante zesring met halfgevulde band, namelijk een model met één excitatie ten opzichte van de spingepolariseerde toestand. Dit systeem werd reeds bestudeerd in [21] maar daar werden niet alle eigentoestanden en eigenwaarden gevonden. De reden waarom dit systeem bijzonder interessant is in deze context is omdat quadrupletten voorkomen in het spectrum alsook tripletten die Stelling 5 duidelijk illustreren. Daarenboven zijn de berekeningen voor dit systeem volkomen analoog aan de berekeningen voor de Hubbard ring met vier plaatsen en halfgevulde band met netto spin  $\pm 1$ .

De Hamiltoniaan voor de Hubbard ring met zes plaatsen wordt gegeven door

$$H = - \sum_{i,j=1}^6 t_{ij} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} + \alpha \sum_{i=1}^6 n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}. \quad (3.52)$$

Opnieuw worden de coëfficiënten  $t_{ij}$  gekozen zodat enkel naaste nabuursprongen mogelijk zijn en dat met eenzelfde waarschijnlijkheidsamplitude zodat net als in het vorige voorbeeld  $\alpha$  de enige modelparameter is. In dit model dienen de indices van de operatoren te worden geïnterpreteerd modulo 6.

Opnieuw zal gewerkt worden in de computationele basis. Voor dit model worden de basistoestanden gegeven door

$$|k, l\rangle = \left( \prod_{j \neq l} b_{j,\uparrow}^\dagger \right) b_{k,\downarrow} \Phi_{\text{vac}} \quad (3.53)$$

waarbij  $\Phi_{\text{vac}}$  nog steeds het elektronvacuüm voorstelt. De volgorde waarin de de vijf elektronen met spin op gecreëerd worden is opnieuw de volgorde waarin de roosterplaatsen zijn genummerd. Uit vergelijking (3.53) volgt dat de toestand  $|k, l\rangle$  een toestand is waarbij zich op roosterplaats  $k$  een elektron met spin neer bevindt en op elke roosterplaats behalve plaats  $l$  zich een elektron met spin op bevindt.

De teloperator die zal gekozen worden is de operator

$$M = \sum_{i,j=1}^6 f(|i-j|) n_{i,\downarrow} (1 - n_{j,\uparrow}) \quad (3.54)$$

waarbij

$$f(x) = \min\{x, 6-x\}. \quad (3.55)$$

De operator  $M$  “meet” de kortste afstand (uitgedrukt in elektronsprongen) tussen het elektron met spin neer (kortweg *het elektron*) en de roosterplaats zonder elektron met spin op (kortweg *het gat*). Het is eenvoudig in te zien dat elke toegestane elektronsprong deze afstand zal verhogen of verlagen met waarde één. Dit betekent dat het enige stuk van de Hamiltoniaan dat commuteert met de teloperator opnieuw de potentiaal is en dus

$$H_{\text{ref}} = \alpha \sum_{i=1}^6 n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}. \quad (3.56)$$

De vernietigingsoperator  $R$  beschrijft alle elektronsprongen die de afstand tussen het gat en het elektron doen afnemen. Dit kan uitgedrukt worden als

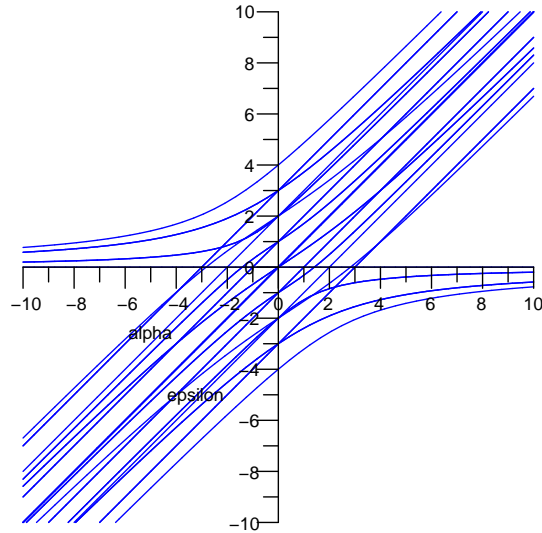
$$R = - \sum_{i,j=1}^6 t_{ij} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} \times \sum_{k=1}^6 \Theta(f(|k-j|) - f(|k-i|)) \left( \delta_{\sigma,\uparrow} b_{k,\downarrow}^\dagger b_{k,\downarrow} + \delta_{\sigma,\downarrow} b_{k,\uparrow}^\dagger b_{k,\uparrow} \right) \quad (3.57)$$

met  $\Theta(x)$  een indicatorfunctie gedefinieerd als

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{wanneer } x > 0 \\ 0 & \text{wanneer } x \leq 0. \end{cases} \quad (3.58)$$

Deze uitdrukkingen kunnen eveneens bekomen worden door de commutatoren van  $H$  met  $M$  met behulp van symbolische algebra uit te rekenen maar net als in het vorige voorbeeld is dat geen efficiënte werkwijze en dient er daarna sterk vereenvoudigd te worden.

Nu de operatoren  $M$ ,  $H_{\text{ref}}$  en  $RR^\dagger$  gekend zijn, kan gezocht worden naar de simpele representaties van de ladder algebra. De resultaten kunnen teruggevonden worden in de figuren en tabellen op deze en de volgende bladzijdes, gestructureerd zoals in het eerste voorbeeld het geval was. De basis van laddertoestanden kan teruggevonden worden in de appendix, net als de tridiagonaalvorm van de Hamiltoniaan.



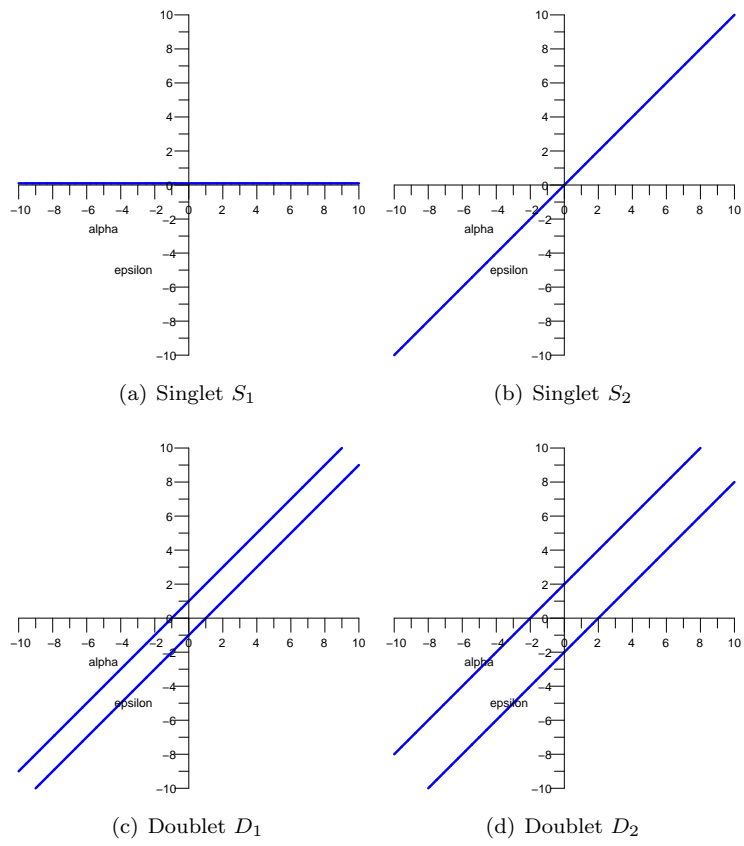
Figuur 3.4: Het volledige spectrum van de Hamiltoniaan (3.52) als functie van de interactieparameter  $\alpha$ . Ook dit spectrum is symmetrisch onder puntspiegeling om de oorsprong. Net als in het vierplaatsenmodel voldoen alle multipletten afzonderlijk aan deze eigenschap.

Multiplet	$\lambda_0$	$\lambda_1$	$\lambda_2$	$\lambda_3$	$\xi_0$	$\xi_1$	$\xi_2$	Mult.
$S_1$	0							1
$S_2$	$\alpha$							5
$D_1$	$\alpha$	$\alpha$			1			2
$D_2$	$\alpha$	$\alpha$			2			1
$T_1$	$\alpha$	$\alpha$	$\alpha$		$\sqrt{3}$	$\sqrt{6}$		2
$T_2$	0	$\alpha$	$\alpha$		$\sqrt{6}$	$\sqrt{3}$		2
$Q_1$	0	$\alpha$	$\alpha$	$\alpha$	$\sqrt{2}$	1	$\sqrt{2}$	2
$Q_2$	0	$\alpha$	$\alpha$	$\alpha$	$\sqrt{8}$	2	$\sqrt{8}$	1

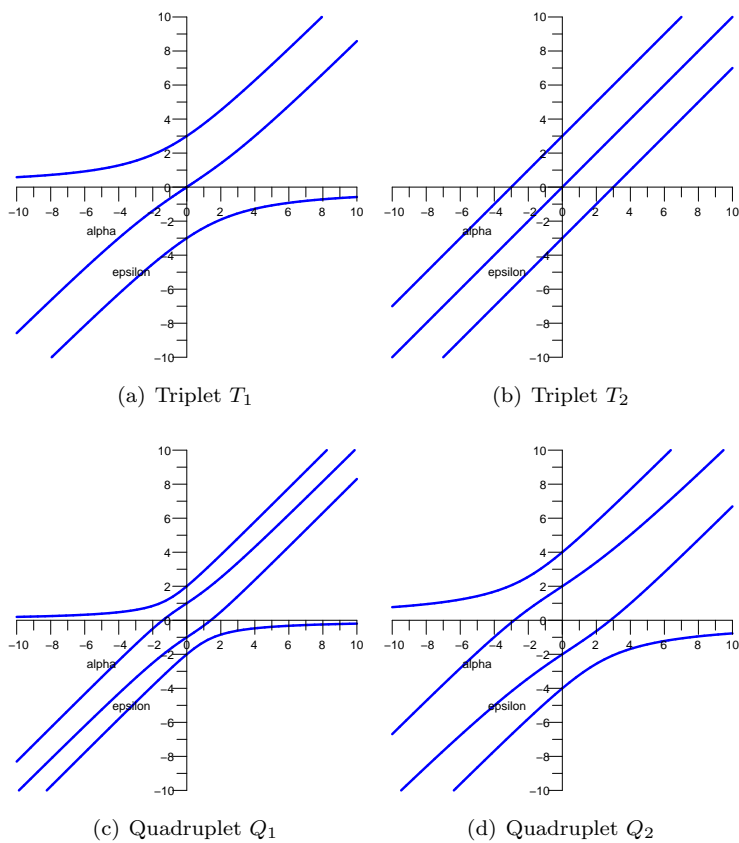
Tabel 3.3: De  $\lambda_i$  en  $\xi_i$  voor alle multipletten. De multipliciteit stelt voor hoeveel multipletten bestaan met de gegeven parameters.

Multiplet	Eigenwaarde	Ontaarding
$S_1$	0	1
$S_2$	$\alpha$	5
$D_1$	$\alpha + 1$	2
$D_1$	$\alpha - 1$	2
$D_2$	$\alpha + 2$	1
$D_2$	$\alpha - 2$	1
$T_1$	$\alpha$	2
$T_1$	$\alpha + 3$	2
$T_1$	$\alpha - 3$	2
$T_2$	$\frac{1}{3}(f(\alpha) + (\alpha^2 + 27)f(\alpha)^{-1} + 2\alpha)$	2
$T_2$	$-\frac{1}{3}(e^{\pi i/3}f(\alpha) + e^{\pi i/3}(\alpha^2 + 27)f(\alpha)^{-1} - 2\alpha)$	2
$T_2$	$-\frac{1}{3}(e^{-\pi i/3}f(\alpha) + e^{-\pi i/3}(\alpha^2 + 27)f(\alpha)^{-1} - 2\alpha)$	2

Tabel 3.4: De eigenwaarden van de singletten, doubletten en tripletten. De functie  $f(\alpha)$  wordt gedefinieerd door  $f(\alpha) = \sqrt[3]{-\alpha^3 + 9\sqrt{-243 - 27\alpha^2 - \alpha^4}}$ . De uitdrukkingen voor de eigenwaarden horend bij de quadrupletten werden niet opgenomen in de tabel daar deze te lijvig zijn. De triplettoestand met eigenwaarde  $\alpha$  is een voorbeeld van een toestand waarbij  $h_1 = 0$ . Dit is een toepassing van Stelling 5 voor  $k = 1$ .



Figuur 3.5: De energieniveaus horend bij de singletten en doubletten.



Figuur 3.6: De energieniveaus horend bij de tripletten en quadrupletten. Het multiplet  $Q_2$  bevat de grondtoestand van het systeem voor alle waarden van de interactieparameter.

## Hoofdstuk 4

# Besluit

In deze verhandeling werd een diagonalisatiemethode [9, 10] voor hermitische operatoren met een discreet spectrum (Hamiltonianen) behandeld. Er werd een algoritme uitgewerkt dat toestaat de eigenwaarden en eigentoestanden van de bestudeerde Hamiltonianen analytisch te bepalen. In het bijzonder brengt het algoritme de symmetrie van het systeem niet in rekening. Hiervoor werd aan de hand van de Hamiltoniaan een hulpoperator (de teloperator) een algebra ingevoerd die een veralgemening is van de algebra van de ladderoperatoren zoals die gekend zijn in de natuurkunde.

Het voordeel van deze methode ten opzichte van de klassieke symmetriemethoden is dat het niet nodig is de symmetriegroep van de Hamiltoniaan te kennen om de Hamiltoniaan in blokdiagonaal vorm te schrijven. Het vinden van een ideale teloperator volstaat. Er werd bewezen dat de blokdiagonalisatie die zo wordt bekomen equivalent is met blokdiagonalisatie gebruikmakend van de gemeenschappelijke symmetrieën van de Hamiltoniaan en de teloperator.

Bovenop de rechtstreekse voordelen bij het diagonaliseren biedt de teloperator-methode een zeer specifieke vorm voor de factorisatie van de karakteristieke determinant van de Hamiltoniaan. Deze vorm levert een uniform wiskundig kader waaruit een aantal eigenschappen van het spectrum eenvoudig kunnen afgeleid worden. Zo staan deze eigenschappen toe een additionele set van kruisingen tussen energieniveaus uit te sluiten, bovenop die kruisingen die zijn verboden als gevolg van het theorema dat werd bewezen door Wigner en von Neumann [11]. Dit heeft onder andere toepassingen in de studie van kwantumfaseovergangen en op die manier ook in onderzoek naar supergeleiders met hoge kritische temperatuur.

Een belangrijk nadeel van deze diagonalisatiemethode is dat er op het ogenblik van schrijven nog geen methode bestaat om een teloperator te construeren zodanig dat het volledige spectrum kan worden geconstrueerd gebruikmakende van deze methode. Ook is de klasse van Hamiltonianen waarvoor een ideale teloperator bestaat, niet gekend. Toekomstig onderzoek in deze context dient een antwoord te bieden op deze vragen.



# Bijlage A

## Appendix

### A.1 De coëfficiënten $h_i$

Zonder verlies van algemeenheid zullen hier de coëfficiënten  $g_i$  berekend worden voor singletten, doubletten en tripletten. De genormaliseerde coëfficiënten  $h_i$  kunnen uitgedrukt worden in deze variabelen door middel van de uitdrukking

$$h_i = g_i \left( \sum_{j=0}^{N-1} |g_j|^2 \right)^{-1/2}. \quad (\text{A.1})$$

#### Singlet

Voor een singlet is de enige vergelijking uit het stelsel (2.37) dezelfde als de eis dat de karakteristieke determinant gelijk is aan nul:

$$\varepsilon = \lambda_0 \quad (\text{A.2})$$

wat reeds geweten was uit de voorwaarden voor de constructiestelling.

#### Doublet

De karakteristieke vergelijking van  $H$  op een tweedimensionale simpele representatie van de ladderalgebra is van de vorm

$$\varepsilon^2 - (\lambda_0 + \lambda_1)\varepsilon + \lambda_0\lambda_1 - \xi_0^2 = 0 \quad (\text{A.3})$$

zodat de energie wordt gegeven door

$$\varepsilon_{\pm} = \frac{1}{2}(\lambda_0 + \lambda_1) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\lambda_1 - \lambda_0)^2 + 4\xi_0^2}. \quad (\text{A.4})$$

Dit betekent

$$\begin{aligned} g_1 &= \frac{\varepsilon - \lambda_0}{\xi_0} \\ &= \frac{1}{2\xi_0}(\lambda_1 - \lambda_0) \pm \frac{1}{2\xi_0}\sqrt{(\lambda_1 - \lambda_0)^2 + 4\xi_0^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

### Triplet

De karakteristieke vergelijking voor  $H$  op een driedimensionale simpele representatie van de ladder algebra is een polynoom van de vorm

$$x^3 + ax^2 + bx + c = 0 \quad (\text{A.6})$$

met coëfficiënten

$$a = -(\lambda_0 + \lambda_1 + \lambda_2) \quad (\text{A.7})$$

$$b = \lambda_0\lambda_1 + \lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_0 - \xi_0^2 - \xi_1^2 \quad (\text{A.8})$$

$$c = -\lambda_0\lambda_1\lambda_2 + \xi_0^2\lambda_2 + \xi_1^2\lambda_0. \quad (\text{A.9})$$

Een dergelijke polynoom heeft nulpunten gegeven door

$$x_0 = \frac{1}{6}f + \frac{2}{3}f' - \frac{1}{3}a \quad (\text{A.10})$$

$$x_{\pm} = -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{6}f + \frac{1}{6}f'\right) \pm i\frac{\sqrt{3}}{2}\left(\frac{1}{6}f - \frac{2}{3}f'\right) - \frac{1}{3}a \quad (\text{A.11})$$

en waarbij

$$f = \sqrt[3]{36ab - 108c - 8a^3 + 12\sqrt{12b^3 - 3a^2b^2 - 54abc + 81c^2 + 12a^3c}} \quad (\text{A.12})$$

$$f' = \frac{a^2 - 3b}{f}. \quad (\text{A.13})$$

De vergelijkingen van het stelsel (2.40) kunnen gebruikt worden om  $g_1$  en  $g_2$  uit te drukken in functie van  $\varepsilon$  en de parameters  $\lambda_i$  en  $\xi_i$ , namelijk

$$g_1 = \frac{\varepsilon - \lambda_0}{\xi_0} \quad (\text{A.14})$$

$$g_2 = \frac{\varepsilon - \lambda_0}{\varepsilon - \lambda_2} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.15})$$

### Quadruplet

Een quadruplet is het grootste multiplet waarvoor met zekerheid analytische oplossingen bestaan voor de energie als functie van  $\lambda_i$  en  $\xi_i$ . De karakteristieke vergelijking van  $H$  voor een vierdimensionale simpele representatie is een algemene vierdegraadspolynoom

$$x^4 + ax^3 + bx^2 + cx + d = 0 \quad (\text{A.16})$$

met als coëfficiënten

$$a = -(2\lambda_0 + \lambda_1 + \lambda_2) \quad (\text{A.17})$$

$$b = \lambda_0(\lambda_0 + \lambda_1 + \lambda_2) + (\lambda_0\lambda_1 + \lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_0) - 2\xi_0^2 - \xi_1^2 \quad (\text{A.18})$$

$$c = -\lambda_0(\lambda_0\lambda_1 + \lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_0) - \lambda_0\lambda_1\lambda_2 + 2\xi_1^2\lambda_0 + \xi_0^2(\lambda_2 - \lambda_1) \quad (\text{A.19})$$

$$d = \lambda_0^2(\lambda_1\lambda_2 - \xi_1^2) - \xi_0^2\lambda_0(\lambda_1 + \lambda_2) - \xi_0^4. \quad (\text{A.20})$$

Volgens de hoofdstelling van de algebra heeft een polynoom van de vorm (A.16) vier oplossingen in het complexe vlak. De analytische uitdrukkingen voor deze oplossingen zijn erg lijvig en zullen daarom niet expliciet uitgeschreven worden. Wanneer de energie gekend is, kunnen de coëfficiënten  $g_i$  als functie van de energie berekend worden uit het stelsel (2.40):

$$g_1 = \frac{\varepsilon - \lambda_0}{\xi_0} \quad (\text{A.21})$$

$$g_2 = \frac{\varepsilon - \lambda_0}{\xi_2^2 - (\varepsilon - \lambda_2)(\varepsilon - \lambda_3)} \left( \frac{\xi_1}{\xi_0} \right) \quad (\text{A.22})$$

$$g_3 = \frac{\varepsilon - \lambda_0}{\xi_2^2 - (\varepsilon - \lambda_2)(\varepsilon - \lambda_3)} \left( \frac{\xi_1}{\xi_0} \right) \frac{\xi_2}{(\varepsilon - \lambda_3)}. \quad (\text{A.23})$$





$$\begin{aligned}
D_{1,1} : \quad \varphi_9 &= -|20ud\rangle + |ud20\rangle + |du02\rangle - |02du\rangle \\
\varphi_{10} &= |2u0d\rangle - |u2d0\rangle - |d0u2\rangle + |0d2u\rangle \\
D_{1,2} : \quad \varphi_{11} &= -|20du\rangle + |ud02\rangle + |du20\rangle - |02ud\rangle \\
\varphi_{12} &= |2d0u\rangle - |u0d2\rangle - |d2u0\rangle + |0u2d\rangle \\
D_{1,3} : \quad \varphi_{13} &= |2du0\rangle + |u02d\rangle + |d20u\rangle + |0ud2\rangle \\
\varphi_{14} &= -|2d0u\rangle - |u0d2\rangle - |d2u0\rangle - |0u2d\rangle \\
D_{1,4} : \quad \varphi_{15} &= |2ud0\rangle + |u20d\rangle + |d02u\rangle + |0du2\rangle \\
\varphi_{16} &= -|2u0d\rangle - |u2d0\rangle - |d0u2\rangle - |0d2u\rangle \\
D_{2,1} : \quad \varphi_{17} &= -|uudd\rangle + |dduu\rangle \\
\varphi_{18} &= -|2ud0\rangle + |u20d\rangle + |2du0\rangle + |u02d\rangle \\
&\quad -|d20u\rangle - |0ud2\rangle - |d02u\rangle + |0du2\rangle \\
D_{2,2} : \quad \varphi_{19} &= -|uddu\rangle + |duud\rangle \\
\varphi_{20} &= -|20ud\rangle + |ud20\rangle + |20du\rangle + |ud02\rangle \\
&\quad -|du20\rangle - |02ud\rangle - |du02\rangle + |02du\rangle \\
D_{3,1} : \quad \varphi_{21} &= |2ud0\rangle - |u20d\rangle + |2du0\rangle + |u02d\rangle \\
&\quad -|d20u\rangle - |0ud2\rangle + |d02u\rangle - |0du2\rangle \\
\varphi_{22} &= |2200\rangle - |0022\rangle \\
D_{3,2} : \quad \varphi_{23} &= |20ud\rangle - |ud20\rangle + |20du\rangle + |ud02\rangle \\
&\quad -|du20\rangle - |02ud\rangle + |du02\rangle - |02du\rangle \\
\varphi_{24} &= |2002\rangle - |0220\rangle \\
T_{1,1} : \quad \varphi_{25} &= |uudd\rangle - |uddu\rangle - |duud\rangle + |dduu\rangle \\
\varphi_{26} &= |2ud0\rangle - |u20d\rangle + |2du0\rangle + |20ud\rangle \\
&\quad +|ud20\rangle - |u02d\rangle + |20du\rangle + |ud02\rangle \\
&\quad +|du20\rangle + |02ud\rangle - |d20u\rangle + |du02\rangle \\
&\quad +|02du\rangle + |0ud2\rangle - |d02u\rangle + |0du2\rangle \\
\varphi_{27} &= -|2200\rangle - 2|2020\rangle - |2002\rangle - |0220\rangle - 2|0202\rangle - |0022\rangle \\
T_{2,1} : \quad \varphi_{28} &= |uudd\rangle + 2|udud\rangle + |uddu\rangle + |duud\rangle + 2|dudu\rangle + |dduu\rangle \\
\varphi_{29} &= |2ud0\rangle - |u20d\rangle + |2du0\rangle - |20ud\rangle \\
&\quad -|ud20\rangle - |u02d\rangle - |20du\rangle - |ud02\rangle \\
&\quad -|du20\rangle - |02ud\rangle - |d20u\rangle - |du02\rangle \\
&\quad -|02du\rangle + |0ud2\rangle - |d02u\rangle + |0du2\rangle \\
\varphi_{30} &= -|2200\rangle + |2002\rangle + |0220\rangle - |0022\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{3,1} : \varphi_{31} &= -|udud\rangle + |dudu\rangle \\
\varphi_{32} &= |2ud0\rangle + |u20d\rangle - |2du0\rangle + |20ud\rangle \\
&\quad + |ud20\rangle + |u02d\rangle - |20du\rangle + |ud02\rangle \\
&\quad - |du20\rangle + |02ud\rangle - |d20u\rangle - |du02\rangle \\
&\quad - |02du\rangle + |0ud2\rangle - |d02u\rangle - |0du2\rangle \\
\varphi_{33} &= -|2u0d\rangle - |u2d0\rangle + |2d0u\rangle - |u0d2\rangle \\
&\quad + |d2u0\rangle - |0u2d\rangle + |d0u2\rangle + |0d2u\rangle \\
T_{4,1} : \varphi_{34} &= -|2u0d\rangle - |u2d0\rangle - |2d0u\rangle + |u0d2\rangle \\
&\quad - |d2u0\rangle + |0u2d\rangle + |d0u2\rangle + |0d2u\rangle \\
\varphi_{35} &= |2ud0\rangle + |u20d\rangle + |2du0\rangle + |20ud\rangle \\
&\quad + |ud20\rangle - |u02d\rangle + |20du\rangle - |ud02\rangle \\
&\quad + |du20\rangle - |02ud\rangle + |d20u\rangle - |du02\rangle \\
&\quad - |02du\rangle - |0ud2\rangle - |d02u\rangle - |0du2\rangle \\
\varphi_{36} &= -|2020\rangle + |0202\rangle
\end{aligned}$$

Bij wijze van illustratie zullen een aantal doublettoestanden hier expliciet geconstrueerd worden. Deze toestanden zijn lineaire combinaties van  $\varphi_{17}$  en  $\varphi_{18}$ . De bijhorende parameters zijn af te lezen uit  $H_2$ , meerbepaald in het vijfde  $2 \times 2$ -blok en worden gegeven door  $\lambda_0 = 0$ ,  $\lambda_1 = \alpha$  en  $\xi_0 = 2$ . Toepassen van vergelijking (A.5) levert

$$g_{1,\pm} = \frac{1}{4}\alpha \pm \frac{1}{4}\sqrt{\alpha^2 + 16}. \quad (\text{A.24})$$

Dit betekent dat de overeenkomstige eigentoestanden van  $H$  gegeven worden door de uitdrukking

$$\begin{aligned}
\psi_{\pm}(\alpha) &= \frac{1}{\sqrt{1 + g_{1,\pm}^2}}\varphi_{17} + \frac{g_{1,\pm}}{\sqrt{1 + g_{1,\pm}^2}}\varphi_{18} \\
&= \frac{4}{\sqrt{16 + (\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 16})^2}}\varphi_{17} + \frac{\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 16}}{\sqrt{16 + (\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 16})^2}}\varphi_{18}. \quad (\text{A.25})
\end{aligned}$$

Merk op dat de coëfficiënten horend bij elk van de doublettoestanden deze vorm hebben voor de eerste vier doubletten. De vier overige doubletten bestaan uit eigentoestanden van de vorm

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_9 \pm \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_{10} \quad (\text{A.26})$$

waarbij het eerste doublet als voorbeeld werd gekozen.





### A.3.2 De gebruikte basis

Hier werd de basis van eigentoestanden van  $M$  voor elk van de simpele algebra-representaties uitgeschreven analoog zoals gebeurde voor het eerste voorbeeld. Opnieuw werden de basisvectoren vermeld op een triviale normalisatiefactor na en is de relatieve fase zodanig gekozen dat de  $\xi_j$  positief zijn. Ook hier zijn de toestanden gegroepeerd per multiplet.

$$\begin{aligned}
S_{1,1} : \varphi_1 &= |1,1\rangle - |2,2\rangle + |3,3\rangle - |4,4\rangle + |5,5\rangle - |6,6\rangle \\
S_{2,1} : \varphi_2 &= |1,2\rangle - |2,3\rangle + |3,4\rangle - |4,5\rangle + |5,6\rangle - |6,1\rangle \\
S_{2,2} : \varphi_3 &= |1,3\rangle - |2,4\rangle + |3,5\rangle - |4,6\rangle + |5,1\rangle - |6,2\rangle \\
S_{2,3} : \varphi_4 &= |1,4\rangle - |2,5\rangle + |3,6\rangle - |4,1\rangle + |5,2\rangle - |6,3\rangle \\
S_{2,4} : \varphi_5 &= |1,5\rangle - |2,6\rangle + |3,1\rangle - |4,2\rangle + |5,3\rangle - |6,4\rangle \\
S_{2,5} : \varphi_6 &= |1,6\rangle - |2,1\rangle + |3,2\rangle - |4,3\rangle + |5,4\rangle - |6,5\rangle \\
D_{1,1} : \varphi_7 &= |1,6\rangle - |6,1\rangle + |2,3\rangle - |3,2\rangle - |3,4\rangle + |4,3\rangle + |5,6\rangle - |6,5\rangle \\
&\varphi_8 = -|1,3\rangle + |3,1\rangle - |2,6\rangle + |6,2\rangle + |3,5\rangle - |5,3\rangle - |4,6\rangle + |6,4\rangle \\
D_{1,2} : \varphi_9 &= |1,2\rangle - |2,1\rangle - |3,4\rangle + |4,3\rangle + |4,5\rangle - |5,4\rangle - |6,1\rangle + |1,6\rangle \\
&\varphi_{10} = |1,5\rangle + |5,1\rangle + |1,3\rangle + |3,1\rangle + |2,4\rangle - |4,2\rangle - |4,6\rangle + |6,4\rangle \\
D_{2,1} : \varphi_{11} &= |1,2\rangle - |2,1\rangle + |2,3\rangle - |3,2\rangle + |3,4\rangle - |4,3\rangle \\
&\quad + |4,5\rangle - |5,4\rangle + |5,6\rangle - |6,5\rangle + |6,1\rangle - |1,6\rangle \\
&\varphi_{12} = |1,5\rangle - |5,1\rangle - |1,3\rangle + |3,1\rangle + |2,6\rangle - |6,2\rangle \\
&\quad - |2,4\rangle + |4,2\rangle - |3,5\rangle + |5,3\rangle - |4,6\rangle + |6,4\rangle \\
T_{1,1} : \varphi_{13} &= |1,2\rangle - |2,1\rangle + |1,6\rangle - |6,1\rangle + 2|2,3\rangle - 2|3,2\rangle \\
&\quad - |4,5\rangle + |5,4\rangle + |3,4\rangle - |4,3\rangle - 2|5,6\rangle + 2|6,5\rangle \\
&\varphi_{14} = -|1,5\rangle + |5,1\rangle - |1,3\rangle + |3,1\rangle - |2,4\rangle + |4,2\rangle + |4,6\rangle - |6,4\rangle \\
&\varphi_{15} = 2|1,4\rangle - 2|4,1\rangle + |2,5\rangle - |5,2\rangle - |3,6\rangle + |6,3\rangle \\
T_{1,2} : \varphi_{16} &= |1,2\rangle - |2,1\rangle - |1,6\rangle + |6,1\rangle - |4,5\rangle + |5,4\rangle - |3,4\rangle + |4,3\rangle \\
&\varphi_{17} = |1,5\rangle + |5,1\rangle - |1,3\rangle + |3,1\rangle + 2|2,6\rangle - 2|6,2\rangle \\
&\quad + |2,4\rangle - |4,2\rangle + 2|3,5\rangle - 2|5,3\rangle + |4,6\rangle - |6,4\rangle \\
&\varphi_{18} = -|2,5\rangle + |5,2\rangle - |3,6\rangle + |6,3\rangle \\
T_{2,1} : \varphi_{19} &= |1,1\rangle + 2|2,2\rangle + |3,3\rangle + |4,4\rangle + 2|5,5\rangle + |6,6\rangle \\
&\varphi_{20} = -|1,2\rangle - |2,1\rangle - |2,3\rangle - |3,2\rangle + |4,5\rangle + |5,4\rangle + |5,6\rangle + |6,5\rangle \\
&\varphi_{21} = -|1,5\rangle - |5,1\rangle + 2|1,3\rangle + 2|3,1\rangle + |2,6\rangle + |6,2\rangle \\
&\quad + |2,4\rangle + |4,2\rangle - |3,5\rangle - |5,3\rangle + 2|4,6\rangle + 2|6,4\rangle \\
T_{2,2} : \varphi_{22} &= -|1,1\rangle + |3,3\rangle + |4,4\rangle - |6,6\rangle \\
&\varphi_{23} = 2|1,6\rangle + 2|6,1\rangle + |1,2\rangle + |2,1\rangle - |2,3\rangle + |3,2\rangle \\
&\quad - 2|3,4\rangle - 2|4,3\rangle - |4,5\rangle - |5,4\rangle + |5,6\rangle + |6,5\rangle \\
&\varphi_{24} = -|1,5\rangle - |5,1\rangle - |2,6\rangle - |6,2\rangle + |2,4\rangle + |4,2\rangle + |3,5\rangle + |5,3\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Q_{1,1}: \varphi_{25} &= |1,1\rangle - 2|2,2\rangle + |3,3\rangle + |4,4\rangle - 2|5,5\rangle + |6,6\rangle \\
\varphi_{26} &= -2|1,6\rangle + |1,2\rangle + |2,3\rangle + |2,1\rangle - 2|3,4\rangle + |3,2\rangle \\
&\quad + |4,5\rangle - 2|4,3\rangle + |5,6\rangle + |5,4\rangle + |6,5\rangle - 2|6,1\rangle \\
\varphi_{27} &= |1,5\rangle - 2|1,3\rangle + |2,6\rangle + |2,4\rangle + |3,5\rangle - 2|3,1\rangle \\
&\quad - 2|4,6\rangle + |4,2\rangle + |5,3\rangle + |5,1\rangle - 2|6,4\rangle + |6,2\rangle \\
\varphi_{28} &= |1,4\rangle - 2|2,5\rangle + |3,6\rangle + |4,1\rangle - 2|5,2\rangle + |6,3\rangle \\
Q_{1,2}: \varphi_{29} &= |1,1\rangle - |3,3\rangle + |4,4\rangle - |6,6\rangle \\
\varphi_{30} &= -|1,2\rangle + |2,3\rangle - |2,1\rangle + |3,2\rangle - |4,5\rangle + |5,6\rangle - |5,4\rangle + |6,4\rangle \\
\varphi_{31} &= -|1,3\rangle + |2,6\rangle - |2,4\rangle + |3,5\rangle - |4,2\rangle + |5,3\rangle - |5,1\rangle + |6,2\rangle \\
\varphi_{32} &= |1,4\rangle - |3,6\rangle + |4,1\rangle - |6,3\rangle \\
Q_{2,1}: \varphi_{33} &= |1,1\rangle + |2,2\rangle + |3,3\rangle + |4,4\rangle + |5,5\rangle + |6,6\rangle \\
\varphi_{34} &= -|1,6\rangle - |1,2\rangle - |2,3\rangle - |2,1\rangle - |3,4\rangle - |3,2\rangle \\
&\quad - |4,2\rangle - |4,5\rangle - |5,3\rangle - |5,6\rangle - |6,4\rangle - |6,1\rangle \\
\varphi_{35} &= |1,3\rangle + |1,5\rangle + |2,4\rangle + |2,6\rangle + |3,1\rangle + |3,5\rangle \\
&\quad + |4,2\rangle + |4,6\rangle + |5,3\rangle + |5,1\rangle + |6,4\rangle + |6,2\rangle \\
\varphi_{36} &= -|1,4\rangle - |2,5\rangle - |3,6\rangle - |4,1\rangle - |5,2\rangle - |6,3\rangle
\end{aligned}$$

# Bibliografie

- [1] N. H. Abel, *Beweis der Unmöglichkeit, algebraische Gleichungen von höheren Graden als dem vierten allgemein aufzulösen*. J. reine angew. Math. **1**, 65 (1826).
- [2] H. Grosse, *The Symmetry of the Hubbard Model*, Lett. in Math. Phys. **18** 151-156 (1989)
- [3] A. Yuzbashyan, B.L. Altshuler, B.S. Shastry, *The origin of degeneracies and crossings in the 1d Hubbard model*, J. Phys. A **35** 7525-7547 (2002)
- [4] H.K. Owusu, K. Wagh en E.A. Yuzbashyan, *The Link between Integrability, Level Crossings, and Exact Solution in Quantum Models*, J. Phys. A: Math. Theory **42** 035206 (2009)
- [5] C. Noce en M. Cuoco, *Exact-diagonalization method for correlated-electron models*, Phys. Rev. B **54** (1996)
- [6] R. Schumann, *Thermodynamics of a 4-site Hubbard model by analytical diagonalisation*, Ann. Phys. (Leipzig) **11** 49-87 (2002)
- [7] O.J. Heilmann en E.H. Lieb, *Violation of the noncrossing rule: the Hubbard Hamiltonian for benzene*, Ann. NY Acad. Sci. **172**, 584-617 (1971)
- [8] F.H.L. Essler en V.E. Korepin, *Scattering Matrix and Excitation Spectrum of the Hubbard Model*, Phys. Rev. Lett. **72** 908-911 (1994)
- [9] J. Naudts, T. Verhulst en B. Anthonis, *Counting operator analysis of the discrete spectrum of some model Hamiltonians*, arXiv:0811:3073 (2009)
- [10] T. Verhulst, B. Anthonis, J. Naudts, *Analysis of the  $N=4$  Hubbard ring using counting operators*, arXiv:0811:3077, aanvaard voor publicatie in Phys. Lett. A. (2009)
- [11] J. von Neumann en E. Wigner, *Über das Verhalten von Eigenwerten bei adiabatischen Prozessen*, Physik. Zeitschr. **30**, 467-470 (1929)
- [12] L. Dolan en M. Grady, *Conserved charges from self-duality*, Phys. Rev. D **25** (1982)
- [13] B. Davies, *Onsager's Algebra and superintegrability*, J. Phys. A **23** 2245-2261 (1990)

- [14] H. Tasaki, *The Hubbard model – an introduction and selected rigorous results*, J. Phys.: Condens. Matter **10**, 435 (1998)
- [15] J. Hubbard, *Electron Correlations in Narrow Energy Bands*, Proc. R. Soc. (London) A **276**, 238 (1963)
- [16] E.H. Lieb, *Two theorems on the Hubbard model*, Phys. Rev. Lett. **62** 1201 (1989)
- [17] C.W. Curtis, *Representation theory of finite groups and associative algebras*, boek, uitgeverij Wiley & Sons, 40 (1962)
- [18] E.T. Jaynes en F.W. Cummings, *Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser*, Proc. IEEE **51** (1963)
- [19] E. Witten, *Dynamical Breaking of Supersymmetry*, Nucl. Phys. B **188** 513-544 (1981)
- [20] M. Chaichian en R. Hagedorn, *Symmetries in Quantum Mechanics: From Angular Momentum to Supersymmetry*, boek, Graduate Series in Physics (1997)
- [21] B. Anthonis, T. Verhulst, J. Naudts, *Theoretische proef voor het bachelordiploma – Entanglement*, Theoretische bachelorproef aan de Universiteit Antwerpen, niet gepubliceerd (2007)