

**Mathematische Aspekte des Ferromagnetismus im
HFz-Hubbardmodell:**

**Rigidität der Lösung des Minimierungsproblems
bezüglich des Kopplungsparameters**

Dissertation
zur Erlangung des Grades
„Doktor der Naturwissenschaften“

am Fachbereich Mathematik
der Johannes Gutenberg-Universität
in Mainz

Marcos Vinicio Travaglia
geboren in Rio do Sul
Santa Catarina
Brasilien

Mainz, 22. August 2004

D77 Mainzer Dissertation

Tag der mündlichen Prüfung: 22.11.2004

(D 77) Dissertation, Johannes Gutenberg-Universität Mainz.

VORWORT

An dieser Stelle möchte ich meinem Doktorvater für die Motivation und Betreuung dieser Arbeit während ihrer Erstellung danken. Den beiden Gutachter möchte ich für Korrekturen und Vorschläge danken. Für die Hauptidee des Kapitels 6 bedanke ich mich bei einem Mitverfasser meines Doktorvaters. Dem Professor, der mich mit meinem Doktorvater in Kontakt gebracht hat, danke ich. Meinen Freunden der Mainzer Universität bin ich dankbar für die moralische Unterstützung, Diskussionen und die angenehme Atmosphäre. Dem Freund, der mir beim Korrekturlesen einen großen Teil dieser Arbeit geholfen hat, danke ich. Schließlich, aber nicht zuletzt, möchte ich meiner Familie für die moralische Unterstützung danken.

Zusammenfassung

Mit dem HFz-Hubbardmodell meinen wir das übliche Hubbardmodell für alle Dimensionen mit der Einschränkung auf die Menge der Slaterdeterminanten, wobei allerdings die Spinwellen dieser Slaterdeterminanten nur Bewegung parallel zur z -Richtung haben.

Für dieses Modell mit kleiner Füllung ist es uns gelungen zu beweisen, dass der Ferromagnetismus für große, aber endliche Kopplung entsteht.

Von einem mathematischen Gesichtspunkt aus wird das obige Resultat wesentlich aus folgender unteren Schranke mit Randterm an dem folgenden nichtlinearen Energiefunktional $\mathcal{E}^{u,\mu}$ abgeleitet:

$$\mathcal{E}^{u,\mu}(\xi, \eta) \geq E_{\text{ferro}}(\mu) + \mathcal{F}(u, \mu) |\partial\Omega_\xi| \quad (*)$$

mit $\mathcal{F}(u, \mu) > 0$ vorausgesetzt, die Kopplung $u > u_{cr}(\mu)$, wobei $u_{cr}(\mu)$ **endlich** für alle Füllungen $0 < \mu < 1$ ist.

Hierbei ist $E_{\text{ferro}}(\mu)$ (die ferromagnetische Energie) selbst eine obere Schranke bezüglich u an der *Minimumenergie*:

$$E^u(\mu) := \min_{(\xi, \eta) \in \mathbf{K}} \mathcal{E}^{u,\mu}(\xi, \eta).$$

Das *HFz-Energiefunktional* $\mathcal{E}^{u,\mu}$ und sein Definitionsbereich \mathbf{K} für das *HFz-Hubbardmodell* sind gegeben durch:

$$\mathcal{E}^{u,\mu}(\xi, \eta) := \text{Tr}\{(-\Delta - \mu\mathbf{1})(\xi + \eta)\} + u \sum_{x \in \Lambda} \langle x | \xi x \rangle \langle x | \eta x \rangle \quad \left(\begin{array}{l} \text{HFz-Energie-} \\ \text{funktional} \end{array} \right)$$

bzw.

$$\mathbf{K} := K(\Lambda) \times K(\Lambda) \quad (\text{Variationsmenge})$$

Hierbei ist $K(\Lambda)$ die Menge aller $|\Lambda| \times |\Lambda|$ komplexen Matrizen ξ , die $\mathbf{0} \leq \xi \leq \mathbf{1}$ als quadratische Form erfüllen. Weiterhin ist das Gitter Λ durch $(\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ ($d \in \mathbb{N}$ die Dimension) gegeben, dessen Kantenlänge L hinreichend groß ($L > L_{cr}(\mu, d)$) sein muss. Schließlich ist $-\Delta$ der diskrete Laplacian-Operator auf dem Gitter Λ .

Die Menge Ω_ξ in (*) ist eine Teilmenge des Gitters Λ und hängt von einem kleinen Parameter $0 < \delta_{cr}(\mu, d) \leq 1$ ab, nämlich:

$$\Omega_\xi := \{ x \in \Lambda \mid \langle x | \xi x \rangle < \delta_{cr}(\mu, d) \}.$$

Aus (*) folgt

1. Der Minimumwert des Energiefunktionals ändert sich nicht mehr, wenn die Kopplung $u > u_{cr}(\mu, d)$ ist, nämlich:

$$E^u(\mu) = E_{\text{ferro}}(\mu) \quad \text{für alle } u > u_{cr}(\mu, d) \text{ mit } u_{cr}(\mu, d) \text{ endlich !}$$

2. Wenn $u > u_{cr}(\mu, d)$ ist, dann gibt es nur und genau zwei Klassen von Minimierenden (ξ_*, η_*) für das HFz-Energiefunktional, nämlich:

Entweder $(\xi_*, \eta_*) = (\xi_* \in \Gamma_{\text{ferro}}, \mathbf{0})$ oder $(\xi_*, \eta_*) = (\mathbf{0}, \eta_* \in \Gamma_{\text{ferro}})$,

Hierbei ist $(\Gamma_{\text{ferro}}, \mathbf{0}) \subset \mathbf{K}$ die Menge aller vollpolarisierten Matrizen (Zustände) mit kleinster Energie, die in diesem Fall die *ferromagnetische Energie* $E_{\text{ferro}}(\mu, d)$ ist, nämlich:

$$E_{\text{ferro}}(\mu, d) := \min_{(\xi, \mathbf{0}) \in \mathbf{K}} \mathcal{E}^{u, \mu}(\xi, \mathbf{0})$$

Die Folgerungen 1. und 2. bedeuten genau, dass Ferromagnetismus für große, aber endliche Kopplung entsteht.

Zusammenfassend beweisen wir in dieser Arbeit die untere Schranke (*) für das HFz-Hubbardmodell.

P.S. Die Veröffentlichung dieser Dissertation in Form eines Artikels (*paper*) ist eine Zusammenarbeit mit Prof. Volker Bach und Prof. Elliott Lieb ([BLT 05]), die im Internet (<http://tw.arxiv.org/pdf/cond-mat/0506695>) am 27.06.2005 unter dem Titel "*Ferromagnetism of the Low-Density Hubbard Model in the Hartree-Fock Approximation*" erschienen ist.

Schluss

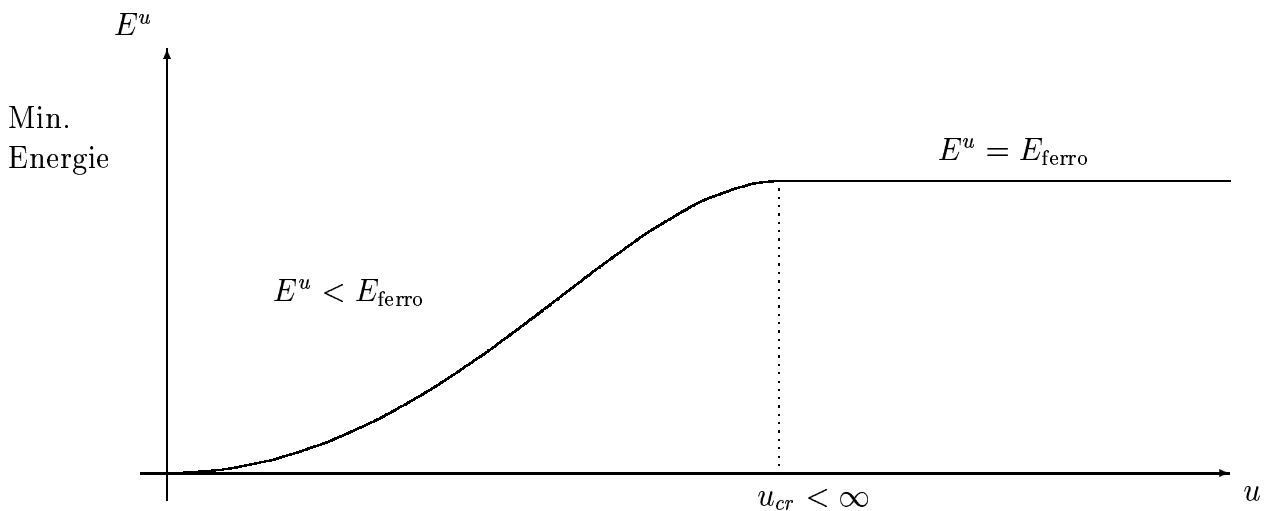
Mit dem HFz-Hubbardmodell konnten wir mathematisch bestätigen, dass Ferromagnetismus einen reinen quantenmechanischen Ursprung hat, nämlich:

Das Zusammenspiel zwischen der **Bewegung** - t - und der **Kopplung** - u - von Elektronen in einem Festkörper verursacht den Ferromagnetismus, wenn u hinreichend groß, aber endlich und die Füllung μ hinreichend klein ist. Erinnern wir uns, dass der Hamiltonoperator für das Standard-Hubbardmodell folgendermaßen gegeben ist:

$$\hat{H}(t, u, \mu) = -t \sum_{\substack{\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\} \\ |x-y|=1}} C_{x\sigma}^\dagger C_{y\sigma} + u \sum_{x \in \Lambda} n_{x\uparrow} n_{x\downarrow} + (2d - \mu) \sum_{x \in \Lambda} n_{x\uparrow} + n_{x\downarrow}$$

Neu!!! : Ferromagnetismus entsteht schon mit endlicher Kopplung u .

Graphisch haben wir Folgendes:



und

Die Minimierenden sind

entweder $\dots \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \dots$

oder $\dots \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow \dots$

Die Abhängigkeit von u_{cr} bezüglich des chemischen Potentials μ und der Dimension d ist durch das folgende Phasendiagramm gegeben:

Phasendiagramm für das HFz-Hubbardmodell

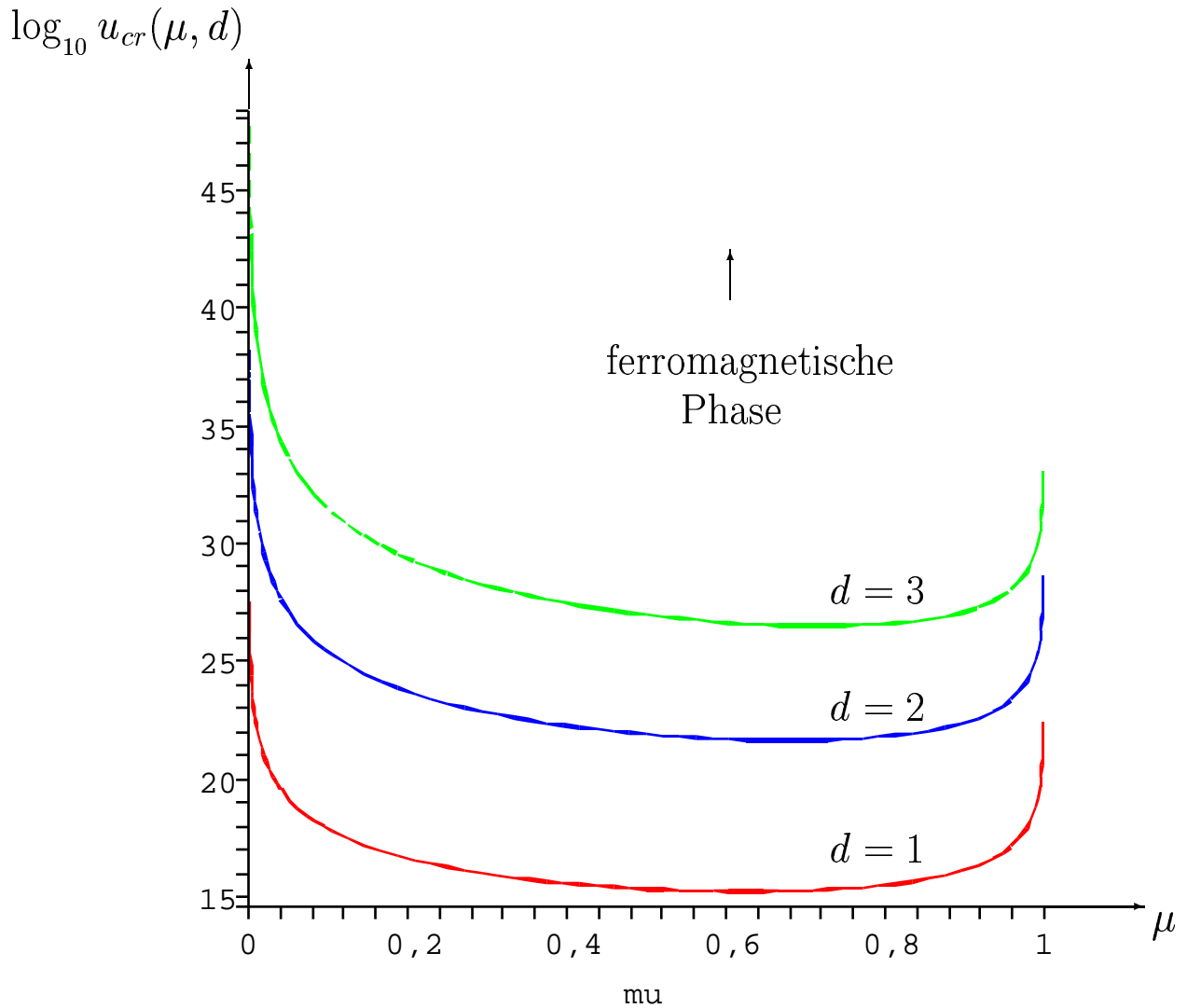


Abb.: Phasendiagramm für das HFz-Hubbardmodell.
Oberhalb jeder Kurve der jeweiligen Dimension ist die Existenz der ferromagnetischen Phase gesichert.

Bemerkung: Für praktische Zwecke können wir $u_{cr}(\mu, d)$ folgendermaßen setzen:

$$u_{cr}(\mu, d) = \left(\frac{1}{\tilde{\alpha}_1(\mu, d)} \right)^{3.62} \quad \text{für alle } 0 < \mu < 1 \text{ und } d=1, 2 \text{ und } 3.$$

Hierbei ist $\tilde{\alpha}_1(\mu, d)$ folgendermaßen definiert:

$$\tilde{\alpha}_1(\mu, d) := \left(1 + \frac{1}{4d} \right) \frac{1}{(4d)^2} \frac{(1-\mu)}{(4d-\mu)} \frac{1}{8} \frac{|S_d|}{(2\pi)^d} \left(\mu/2 \right)^{\frac{2+d}{2}}$$

Die Interpretation von $\tilde{\alpha}_1(\mu, d)$ zeigt sich als eine untere Schranke mit Randterm an folgendem *Lokalisationsfehler*: Für alle beliebigen Teilmengen Ω von $\Lambda := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ gilt Folgendes:

$$\underbrace{\sum_{e_j < 0} e_j(\Omega) + \sum_{e_j < 0} e_j(\Omega^c) - \sum_{e_j < 0} e_j(\Omega \cup \Omega^c = \Lambda)}_{\text{Lokalisationsfehler}} \geq \tilde{\alpha}_1(\mu, d) |\partial\Omega|$$

Hierbei sind $\Omega^c := \Lambda \setminus \Omega$, $e_j(\Omega)$ und $e_j(\Omega^c)$ die Eigenwerte von $P_\Omega(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_\Omega \in B(\ell^2(\Lambda))$ bzw. $P_{\Omega^c}(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_{\Omega^c} \in B(\ell^2(\Lambda))$.

Weiterhin ist $\tilde{\alpha}_1(\mu, d) > 0$ (positiv!) und unabhängig von Ω , vorausgesetzt

$$0 < \mu < 1 \quad \text{und} \quad L > L_o^{(\text{FLU})}(\mu, d) := 4\pi d \frac{(2\pi)^d}{|S_d|} \left(2/\mu \right)^{\frac{2+d}{d}}.$$

Hierbei ist $|S_d|$ das Volumen der d -dimensionalen Einheitskugel. Für Details über diesen Lokalisationsfehler siehe das Kapitel 5.

Mit dieser Bemerkung beenden wir unseren Schluss.

Abstract

By HFz-Hubbard Model we mean the usual Hubbard Model for any dimensions restricted to the set of Slater determinants (Hartree-Fock states), whose spin-waves don't have a spiral motion w.r.t. the lattice, but they stay parallel to the z -direction. For this model with small filling we proved in this work that the ferromagnetism takes place for large enough, but finite coupling.

From a mathematical point of view the above result comes essentially from the following lower bound with a boundary term for a **nonlinear** energy functional $\mathcal{E}^{u,\mu}$ defined on a convex set \mathbf{K} :

$$\mathcal{E}^{u,\mu}(\xi, \eta) \geq E_{\text{ferro}}(\mu) + \mathcal{F}(u, \mu) |\partial\Omega_\xi| \quad \text{with } \mathcal{F}(u, \mu) > 0, \quad (*)$$

provided that the coupling $u > u_{cr}(\mu)$ with $u_{cr}(\mu)$ finite for all filling $0 < \mu < 1$.

Here $E_{\text{ferro}}(\mu)$ (ferromagnetic energy) is itself an upper bound w.r.t. u for the *Minimum-Energy*:

$$E^u(\mu) := \min_{(\xi, \eta) \in \mathbf{K}} \mathcal{E}^{u,\mu}(\xi, \eta).$$

The *HFz-energy functional* $\mathcal{E}^{u,\mu}$ and its domain \mathbf{K} for the *HFz-Hubbard Model* are given by:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{u,\mu}(\xi, \eta) &:= \text{Tr}\{(-\Delta - \mu\mathbf{1})(\xi + \eta)\} + u \sum_{x \in \Lambda} \langle x | \xi x \rangle \langle x | \eta x \rangle && \text{(HFz energy functional)} \\ \mathbf{K} &:= K(\Lambda) \times K(\Lambda) && \text{(Variational Set)} \end{aligned}$$

where $K(\Lambda)$ is the set of $|\Lambda| \times |\Lambda|$ complex matrices ξ which satisfy $\mathbf{0} \leq \xi \leq \mathbf{1}$ in quadratic form sense, the lattice Λ is given by $(\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ ($d \in \mathbb{N}$ the dimension) whose length size L must be large enough ($L > L_{cr}(\mu, d)$) and $-\Delta$ is the discrete Laplacian on the lattice Λ .

The set Ω_ξ in (*) is a subset of the lattice Λ and it depends on a small parameter $0 < \delta_{cr}(\mu, d) \leq 1$, namely:

$$\Omega_\xi := \{x \in \Lambda \mid \langle x | \xi x \rangle < \delta_{cr}(\mu, d)\}.$$

From (*) follows that

1. The minimum value of energy functional doesn't change when the coupling $u > u_{cr}(\mu, d)$, namely:

$$E^u(\mu) = E_{\text{ferro}}(\mu) \quad \text{for all } u > u_{cr}(\mu, d) \text{ with } u_{cr}(\mu, d) \text{ finite !}$$

2. If $u > u_{cr}(\mu, d)$ then there are only and exactly two classes of minimizers (ξ_*, η_*) for HFz-energy functional, namely:

$$\text{Either } (\xi_*, \eta_*) = (\xi_* \in \Gamma_{\text{ferro}}, \mathbf{0}) \quad \text{or} \quad (\xi_*, \eta_*) = (\mathbf{0}, \eta_* \in \Gamma_{\text{ferro}}),$$

where $(\Gamma_{\text{ferro}}, \mathbf{0}) \subset \mathbf{K}$ is the set of the full polarized matrices (states) with smallest energy, which in this case is the *ferromagnetic energy* $E_{\text{ferro}}(\mu, d)$, namely:

$$E_{\text{ferro}}(\mu, d) := \min_{(\xi, \mathbf{0}) \in \mathbf{K}} \mathcal{E}^{u,\mu}(\xi, \mathbf{0})$$

The consequences 1 and 2 mean exactly that ferromagnetism takes place for large enough, but finite coupling.

Summarizing we prove in this work the lower bound (*) for the HFz-Hubbard Model.

P.S. The publication of this PhD thesis in form of a paper consists in a cooperation with Prof. Volker Bach and Prof. Elliott Lieb ([BLT 05]). This paper is already available in Internet (<http://tw.arxiv.org/pdf/cond-mat/0506695>) since 27th June 2005 with the following title: *“Ferromagnetism of the Low-Density Hubbard Model in the Hartree-Fock Approximation“*.

Conclusion

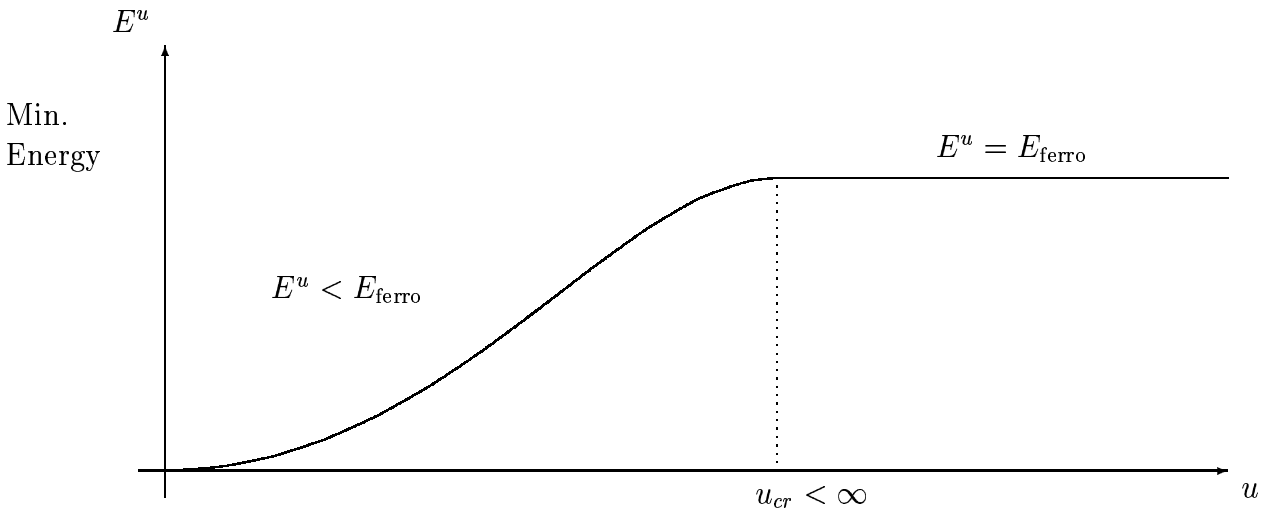
With the HFz-Hubbard Model we could mathematically confirm that ferromagnetism has a pure quantum mechanical origin, namely:

The interplay between the **motion** - t - and the **coupling** - u - of the electrons in a solid causes ferromagnetism if u is big enough, but finite, and the filling μ is small enough. Recall that the Hamiltonian Operator for the full (not HFz) Hubbard model is given by:

$$\hat{H}(t, u, \mu) = -t \sum_{\substack{\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\} \\ |x-y|=1}} C_{x\sigma}^\dagger C_{y\sigma} + u \sum_{x \in \Lambda} n_{x\uparrow} n_{x\downarrow} + (2d - \mu) \sum_{x \in \Lambda} n_{x\uparrow} + n_{x\downarrow}$$

New!!! : Ferromagnetism takes place already for finite coupling u .

Graphically we have the following:



and

The minimizers are

either $\dots \uparrow\uparrow\uparrow \dots$

or $\dots \downarrow\downarrow\downarrow \dots$

The dependence of u_{cr} w.r.t. the chemical potential μ and the dimension d is given by the following phase diagram:

Phase diagram for the HFz-Hubbard Model

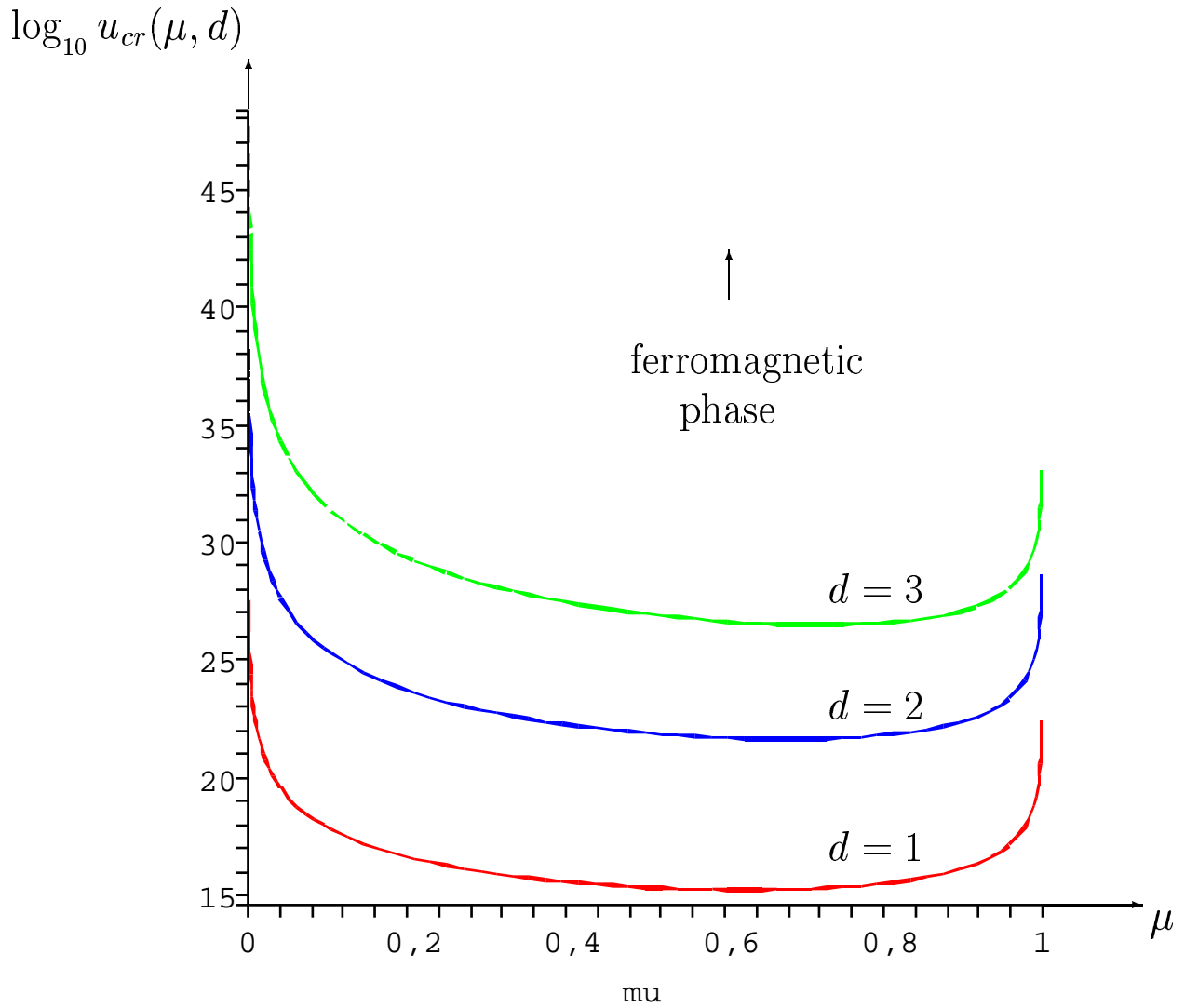


Figure: Phase Diagram for the HFz-Hubbard Model.
Above each curve is the existence of
the ferromagnetic phase assured for the respective dimension.

Remark: For practical purposes we can set $u_{cr}(\mu, d)$ as following:

$$u_{cr}(\mu, d) = \left(\frac{1}{\tilde{\alpha}_1(\mu, d)} \right)^{3.62} \quad \text{for all } 0 < \mu < 1 \text{ and } d=1, 2 \text{ and } 3.$$

where $\tilde{\alpha}_1(\mu, d)$ is given by

$$\tilde{\alpha}_1(\mu, d) := \left(1 + \frac{1}{4d}\right) \frac{1}{(4d)^2} \frac{(1-\mu)}{(4d-\mu)} \frac{1}{8} \frac{|S_d|}{(2\pi)^d} \left(\mu/2\right)^{\frac{2+d}{2}}.$$

The interpretation of $\tilde{\alpha}_1(\mu, d)$ is given as a lower bound with boundary term for the following *Localization Error*: For any subset Ω of $\Lambda := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ the following holds:

$$\underbrace{\sum_{e_j < 0} e_j(\Omega) + \sum_{e_j < 0} e_j(\Omega^c) - \sum_{e_j < 0} e_j(\Omega \cup \Omega^c = \Lambda)}_{\text{Localization Error}} \geq \tilde{\alpha}_1(\mu, d) |\partial\Omega|$$

where $\Omega^c := \Lambda \setminus \Omega$, $e_j(\Omega)$ and $e_j(\Omega^c)$ are the eigenvalues of $P_\Omega(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_\Omega \in B(\ell^2(\Lambda))$ and $P_{\Omega^c}(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_{\Omega^c} \in B(\ell^2(\Lambda))$ respectively.

Further $\tilde{\alpha}_1(\mu, d)$ is positive! and does not depend on Ω , provided that

$$0 < \mu < 1 \quad \text{and} \quad L > L_o^{(\text{FLU})}(\mu, d) := 4\pi d \frac{(2\pi)^d}{|S_d|} \left(2/\mu\right)^{\frac{2+d}{d}}.$$

Here $|S_d|$ is the volume of the d -dimensional unit sphere. For details about this Localization Error see chapter 5.

With this remark we end our conclusion.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	5
Schluss	7
Phasendiagramm für das HFz-Hubbardmodell	9
Abstract	13
Conclusion	15
Phase diagram for the HFz Hubbard model	17
1 Einleitung	22
1.1 Beitrag dieser Dissertation	24
1.1.1 Beispiel eines allgemeineren mathematischen Problems	24
1.1.2 Hauptergebnis	25
1.1.3 Methoden und Nebenergebnisse	30
1.2 Gliederung der Arbeit	34
2 Grundlegende Konzepte und HF-Theorie für das Hubbardmodell	36
2.1 Ferromagnetismus und Nagaoka-Theorem	36
2.1.1 Nagaoka-Theorem	39
2.2 Hartree-Fock-Theorie für das Hubbardmodell	41
2.2.1 Slaterdeterminanten & Fermionische Dichtematrizen	41
2.2.2 Das Hartree-Fock-Energiefunktional für das Hubbardmodell	42
2.2.3 Zusammenfassung	45
2.3 Bekannte Resultate	45
2.4 Das Großkanonische Ensemble	48
2.5 Das in dieser Dissertation zu betrachtende Modell (Vereinfachung des HF-Funktional zum HFz-Funktional)	50
2.6 Ziel dieser Dissertation	54
2.7 Übrige Beweise dieses Kapitels: Beweis der Behauptung 2.1 und Korollar 2.1	56
3 Ferromagnetismus bei endlicher Kopplung im HFz-Hubbardmodell (Hauptresultat der Dissertation)	58
3.1 Problemstellung	58
3.2 Hauptresultat der Dissertation (Theorem 3.1)	61
3.3 Umformung des HFz-Energiefunktionals	63
3.4 Beweis des Theorems 3.1	64
3.5 Zusammenfassung des Hauptergebnisses (Ausdruck für $u_{cr}(\mu, d)$)	78
3.6 Phasendiagramm für das HFz-Hubbardmodell	80
3.7 Diskussion des Phasendiagramms und Ergänzung zum Theorem Ferro	81
3.8 Beweis einiger Lemmata für das Theorem 3.1	88
3.9 Beweis der Proposition 3.1 (Quantitatives Stoner-Kriterium)	97
4 Fehlerabschätzung mit Randterm für die Summe der negativen Eigenwerte eines lokalisierten diskreten Schrödinger-Operators mit Hilfe der Feshbach-Projektion-Methode	100
4.1 Beweis des Theorems 4.1	102
4.2 Beweise der Lemmata für das Theorem 4.1	105
4.3 Anhang zum Kapitel 4 (Detaillierter Beweis der Isospektralität der Feshbach-Abbildung)	108

5	FLU Großkanonisches Ensemble-Version	113
5.1	Beweis des Hauptresultats dieses Kapitels (Korollar 5.2)	114
5.1.1	Lower Bound Involving the Boundary	118
5.2	Beweise der Lemmata für das Theorem 5.1	122
5.3	Anhang zum Kapitel 5 (Potenzgesetz $\mu^{\frac{2+d}{2}}$ für $\tilde{\alpha}_1(\mu, d)$)	132
6	Eine positive untere Schranke an der Dichte	
	$\mathcal{D}_-[\Omega, V, d](x) := \langle x \mathbf{1}_{[P_\Omega(-\Delta+V)P_\Omega < 0]} x \rangle$ mit $-\mu \leq V \leq -\frac{\mu}{2} < 0$ und $x \in \text{Box} := \{x - M, \dots, x, \dots, x + M\}^d \subset \Omega \subset \Lambda$	138
6.1	Problemstellung	138
6.2	Ergebnis dieses Kapitels (Theorem 6.1)	139
6.3	Beweis des Theorems 6.1 durch das Theorem 6.2 und das Theorem 6.3	141
6.4	Anwendung der Trotter-Formel (Beweis des Theorems 6.2)	147
6.4.1	Beweis der Lemmata für das Theorem 6.2	151
6.5	Vergleich zwischen den Laplace-Operatoren auf einer Box mit freien Randbedingungen $-\Delta_{\text{Box}}$ und mit zyklischen Randbedingungen $-\Delta_{\text{BoxZ}}$	156
6.6	Untere Schranke an $\frac{1}{ \text{Box} } \text{Tr}_{\text{Box}} \{e^{\beta \Delta_{\text{Box}}}\}$ (Theorem 6.3)	162
6.6.1	Beweis der Lemmata zum Theorem 6.3	163
	Literatur	169

1 Einleitung

Es ist eine der großen Herausforderungen zu erklären, wie der Magnetismus mit der Beweglichkeit der Elektronen in einem Festkörper verträglich ist. Diese Art von Magnetismus ist in der Literatur als "itinerant magnetism" bekannt.

Nach Meinung vieler Wissenschaftler (siehe z.B. [Faz 99]) ist das Hubbardmodell ([H 63], [K 63], [G 63]) das einfachste Vielteilchenmodell, in dem die folgenden zwei konkurrierenden Aspekte in Systemen mit schmalen Bändern (Elektronen in der $3d$ -Schale in z.B. Eisen und Nickel) sinnvoll beschrieben sind:

- Kinetische Energie zuständig für die Delokalisierung der Elektronen.
- Elektron-Elektron-Wechselwirkung zuständig für ihre Lokalisierung.

Das Zusammenspiel zwischen diesen beiden konkurrierenden Aspekten sollte den Magnetismus beweglicher Elektronen erklären.

Das Hubbardmodell beschreibt N Elektronen auf einem Gitter $\Lambda = (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ ($L, d \in \mathbb{N}$). In diesem Modell können die Elektronen sich bewegen, und zwar von einem Gitterplatz zu dem nächsten Gitterplatz mit einer Wahrscheinlichkeit t . Und wenn sich zwei Elektronen (mit verschiedenen Spins) auf einem Gitterplatz befinden, erfahren sie eine Coulomb-Abstoßung (Kopplung) mit dem Wert $u > 0$.

Der Hamiltonoperator für dieses Modell lautet:

$$\hat{H}(t, u) = -t \sum_{\substack{\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\} \\ x, y \in \Lambda: \\ |x-y|=1}} c_{x\sigma}^\dagger c_{y\sigma} + u \sum_{x \in \Lambda} n_{x\uparrow} n_{x\downarrow} \quad (1.1)$$

Dieser Hamiltonoperator wirkt auf den N -Teilchen-Hilbertraum $\mathcal{H}^{(N)} = \bigwedge_{i=1}^N \mathcal{H}$ (erzeugt durch den 1-Teilchen-Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathbb{C}^{|\Lambda|} \oplus \mathbb{C}^{|\Lambda|} =$ komplexe spinwertige Funktionen auf das Gitter Λ), und ferner sind hier $c_{x\sigma}^\dagger$, $c_{x\sigma}$ und $n_{x\sigma} := c_{x\sigma}^\dagger c_{x\sigma}$ die Erzeugungs-, Vernichtungs- bzw. Besetzungszahloperatoren.

Diese Operatoren erfüllen die kanonischen Anti-Vertauschungsrelationen: $\{c_{x\sigma}, c_{y\tau}\} = \{c_{x\sigma}^\dagger, c_{y\tau}^\dagger\} = 0$ und $\{c_{x\sigma}, c_{y\tau}^\dagger\} = \delta_{xy} \delta_{\sigma\tau}$, und ferner sind die Eigenwerte der Besetzungszahloperatoren 0 oder 1.

Der größere Teil der Untersuchung des Hubbardmodells besteht darin, sein Hamiltonoperator (eine riesige Matrix $\binom{2^{|\Lambda|}}{N} \times \binom{2^{|\Lambda|}}{N}$ oder sogar $4^{|\Lambda|} \times 4^{|\Lambda|}$ im Fall einer nicht festen Anzahl von Elektronen) zu diagonalisieren, und vor allem seine Grundzustände zu bestimmen, wodurch sich physikalische Eigenschaften des Systems bei tiefen Temperaturen - wie z.B. Ferromagnetismus, Antiferromagnetismus und Metall-Isolator-Übergang - ablesen lassen.

Bis jetzt sind die exakten Grundzustände des Hubbardmodells (für allgemeine Anzahl von Gitterplätze) nur für eindimensionale Gitter gefunden (siehe [LW 68]). Dort konnte gezeigt werden, dass die Grundzustände für endliches u Isolator-Eigenschaft besitzen, aber keine antiferromagnetische langreichweitige Ordnung vorliegt. In mehreren Dimensionen gibt es kaum exakte Resultate (siehe [Lieb 93]).

Im Extremfall $u = \infty$ besagt das Nagaoka-Theorem ([Nag 66], [T 65]) andererseits, dass die Grundzustände für alle Dimensionen ($d \geq 2$) ferromagnetisch sind, wobei allerdings eine überraschende Be-

dingung für die Anzahl der Elektronen bzgl. der Anzahl von Gitterplätzen erfüllt sein muss, nämlich: $N = |\Lambda| - 1$.

Erweiterungen des Nagaoka-Theorems für *endliches* u und/oder $N \neq |\Lambda| - 1$ sind seit seinem Artikel im Jahr 1966 bis heute oft untersucht worden (siehe z.B. das *review* [Tsa-r1 97]).

In der Hartree-Fock-Approximation (siehe Kapitel 2) haben Bach, Lieb und Solovej [BLS 94] das Theorem von Nagaoka für $1 \leq N < |\Lambda|$ erweitert. *Bei dieser Erweiterung bleibt u jedoch unendlich.* D.h. unter den Bedingungen $1 \leq N < |\Lambda|$ und $u = \infty$ sind die HF-Grundzustände des Hubbardmodells ferromagnetisch.

1.1 Beitrag dieser Dissertation

In dieser Arbeit wird das HF-Hubbardmodell *vereinfacht*. Diese Vereinfachung des HF-Hubbardmodells wird in dieser Dissertation *HFz-Hubbardmodell* genannt. Für dieses vereinfachte Modell ist es uns gelungen zu beweisen, dass seine HF-Grundzustände im Fall einer genügend großen, aber endlichen Abstoßung u ferromagnetisch sind. D.h. für dieses vereinfachte Modell gibt es eine Erweiterung des Nagaoka-Theorems *für endliche u* . An dieser Stelle ist es wichtig zu erwähnen, dass dieser Wert von u - ab dem der Ferromagnetismus vorliegt - auch im Fall $|\Lambda| \rightarrow \infty$ endlich bleibt. Diese Tatsache ist von der Physik her erwartet (Thermodynamischer Limes).

1.1.1 Beispiel eines allgemeineren mathematischen Problems

Von einem reinen mathematischen Gesichtspunkt aus befasst sich diese Dissertation mit einem Beispiel von folgendem allgemeineren mathematischen Problem:

Problem: Sei $\mathcal{E}^{u,t}$ ein nichtlineares Funktional auf einer konvexen Menge \mathbf{K}

$$\mathcal{E}^{u,t}(x) = tT(x) + uW(x) \quad , \quad x \in \mathbf{K} \quad (1.2)$$

wobei die Funktionale T (linear) und $W \geq 0$ (nichtlinear) zwei konkurrierende Aspekte eines Modells darstellen und die Parameter $t > 0$ und $u > 0$ die Intensität der jeweiligen Aspekte messen.

Seien weiterhin folgende Minimumwerte definiert:

$$E^u := \min\{\mathcal{E}^{u,t=1}(x) \mid x \in \mathbf{K}\} \quad (1.3)$$

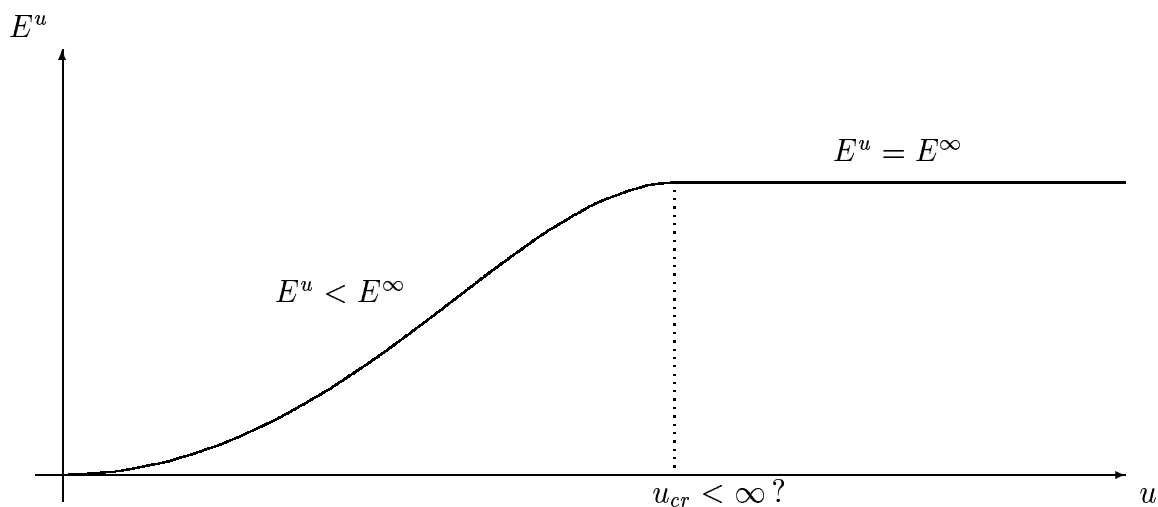
und

$$E^\infty := \min\{T(x) \mid x \in \mathbf{K} \text{ mit } W(x) = 0\}. \quad (1.4)$$

Nun stellt sich die Frage, ob ein kritischer Wert $u_{cr} < \infty$ existiert, so dass

$$E^u = E^\infty \quad \text{für alle } u_{cr} \leq u \leq \infty \quad (1.5)$$

gilt? Graphisch kann man diese Frage folgendermaßen verstehen:



Die Antwort auf die Frage (1.5) ist **Ja !** im Fall unseres Beispiels; nämlich des HFz-Energiefunktionals. Kurz beschrieben sind die Menge \mathbf{K} und das Funktional \mathcal{E}_{hf}^u in diesem Beispiel des HFz-Funktional gegeben durch:

- $\mathbf{K} := \{ (\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow}) \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|}) \times B(\mathbb{C}^{|\Lambda|}) \mid \mathbf{0} \leq \gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow} \leq \mathbf{1} \text{ als quadratische Form} \}$ (1.6)

mit

$B(\mathbb{C}^{|\Lambda|})$ die Menge aller $|\Lambda| \times |\Lambda|$ komplexen Matrizen und $\Lambda = \Lambda_{L,d} := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ für feste $L, d \in \mathbb{N}$

bzw.

- $\mathcal{E}_{hf}^u(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow}) := T_{\mu}(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow}) + uW(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow})$ (1.7)

mit

$$T_{\mu}(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow}) := \text{Tr}\{(-\Delta - \mu\mathbf{1})\gamma_{\uparrow}\} + \text{Tr}\{(-\Delta - \mu\mathbf{1})\gamma_{\downarrow}\} \quad \begin{array}{l} \text{(Linearer Teil)} \\ \text{(Kinetische Energie)} \end{array} \quad (1.8)$$

$$W(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow}) := \sum_{x \in \Lambda} D(\gamma_{\uparrow})(x) D(\gamma_{\downarrow})(x) \quad \begin{array}{l} \text{(Nichtlinearer Teil)} \\ \text{(e-e-Wechselwirkung)} \end{array}$$

Hierbei sind $D(\gamma_{\uparrow})(x)$ und $D(\gamma_{\downarrow})(x)$ die Elemente in der x -Stelle der Diagonalen der Matrix γ_{\uparrow} bzw. der Matrix γ_{\downarrow} und ferner ist $0 < \mu < 1$ ein Parameter, der physikalisch die Anzahl von Elektronen kontrolliert, welche im Gitter Λ bleiben.

Physikalisch ist

- \mathbf{K} eine echte Teilmenge von Elektronendichtematrizen¹ (eine Eins-zu-Eins-Relation zwischen Elektronendichtematrizen und HF-Zustände ist im Kapitel 2 präsentiert) und
- \mathcal{E}_{hf}^u das HF-Energiefunktional für das Hubbardmodell auf dieser Menge \mathbf{K} (siehe Kapitel 2 für die Ableitung des HF-Energiefunktional für das Hubbardmodell).

1.1.2 Hauptergebnis

Das Hauptergebnis dieser Dissertation besteht darin, die Frage in (1.5) für das Funktional in (1.7) auf der Menge \mathbf{K} in (1.6) zu bejahen. Dies fassen wir in Form eines Theorems zusammen.

Theorem Ferro (Siehe Kapitel 3) *Für alle $0 < \mu < 1$ und $d \in \mathbb{N}$ existiert eine kritische Kantenlänge $L_{cr}(\mu, d) < \infty$ und eine kritische Kopplung $u_{cr}(\mu, d) < \infty$, so dass*

$$E_{L,d}^{u,\mu} = E_{L,d}^{u=\infty,\mu} \quad \text{für alle } L_{cr}(\mu, d) \leq L \text{ und } u_{cr}(\mu, d) \leq u \leq \infty$$

gilt.

¹Die Menge der Elektronendichtematrizen oder Einteilchendichtematrizen ist gegeben durch:

$$1\text{PDM} := \{ \gamma \in B(\mathbb{C}^{2|\Lambda|}) \mid \mathbf{0}_{2|\Lambda|} \leq \gamma \leq \mathbf{1}_{2|\Lambda|} \text{ als quadratische Form} \}$$

Physikalisch bedeutet dies, dass das System ferromagnetisch ist (siehe Kapitel 2, Unterkapitel 2.1). Die Tatsache, dass u_{cr} nicht von der Kantenlänge L (vorausgesetzt $L \geq L_{cr}(\mu, d)$) abhängt, ist sehr wichtig, weil dadurch u_{cr} endlich bleibt, auch wenn $L \rightarrow \infty$ (Thermodynamischer Limes).

Explizite Ausdrücke für $L_{cr}(\mu, d)$ und $u_{cr}(\mu, d)$ befinden sich im Kapitel 3 und die Abhängigkeit von $u_{cr}(\mu, d)$ bzgl. des chemischen Potentials μ und der Dimension d ist durch das folgende Phasendiagramm gegeben:

Phasendiagramm für das HFz-Hubbardmodell

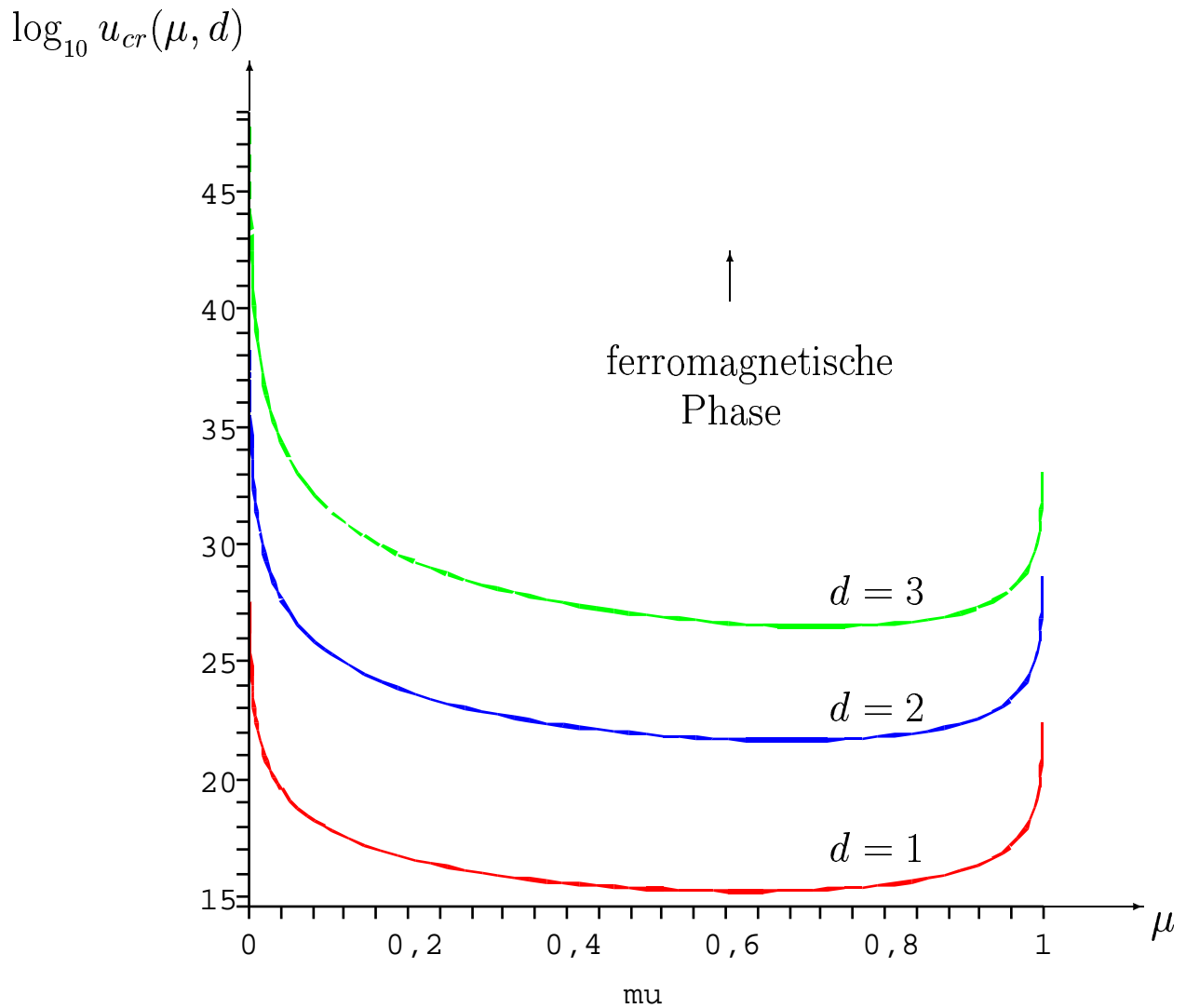


Abb.: Phasendiagramm für das HFz-Hubbardmodell.
Oberhalb jeder Kurve der jeweiligen Dimension ist
die Existenz der ferromagnetischen Phase gesichert.

Im Unterkapitel 3.7 wird dieses Phasendiagramm diskutiert.

Unabhängig von dem **Theorem Ferro** können wir zumindest für $d \geq 3$ das asymptotische Verhältnis $\mu \rightarrow 0 \Rightarrow u_{cr}(\mu, d) \rightarrow \infty$ im Phasendiagramm durch folgendes Kriterium erklären:

Proposition (*Ein quantitatives Stoner-Kriterium, siehe Unterkapitel 3.7, Proposition 3.1*)
Damit Ferromagnetismus entsteht, muss folgendes Kriterium erfüllt werden:

$$\mu^{\frac{d-2}{2}} u \geq C_d^{(\text{Stoner})} \quad \text{mit}^2 \quad C_d^{(\text{Stoner})} := \frac{2^{-4}}{|S_d|} \left(\frac{2\sqrt{2}}{\pi} \right)^d > 0 \quad (1.9)$$

Dieses Kriterium gilt als eine Ergänzung zum Theorem Ferro im folgenden Sinn: *Das Theorem Ferro bewältigt die schwierige Aufgabe, eine hinreichende Bedingung in u für die Entstehung des Ferromagnetismus' zu liefern. D.h. das Theorem Ferro liefert eine Kurve u_{cr} versus μ , wobei oberhalb dieser Kurve der Ferromagnetismus gesichert ist. Andererseits liefert das Kriterium (1.9) eine notwendige Bedingung zur Entstehung des Ferromagnetismus'. D.h. dieses Kriterium liefert eine Kurve u_{cr} versus μ , unterhalb welcher die Abwesenheit des Ferromagnetismus' gesichert ist.*

Bemerkung: Das Kriterium in (1.9) gilt sowohl für das HF- als auch für das HFz-Hubbardmodell und steht in Übereinstimmung mit dem sogenannten Stoner-Kriterium³ für das HF-Hubbardmodell zur Entstehung des Ferromagnetismus'.

²Hierbei ist $|S_d|$ das Volumen der d -dimensionalen Einheitskugel.

³Kurz lautet das Stoner-Kriterium: $\rho(\epsilon_F) u \gg 1$ wobei $\rho(\epsilon_F)$ die Zustandsdichte an der Fermikante ϵ_F ist. $\rho(\epsilon_F)$ ist proportional zu $\mu^{\frac{d-2}{2}}$. Für mehr Details über das Stoner-Kriterium siehe z.B. [Faz 99].

1.1.3 Methoden und Nebenergebnisse

Motivation: Analogie zur Segregation im Falicov-Kimball-Modell

Die Inspirationsquelle zum Beweis des Ferromagnetismus im HFz-Hubbardmodell ist den Ideen aus dem aktuellen Artikel [FLU 02] über die Segregation im Falicov-Kimball-Modell (FK-Modell) zu verdanken. In dem FK-Modell werden Teilmengen Ω des Gitters Λ mit fester Anzahl von Elementen $|\Omega|$ statt Grundzustände $\Phi \in \mathcal{H}^{(N)}$ gesucht. Diese gesuchten Teilmengen Ω von Λ minimieren das *FK-Energiefunktional* (ein nichtlineares Funktional) auf dem Gitter Λ :

$$E_{\Omega,N}^u := \sum_{j=1}^N e_j(-\Delta_\Lambda + u \sum_{x \in \Lambda \setminus \Omega} \mathbf{1}_x) \quad \text{mit fest } |\Omega| \quad (1.10)$$

Physikalisch lässt sich das FK-Modell folgendermaßen interpretieren: Die Punkte von Ω sind leer und die Punkte von $\Omega^c := \Lambda \setminus \Omega$ sind mit Ionen besetzt und der Parameter $u > 0$ kontrolliert die Abstoßung zwischen den Ionen (fest auf dem Gitter) und den Elektronen (bewegliche Teilchen). Weiterhin ist die Energie von N Elektronen auf einem Gitter Λ unter der Wirkung einer Konfiguration Ω mit $N_i = |\Omega^c|$ Ionen gegeben durch $E_{\Omega,N}^u$ in (1.10). D.h. die Summe der N ersten Eigenwerte von $-\Delta_\Lambda + u \sum_{x \in \Omega^c} \mathbf{1}_x \in B(\ell^2(\Lambda))$.

Unter den Bedingungen

- $u(n, d)$ hinreichend groß und
- $0 < n := N/|\Omega| < 1$

wurde im Artikel [FLU 02]⁴ bewiesen, dass die Ionenkonfigurationen, die das FK-Energiefunktional minimieren, segregiert sind.

Man sagt, dass eine Ionenkonfiguration $\Omega \subset \Lambda$ mit einer festen Anzahl von Ionen $|\Omega^c|$ *segregiert* ist, wenn ihre $|\Omega^c|$ Ionen auf dem Gitter Λ so verteilt sind, dass *der Rand* dieser Konfiguration, $\partial\Omega := \{x \in \Omega \mid \text{dist}(x, \Omega^c) = 1\}$, möglichst klein ist. Mit anderen Worten: Unter den obigen Bedingungen ist die Bildung von "Klumpen" von Ionen bevorzugt zur Minimierung der Energie des gesamten Systems.

Wesentlich besteht die Methode aus [FLU 02] zum Beweis der Segregation im FK-Modell darin, folgende zwei Abschätzungen nach unten mit **Randterm** ($|\partial\Omega|$) zu erhalten:

- Für hinreichend großes u gilt:

$$E_{\Omega,N}^u \geq E_{\Omega,N}^{u=\infty} - \frac{C_d^{(\text{FLU})}}{u} |\partial\Omega| \quad (1.11)$$

- Für $0 < n < 1$ gilt Folgendes für alle Konfigurationen Ω im Gitter Λ :

$$E_{\Omega,N}^{u=\infty} := \sum_{j=1}^N e_j(P_\Omega(-\Delta_\Lambda)P_\Omega) \geq e_{\mathbb{Z}^d}(n) |\Omega| + \alpha_1(n, d) |\partial\Omega| \quad \text{mit } \alpha_1(n, d) > 0 \quad (1.12)$$

Hierbei sind $e_{\mathbb{Z}^d}(n)$ die Energie pro Gitterplatz für eine Dichte $n = N/|\Omega|$ von Elektronen in dem unendlichen Gitter \mathbb{Z}^d und $C_d^{(\text{FLU})}$ eine Konstante, die nur von der Dimension d abhängt. Weiterhin ist $\alpha_1(n, d)$ relativ klein aber **echt positiv** und unabhängig von der Konfiguration Ω .

⁴Der erste Beweis der Segregation im FK-Modell wurde bereits von P. Lemberger [Lemb 92] veröffentlicht. Dazu hat er Methoden der Störungstheorie angewandt, wobei allerdings nur der Fall $d = 1$ explizit behandelt wurde.

Unsere Methode und Nebenergebnisse

Unsere Methode zum Beweis des Ferromagnetismus in HFz-Hubbardmodell (1.6)-(1.8) besteht wesentlich darin, die unteren Schranken (1.11) und (1.12) dem HFz-Hubbardmodell anzupassen. Diese Anpassung wurde, wie wir sehen werden, in einer nicht trivialen Weise erhalten.

In unserer Methode ist das Analogon im HFz-Hubbardmodell zu einer Konfiguration von Ionen Ω im FK-Modell gegeben durch:

$$\Omega = \Omega_{\delta, \xi} := \{x \in \Lambda \mid D(\xi)(x) := \langle \delta_x \mid \xi \delta_x \rangle < \delta\} \quad (1.13)$$

wobei $\delta \in (0, 1]$ und $\xi \in K(\Lambda) := \{\gamma \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|}) \mid \mathbf{0}_\Lambda \leq \gamma \leq \mathbf{1}_\Lambda\}$ (eine konvexe Menge⁵).

Und die gezielte Ungleichung, die das **Theorem Ferro** unmittelbar beweist, zeigt sich mit dieser Definition von Ω folgendermaßen:

Theorem Ferro I (siehe Kapitel 3) Seien $0 < \mu < 1$ und $d \in \mathbb{N}$ fest.

Für alle $\mathbf{0} \leq \gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow \leq \mathbf{1}$ gilt Folgendes:

$$\mathcal{E}_{L,d}^{u,\mu}(\gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow) \geq E_{L,d}^{u=\infty,\mu} + \mathcal{F}(u, \mu, d) |\partial\Omega_{\delta_{cr}(\mu,d), \gamma_\uparrow}| \quad \text{mit} \quad \mathcal{F}(u, \mu, d) > 0 \quad (1.14)$$

vorausgesetzt, $u > u_{cr}(\mu, d)$ und $L > L_{cr}(\mu, d)$ gelten.

Diese gezielte Ungleichung (1.14) ist das Hauptresultat dieser Dissertation und der Beweis dieser Ungleichung beruht auf folgenden drei Zwischenergebnissen, die wir als **Theorem A**, **Theorem B** und **Theorem C** zusammenfassen.

Im Folgenden beschreiben wir kurz diese drei Zwischenergebnisse.

Mit der Definition von Ω in (1.13) zeigt sich das Analogon zu (1.11) folgendermaßen:

Theorem A (V. Bach, siehe Kapitel 4) Für alle $0 < \delta \leq 1$, $\xi \in K(\Lambda)$ und $u > \mu/\delta$ gilt

$$\text{Tr}_\Lambda \{ [H]_- \} \geq \text{Tr}_\Lambda \{ [P_\Omega H P_\Omega]_- \} - \frac{C_d^{(\text{FB})}}{u\delta - \mu} |\partial\Omega| \quad (1.15)$$

wobei $H = H_{\mu, \xi}^u := -\Delta - \mu\mathbf{1} + uD(\xi)$, $[\lambda]_- := \min\{\lambda, 0\}$, $\Omega = \Omega_{\delta, \xi}$ wie in (1.13), $P_\Omega := \mathbf{1}_\Omega$ und $C_d^{(\text{FB})} = 4d^2$.

Dieses erste Nebenergebnis dieser Dissertation wurde durch die Feshbach-Projektion-Methode⁶ (siehe Kapitel 4) erhalten.

In der Dissertation ist das Analogon zu (1.12) gegeben durch:

⁵Bemerke, dass folgende Beziehung zwischen \mathbf{K} (in (1.6) definiert) und $K(\Lambda)$ gilt: $\mathbf{K} = K(\Lambda) \times K(\Lambda)$.

⁶Die Techniken von [FLU 02] zum Beweis von (1.11) für das FK-Modell lassen sich nicht auf das HFz-Hubbardmodell übertragen, da sie auf einer starken Tatsache des FK-Modells beruhen, nämlich: Im FK-Modell nimmt das Potential $D(\xi)(x)$ entweder den Wert 1 (d.h. die Stelle x ist mit einem Ion besetzt) oder 0 (d.h. die Stelle x ist leer) an. Im Gegensatz darf $D(\xi)(x)$ im HF-Hubbardmodell alle Werte im Intervall $[0, 1]$ annehmen.

Theorem B (FLU Großkanonische Ensemble-Version, siehe Theorem 5.1)

Seien $0 < \mu < 1$ und $d \in \mathbb{N}$. Für alle beliebigen Teilmengen Ω des Gitters Λ gilt Folgendes:

$$E_{\Omega, \mu}^{u=\infty} := \text{Tr}_{\Lambda} \{ [P_{\Omega}(-\Delta - \mu \mathbf{1})P_{\Omega}]_{-} \} \geq e_{\Lambda}(\mu) |\Omega| + \alpha_1(\mu, d) |\partial\Omega| \quad (1.16)$$

mit

$$\alpha_1(\mu, d) := \frac{1}{(4d)^2} \frac{(1-\mu)}{(4d-\mu)} \frac{1}{4} (-e_{\Lambda}(\mu)) \quad (1.17)$$

wobei $e_{\Lambda}(\mu) := \frac{1}{|\Lambda|} \text{Tr}_{\Lambda} \{ [-\Delta - \mu \mathbf{1}]_{-} \} \leq 0$ (die Energie pro Gitterplatz in Λ) ist.

Bemerke, dass $\alpha_1(\mu, d) > 0$ (positiv!) und unabhängig von Ω ist.

Eine wichtige Konsequenz aus diesem Theorem ist die Existenz einer positiven unteren Schranke mit Randterm an folgendem Energiedefizit (oder Lokalisationsfehler), nämlich:

Für alle beliebigen Teilmengen Ω des Gitters Λ gilt:

$$E_{\Omega, \mu}^{u=\infty} + E_{\Omega^c, \mu}^{u=\infty} - E_{\Omega \cup \Omega^c, \mu}^{u=\infty} \geq \tilde{\alpha}_1(\mu, d) |\partial\Omega| \quad (1.18)$$

mit

$$\tilde{\alpha}_1(\mu, d) = (1 + \frac{1}{4d}) \alpha_1(\mu, d) \quad (1.19)$$

Mit anderen Worten: Das Energiedefizit, das durch die Lokalisierung des Operators $-\Delta - \mu \mathbf{1}$ auf Ω und auf $\Omega^c := \Lambda \setminus \Omega$ entsteht, ist nach unten durch $\tilde{\alpha}_1(\mu, d) |\partial\Omega|$ abgeschätzt. Außerdem hängt $\tilde{\alpha}_1(\mu, d)$ nicht von Ω ab. Für Details über $\tilde{\alpha}_1(\mu, d)$ siehe Korollar 5.2 .

Dieses zweite Nebenergebnis dieser Dissertation wurde durch die Übertragung der Techniken aus [FLU 02] zum Beweis von (1.12) (der Fall des Kanonischen Ensemble - n) auf den Fall des großkanonischen Ensemble - μ (siehe Kapitel 5) erreicht.

Ein weiteres Nebenergebnis dieser Arbeit, das wir zum Beweis des **Theorems Ferro** anwenden, bezieht sich auf eine untere Schranke an der Dichtematrix eines diskreten Schrödinger-Operators, der auf eine beliebige Teilmenge Ω des Gitters Λ eingeschränkt ist, nämlich:

Sei Ω eine beliebige Teilmenge von $\Lambda := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$, $L, d \in \mathbb{N}$ und $H := -\Delta + V_{\mu} \in B(\ell^2(\Lambda))$ ein diskreter Schrödinger-Operator auf dem Gitter Λ , wobei das Potential $V : \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ folgende Eigenschaft besitzt:

$$-\mu \leq V(x) \leq -\mu/2 \quad \text{für alle } x \in \Lambda \quad \text{mit } 0 < \mu < 1 \quad (1.20)$$

Seien weiterhin $H_{\Omega, \mu, d} := P_{\Omega} H P_{\Omega} \in B(\ell^2(\Lambda))$ mit $P_{\Omega} = \sum_{x \in \Omega} \mathbf{1}_x$ Projektion auf Ω und $\{\varphi_j\}_{j=1}^{|\Lambda|}$ eine ON-Basis von Eigenfunktionen zu Eigenwerten λ_j von $H_{\Omega} \in B(\ell^2(\Lambda))$.

D.h. $H_{\Omega, \mu, d} \varphi_j = \lambda_j \varphi_j$, $j = 1, \dots, |\Lambda| = L^d$.

Die Dichte an der Stelle $x \in \Lambda$ für $H_{\Omega, \mu, d}$ ist definiert durch:

$$\mathcal{D}_{-}[\Omega, V, d](x) := \sum_{\substack{j=1: \\ \lambda_j < 0}}^{|\Lambda|} |\varphi_j(x)|^2 = \langle x | \mathbf{1}_{[P_{\Omega} H P_{\Omega} < 0]} x \rangle \quad (1.21)$$

Nun sind wir in der Lage, das dritte Nebenergebnis dieser Dissertation zu präsentieren:

Theorem C (Untere Schranke $\approx \mu^{d+\varepsilon}$ an der Dichte an einer Stelle x des Gitters Λ ;
Anwendung der Trotter-Formel-Methode, siehe Kapitel 6)

Für alle $0 < \mu < 1$, $d \in \mathbb{N}$, existiert eine endliche Halbkantenlänge $M_o \equiv M_o(\mu, d) < \infty$, so dass Folgendes gilt:

Für alle beliebigen Teilmengen Ω des Gitters $\Lambda := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ mit $L > 2M_o(\mu, d) + 1$ und für alle Potentiale $V : \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ mit $-\mu \leq V \leq -\mu/2$ gilt

$$\mathcal{D}_-[\Omega, -\mu \leq V \leq -\mu/2, d](x) := \langle x | \mathbf{1}_{[P_\Omega(-\Delta + V)P_\Omega < 0]} x \rangle \geq \mathcal{A}(\mu, d) > 0, \quad (1.22)$$

vorausgesetzt, $x \in \Omega$, so dass die $\text{Box}(x) := \{-M_o + x, \dots, x, \dots, x + M_o\}^d$ in Ω bleibt.

Die positive Funktion $\mathcal{A}(\mu, d)$ hängt weder von Ω noch von V ab und verhält sich im Limes $\mu \rightarrow 0$ folgendermaßen:

$$\lim_{\mu \rightarrow 0} \mathcal{A}(\mu, d) \left[\left(\frac{1}{\mu} \right) \ln \left(\frac{1}{\mu} \right) \right]^d = \frac{1}{16} \left(\frac{\text{erf}^2(\pi)}{32\pi d} \right)^d.$$

Explizite Ausdrücke für $\mathcal{A}(\mu, d)$ und $M_o(\mu, d)$ befinden sich im Theorem 6.1.

1.2 Gliederung der Arbeit

Das Kapitel 2 hat wesentlich zwei Hauptziele:

- (i) Die Definition von Ferromagnetismus einzuführen;
- (ii) Das Modell, das wir in dieser Arbeit betrachten (HFz-Hubbardmodell), aus dem ursprünglichen Hubbardmodell abzuleiten.

Weiterhin werden in diesem Kapitel zwei bekannte Ergebnisse präsentiert: Das Nagaoka-Theorem [Nag 66] und eine seiner Erweiterungen im Fall der HF-Approximation [BLS 94]. Zur Erreichung des Zieles (ii) werden die Hartree-Fock-Approximation und ihre dazugehörigen Begriffe, wie z.B. Einteilchendichtematrizen, eingeführt. Ferner wird das HF- und HFz-Energiefunktional für das Hubbardmodell abgeleitet.

Wenn man nicht an den physikalischen Hintergründen des Modells interessiert ist, kann man direkt mit dem Kapitel 3 anfangen⁷.

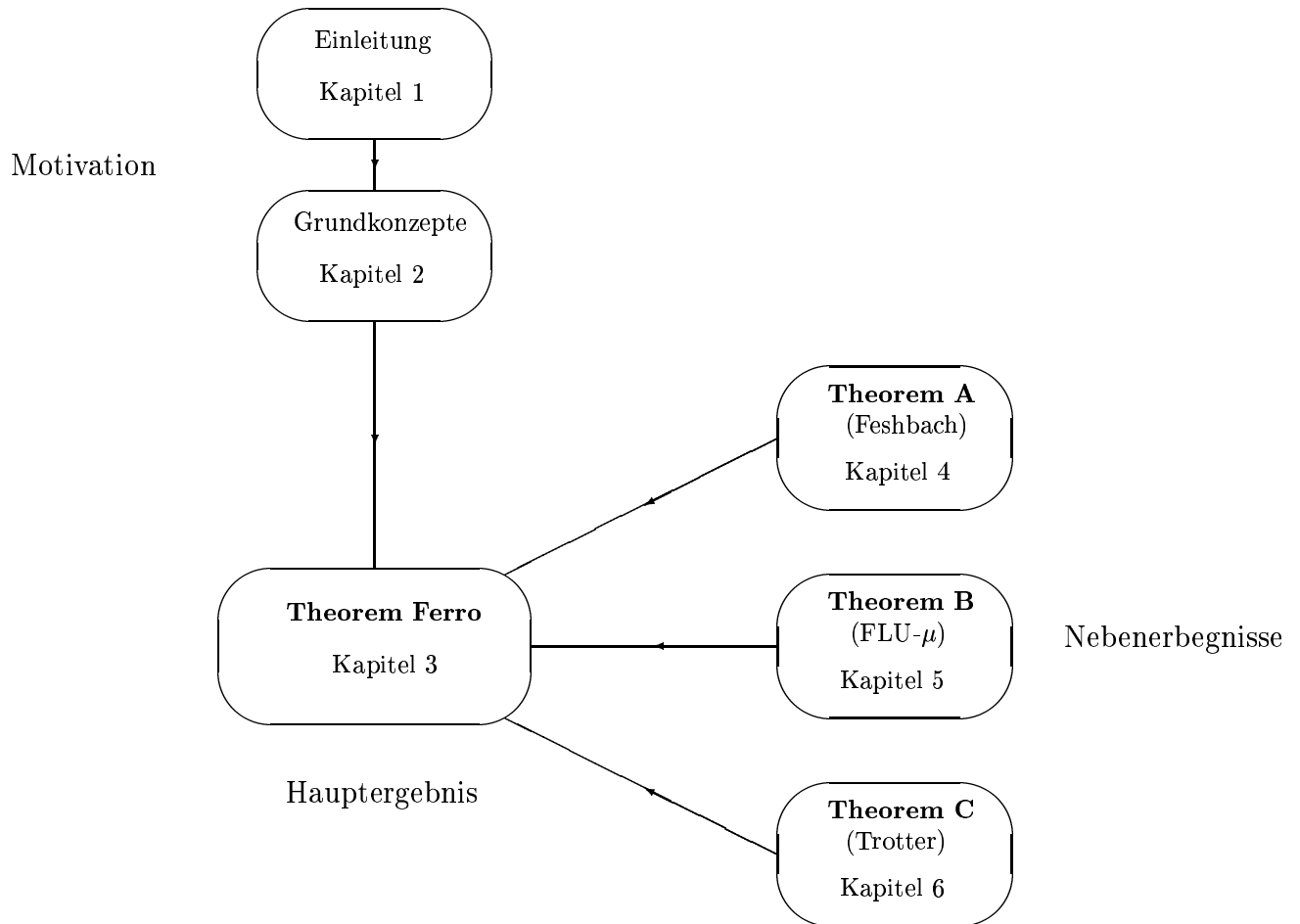
Im Kapitel 3 wird das Hauptergebnis (**Theorem Ferro**) dieser Dissertation bewiesen. Der Beweis dieses Theorems beruht auf drei Nebenergebnissen. Diese Nebenergebnisse sind voneinander unabhängig und jedes von ihnen hat seine eigene Wichtigkeit, da jedes von diesen Nebenergebnissen eventuell in einem anderen Modell bzw. in einer anderen Situation angewandt werden kann.

In den Kapiteln 4, 5 und 6 wird jeweils ein Nebenergebnis bewiesen: in Kapitel 4 das **Theorem A**, in Kapitel 5 das **Theorem B** und in Kapitel 6 das **Theorem C**.

Um die Beweise der Theoreme übersichtlich zu gestalten, werden die Beweise ihrer Lemmata in der Regel unter Zuhilfenahme von Behauptungen durchgeführt, die gesondert bewiesen werden. Das Ende eines Behauptungsbeweises zeigt ein Dreieck (\triangle) an.

⁷Von einem mathematischen Gesichtspunkt aus wird in dieser Dissertation die Rigidität der Lösung eines Minimierungsproblems bezüglich des Kopplungsparameters bewiesen.

Das folgende Schema fasst den Inhalt der vorliegende Dissertation zusammen:



In dem obigen Schema stehen in Klammern die Abkürzungen für die im jeweiligen Kapitel angewandten Methoden. Nämlich: (Feshbach) steht für die Feshbach-Projektion-Methode, (FLU- μ) steht für die großkanonische Ensemble-Version aus dem Artikel [FLU 02] und (Trotter) steht für die Methode der Trotter-Formel, einer Formel zur Berechnung der Exponentialfunktion der Summe zweier Operatoren.

2 Grundlegende Konzepte und HF-Theorie für das Hubbardmodell

In diesem Kapitel geht es wesentlich um zwei Punkte: die Definition von Ferromagnetismus einzuführen und das HFz-Hubbardmodell aus dem ursprünglichen Hubbardmodell abzuleiten.

2.1 Ferromagnetismus und Nagaoka-Theorem

Magnetismus ist von einem ersten physikalischen Gesichtspunkt aus ein **kooperatives** Phänomen der Elektronenspins (Träger der elementaren magnetischen Momente).

Für unseren Zweck ist es wichtig, eine formale Definition des Magnetismus zu haben, die mit unserem Ausgangspunkt (dem Hamiltonoperator in (1.1)) verbunden ist. Dazu werden zuerst die **Gesamtspinoperatoren** eingeführt⁸:

$$\hat{S}_{tot}^{(\alpha)} = \sum_{x \in \Lambda} \hat{S}_x^{(\alpha)} \quad \text{mit} \quad \hat{S}_x^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \tau = \uparrow, \downarrow} c_{x, \sigma}^\dagger p_{\sigma, \tau}^{(\alpha)} c_{x, \tau} \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (2.1)$$

wobei $p^{(\alpha)} \in M_2(\mathbb{C})$ die Pauli-Matrizen sind, nämlich:

$$p^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad p^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \quad p^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Wie bei dem Hamiltonoperator (1.1) wirken diese drei Gesamtspinoperatoren auf den N -Teilchen-Hilbertraum $\mathcal{H}^{(N)}$. Ihre quadratische Summe wird als *der vierte Gesamtspinoperator* definiert:

$$\hat{S}_{tot}^2 := (\hat{S}_{tot}^{(1)})^2 + (\hat{S}_{tot}^{(2)})^2 + (\hat{S}_{tot}^{(3)})^2$$

Ferner gelten folgende Vertauschungsrelationen:

$$[\hat{S}_{tot}^2, \hat{S}_{tot}^{(\alpha)}] = 0, \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad \text{Aber} \quad [\hat{S}_{tot}^{(\alpha)}, \hat{S}_{tot}^{(\beta)}] = \varepsilon_{\alpha, \beta, \gamma} \hat{S}_{tot}^{(\gamma)}, \quad \alpha, \beta, \gamma = 1, 2, 3. \quad (2.2)$$

Außerdem *vertauschen diese vier Gesamtspinoperatoren mit \hat{H} , so dass \hat{H} , \hat{S}_{tot}^2 und \hat{S}_{tot}^3 (oder eine andere Komponente) gleichzeitig diagonalisiert werden können*. Mit anderen Worten besitzt der Hubbard-Hamiltonoperator \hat{H} die Spinrotationsinvarianz oder Spinrotationssymmetrie.

Die Eigenwerte des Gesamtspinoperators $\hat{S}_{tot}^2 : \mathcal{H}^{(N)} \rightarrow \mathcal{H}^{(N)}$ sind gegeben durch:

$$S_{tot}(S_{tot} + 1) \quad \text{mit} \quad S_{tot} = \begin{cases} 0, 1, \dots, (S_{max} = N/2) & \text{falls } N \text{ gerade ist} \\ 1/2, 3/2, \dots, (S_{max} = N/2) & \text{falls } N \text{ ungerade ist} \end{cases}$$

Die Beziehung zwischen der Spinrotationsinvarianz (2.2) und dem Eigenwert $S_{tot}(S_{tot} + 1)$ zeigt sich folgendermaßen:

Seien E ein fester Eigenwert von \hat{H} und $S_{tot}(S_{tot} + 1)$ ein fester Eigenwert von \hat{S}_{tot}^2 . Falls es einen $\Psi \in \mathcal{H}^{(N)}$ mit der Eigenschaft gibt, dass Ψ ein Eigenzustand zu dem Eigenwert E und gleichzeitig ein Eigenzustand zu dem Eigenwert $S_{tot}(S_{tot} + 1)$ ist, dann kann man noch $2 S_{tot}$ weitere (zueinander und zu Ψ orthogonale) Eigenzustände mit dieser Eigenschaft finden. Diese Tatsache nennt man *die $2 S_{tot} + 1$ triviale Entartung*.

Ist nur der Eigenwert $S_{tot}(S_{tot} + 1)$ fest, dann haben wir die folgende wichtige Definition:

⁸„Gesamt“ wurde in „Gesamtspinoperatoren“ mit fetten Buchstaben geschrieben, um die Beziehung mit „**kooperatives** Phänomen“ zu betonen.

Definition 2.1. (Die kleinste Energie für ein festes S_{tot})

$$E_{gs}^u(N, |\Lambda|, S_{tot}) := \min\{ \langle \psi | \hat{H} \psi \rangle \mid \psi \in \mathcal{H}^{(N)} \text{ mit } \hat{S}_{tot}^2 \psi = S_{tot}(S_{tot} + 1) \psi \} \quad (2.3)$$

Die Zustände $\psi \in \mathcal{H}^{(N)}$, die $E_{gs}^u(N, |\Lambda|, S_{tot})$ mit $\underline{S_{tot} = S_{max}}$ realisieren, sind wichtig, weil in diesem Fall die folgende Proposition gilt:

Proposition 2.1.

$$E_{gs}^u(N, |\Lambda|, S_{max}) = \min\{ \langle \psi | \hat{H} \psi \rangle \mid \psi \in \mathcal{H}^{(N)} \text{ mit } \hat{N}_{\downarrow} \psi = 0 \} \quad (2.4)$$

wobei $\hat{N}_{\downarrow} := \sum_{x \in \Lambda} n_{x, \downarrow}$.

Andererseits ist es nicht so schwierig, die rechte Seite der Gleichung (2.4) auszurechnen, nämlich gilt:

$$\min\{ \langle \psi | \hat{H} \psi \rangle \mid \psi \in \mathcal{H}^{(N)} \text{ mit } \hat{N}_{\downarrow} \psi = 0 \} = \sum_{j=1}^N e_j(t) \quad (2.5)$$

wobei $e_1(t) \leq e_2(t) \leq \dots \leq e_{|\Lambda|}(t)$ die Eigenwerte der Hüpfermatrix $t \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|})$ sind.

Wegen dieser Proposition definiert man Folgendes:

Definition 2.2. (gesättigte ferromagnetische Energie $E_{\text{sferro}}(N, |\Lambda|)$)

Für alle $0 \leq N \leq |\Lambda|$ wird die (gesättigte) ferromagnetische Energie von N Elektronen auf dem Gitter Λ folgendermaßen definiert:

$$E_{\text{sferro}}(N, |\Lambda|) := \sum_{j=1}^N e_j(t)$$

Nach (2.4) und (2.5) existieren Zustände $\psi \in \mathcal{H}^{(N)}$ mit Energie $E_{\text{sferro}}(N, |\Lambda|)$ und Gesamtspin $S_{tot} = S_{max}$. D.h. der Gesamtspin erreicht seinen Maximumwert. Daher kommt der Name „gesättigt“.

Außerdem befindet sich unter diesen Zuständen der folgende vollpolarisierte (ferromagnetisch) Zustand:

$$\Phi_{\text{sferro}} = \left(\prod_{j=1}^N c_{\varphi_j, \uparrow}^\dagger \right) | \text{Vakuum} \rangle \quad (2.6)$$

wobei $\{\varphi_j\}_{j=1}^N$ N orthonormale Eigenvektoren zu den Eigenwerten $e_1(t), e_2(t), \dots, e_N(t)$ sind.

Weil dieser Zustand die Energie $\sum_{j=1}^N e_j(t)$ und den Gesamtspin $S_{max} (= N/2)$ besitzt und weiterhin vollpolarisiert ist, spricht man von gesättigter ferromagnetischer Energie für $\sum_{j=1}^N e_j(t)$.

Nun haben wir den folgenden Auszug von Tasaki aus [Tsa-r2 97]:

„ ... When we discuss magnetism of the system, the most important issue is to determine the value of S_{tot} in the ground state(s). If the total spin of the ground state grows proportionally to the number of sites $|\Lambda|$ as we increase the size of Λ , we say that the system exhibits ferromagnetism in a broad sense. This roughly means that the system behaves as a *magnet*. If the total spin of the ground state(s) coincides with the maximum possible value S_{max} , we say that the system exhibits saturated ferromagnetism... “

Definition 2.3. (*gesättigter Ferromagnetismus*)

Man sagt, dass ein Hubbard-Modell $\hat{H} = \hat{H}(N \leq |\Lambda|, u)$ gesättigten Ferromagnetismus besitzt, wenn jeder Grundzustand von \hat{H} den Gesamtspin $S_{\text{tot}} = S_{\text{max}} (= N/2)$ hat.

Nach dieser Definition ist Ferromagnetismus in dieser Dissertation gemeint.

D.h. in dieser Arbeit bedeutet *Ferromagnetismus* „gesättigter Ferromagnetismus“.

Kommentar: (Schwache Version des gesättigten Ferromagnetismus)

In vielen Fällen kann man leider nicht zeigen, dass ein Hubbardmodell in strikten Sinn der Definition 2.3 gesättigten Ferromagnetismus besitzt, sondern nur, dass sich der vollpolarisiert ferromagnetische Zustand Φ_{sferro} (2.6) mit Gesamtspin $S_{\text{tot}} = S_{\text{max}} (= N/2)$ unter den Grundzuständen befindet.

Als Konsequenz der Definition 2.3, (2.3), (2.4) und (2.5) erhalten wir folgende Proposition:

Proposition 2.2. (*gesättigter Ferromagnetismus $\Rightarrow E_{gs}^u = E_{\text{sferro}}$ oder äquivalenterweise gesättigter Ferromagnetismus $\Rightarrow \Phi_{\text{sferro}}$ ist ein Grundzustand*)

Besitzt ein Hubbard-Modell $\hat{H} = \hat{H}(N \leq |\Lambda|, u)$ gesättigten Ferromagnetismus, dann ist seine Grundzustandenergie E_{gs}^u gleich der gesättigten ferromagnetischen Energie $\sum_{j=1}^N e_j(t) =: E_{\text{sferro}}$, was äquivalent dazu ist, dass sich der Zustand Φ_{sferro} (2.6) unter den Grundzuständen befindet.

Bemerke, dass für alle Hubbardmodelle $E_{gs}^u \leq E_{\text{sferro}}$ immer gilt, da $\{\psi \in \mathcal{H}^{(N)} \mid \hat{N}_\downarrow \psi = 0\} \subset \mathcal{H}^{(N)}$ und $E_{\text{sferro}} = \min\{\langle \Psi \mid \hat{H} \Psi \rangle \mid \Psi \in \mathcal{H}^{(N)} \text{ mit } \hat{N}_\downarrow \psi = 0\}$.

Kommentar: D. h. die Tatsache, dass Φ_{sferro} ein Grundzustand ist, ist nur eine notwendige Bedingung, damit ein Hubbardmodell gesättigten Ferromagnetismus besitzt. In vielen Fällen kann man leider nicht zeigen, dass ein Hubbardmodell im strikten Sinn der Definition 2.3 gesättigten Ferromagnetismus besitzt, sondern nur, dass diese notwendige Bedingung für dieses Hubbardmodell erfüllt wird.

Nun fassen wir diese notwendige Bedingung als eine Definition zusammen.

Definition 2.4. (*schwache Version des gesättigten Ferromagnetismus*)

Man sagt, dass ein Hubbard-Modell $\hat{H} = \hat{H}(N \leq |\Lambda|, u)$ schwachen gesättigten Ferromagnetismus besitzt, wenn Φ_{sferro} ein Grundzustand ist.

Die Definition 2.4 ist nicht so schwach, wie man prinzipiell denkt, da folgende Bemerkung gilt:

Bemerkung 2.1. Die Definition 2.4 führt zu der Definition 2.3, falls man zusätzlich folgende Tatsache beweist:

„Der Zustand Φ_{sferro} ist bis auf die triviale $(2S_{\text{max}} + 1)$ -fach Entartung der einzige Grundzustand“ (2.7)

Diese Bedingung (2.7) kann man zum Beispiel mit Hilfe eines Perron-Frobenius-Arguments („connectivity condition“) beweisen.

2.1.1 Nagaoka-Theorem

Das Nagaoka-Theorem besagt, dass das Hubbardmodell $\hat{H} = \hat{H}(N = |\Lambda| - 1, u = \infty)$ gesättigten Ferromagnetismus besitzt. Hierbei versteht man unter dem Limes $u = \infty$ im Hubbardmodell Folgendes:

Definition 2.5. ($\hat{H}(N, u = \infty)$, $E_{gs}^{u=\infty}(N, |\Lambda|)$, $\Psi_\infty(N)$)

$$\hat{H}(N, u = \infty) := P_{\text{ni}} \left(\sum_{\substack{\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}, \\ x, y \in \Lambda: \\ |x-y|=1}} c_{x\sigma}^\dagger c_{y\sigma} \right) : \mathcal{H}_{\text{ni}}^{(N)} \rightarrow \mathcal{H}_{\text{ni}}^{(N)}$$

Hierbei sind

$$\mathcal{H}^{(N)} \supset \mathcal{H}_{\text{ni}}^{(N)} := \ker(\hat{H}_{\text{int}}) = \{ \Psi \in \mathcal{H}^{(N)} \mid \hat{H}_{\text{int}} \Psi = 0 \} \quad \text{mit} \quad \hat{H}_{\text{int}} := \sum_{x \in \Lambda} n_{x\uparrow} n_{x\downarrow}$$

und

$$P_{\text{ni}} \in B(\mathcal{H}^{(N)}) \quad \text{die Projektion auf den Untervektorraum} \quad \mathcal{H}_{\text{ni}}^{(N)}.$$

Die Bezeichnung „ni“ kommt aus dem Englischen und bedeutet „no interaction“.

Weiterhin ist $E_{gs}^{u=\infty}(N, |\Lambda|)$ folgendermaßen definiert:

$$E_{gs}^{u=\infty}(N, |\Lambda|) := \min \{ \langle \psi \mid \hat{H}(N, u = \infty) \psi \rangle \mid \psi \in \mathcal{H}_{\text{ni}}^{(N)} \text{ mit } \|\Psi\| = 1 \} \quad (2.8)$$

Die Vektoren $\Psi \in \mathcal{H}_{\text{ni}}^{(N)}$, die $E_{gs}^{u=\infty}(N, |\Lambda|)$ realisieren, heißen Grundzustände zu $\hat{H}(N, u = \infty)$ und werden mit $\Psi_\infty(N)$ bezeichnet.

Bemerkung 2.2. Die Definition von $E_{gs}^{u=\infty}(N, |\Lambda|)$ steht in Übereinstimmung mit folgender Tatsache:

$$E_{gs}^u(N, |\Lambda|) \leq E_{gs}^{u'}(N, |\Lambda|) \quad \text{für} \quad u < u'$$

Weiterhin wird die folgende erwartete Tatsache

$$\lim_{u \rightarrow \infty} E_{gs}^u(N, |\Lambda|) = E_{gs}^{u=\infty}(N, |\Lambda|)$$

durch das nachfolgende Argument begründet:

„... Die Eigenzustände von $\hat{H}(N, u) = \hat{H}_{\text{hop}} + u \hat{H}_{\text{int}} : \mathcal{H}^{(N)} \rightarrow \mathcal{H}^{(N)}$ lassen sich in zwei verschiedene Typen klassifizieren, nämlich: in diejenigen mit divergierender Energie (wenn $u \rightarrow \infty$) und in diejenigen mit endlicher Energie (wenn $u \rightarrow \infty$). Selbstverständlich sind wir nur an dem zweiten Typ von Eigenzuständen interessiert. Sei Ψ mit Energie E ein Eigenzustand vom zweiten Typ. Nehmen wir an, dass sowohl $\Psi(u)$ als auch $E(u)$ durch u stetig parametrisiert sind. Bemerke, dass $P_{\text{ni}} \Psi \rightarrow \Psi$ wenn $u \rightarrow \infty$ gilt, da sonst $E(u)$ in diesem Limes divergieren würde. Damit geht die Eigenwertgleichung $E(u) \Psi(u) = (\hat{H}_{\text{hop}} + u \hat{H}_{\text{int}}) \Psi(u)$ im Limes $u \rightarrow \infty$ in die Eigenwertgleichung $E(u) P_{\text{ni}} \Psi(u) = P_{\text{ni}} (\hat{H}_{\text{hop}} + u \hat{H}_{\text{int}}) P_{\text{ni}} \Psi(u)$ über. Diese letzte Eigenwertgleichung ist dann gleich $E(u) P_{\text{ni}} \Psi(u) = P_{\text{ni}} \hat{H}_{\text{hop}} P_{\text{ni}} \Psi(u)$, da $u \hat{H}_{\text{int}} P_{\text{ni}} = 0$ “ (Zitat aus [Tsa-r1 97]).

Theorem 2.1. (Nagaoka) Für das Hubbardmodell $\hat{H} = \hat{H}(N = |\Lambda| - 1, u = \infty)$, (auf dem Gitter $\Lambda = (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ mit Hüpfermatrix $t = \sum_{|x-y|=1} |\delta_x\rangle\langle\delta_y|$) gilt Folgendes:

1. Φ_{ferro} (Mit Gesamtspin $S_{\text{max}} = N/2$) ist ein Grundzustand.
2. Φ_{ferro} ist bis auf die triviale $(2S_{\text{max}}+1)$ -fach Entartung der einzige Grundzustand⁹ (falls $d \geq 2$).

Als Konsequenz von 1. und 2. gilt weiterhin Folgendes:

3. Erfüllt $\Psi \in \mathcal{H}_{\text{ni}}^{(N)}$ die Eigenwertgleichung $\hat{H}\Psi = E_{gs}^{u=\infty}\Psi$, dann gilt $(\hat{S}_{\text{tot}})^2\Psi = \frac{N}{2}(\frac{N}{2} + 1)\Psi$ (2.9)

Mit anderen Worten: Unter den Bedingungen $N = |\Lambda| - 1$ und $u = \infty$ (und $d \geq 2$) besitzt das Hubbardmodell gesättigten Ferromagnetismus.

4. $E_{gs}^{u=\infty}(N = |\Lambda| - 1, |\Lambda|) = E_{\text{ferro}}(N = |\Lambda| - 1, |\Lambda|)$ (2.10)

D.h. im Fall $N = |\Lambda| - 1$ gilt

$$\min\{\langle\psi|\hat{H}_{\text{hop}}\psi\rangle \mid \psi \in \mathcal{H}^{(N)} \text{ mit } \hat{H}_{\text{int}}\psi = 0\} = \min\{\langle\psi|\hat{H}_{\text{hop}}\psi\rangle \mid \psi \in \mathcal{H}^{(N)} \text{ mit } \hat{N}_{\downarrow}\psi = 0\} \quad (2.11)$$

Bem.: Im Allgemeinen gilt „ \leq “ in (2.10) und (2.11), da $\hat{N}_{\downarrow}\psi = 0 \Rightarrow \hat{H}_{\text{int}}\psi = 0$.

Kommentar: Erstaunlicherweise sind die zwei Bedingungen, $u = \infty$ und $N = |\Lambda| - 1$ (genau ein Loch), für das Nagaoka-Theorem so speziell, dass es bis jetzt (sofern wir wissen) keine Erweiterung über $u = \infty$ und $N = |\Lambda| - 1$ hinaus für die üblichen Gitter $\Lambda = (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ mit ihren entsprechenden üblichen Hüpfermatrizen $t = \sum_{|x-y|=1} |\delta_x\rangle\langle\delta_y|$ gibt.

Im Fall festes $u = \infty$, aber für $N = |\Lambda| - 2$ (zwei Löcher) (siehe [SA 91] und [TB 91]) oder für $N \leq 0.51|\Lambda|$ (siehe [SKA 90]) haben die Grundzustände Gesamtspin S_{tot} nicht gleich $S_{\text{max}} = N/2$. Somit liegt in diesen Fällen kein (gesättigter) Ferromagnetismus vor.

Wie wir schon erwähnt haben, werden von Anfang an in dieser Dissertation die üblichen Gitter $\Lambda = (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ mit ihren entsprechenden üblichen Hüpfermatrizen $t = \sum_{|x-y|=1} |\delta_x\rangle\langle\delta_y|$ betrachtet. Betrachtet man „künstlerischere“ Gitter und Hüpfermatrizen, dann haben wir Folgendes:

Für sehr besondere Gitter (wie z.B. Kagomé-Gitter) und sehr besondere Hüpfermatrizen (*flat*-Band-Dispersion) hat Milke [Mil 91], [Mi2 92] für bestimmte $N < |\Lambda|$ die Erweiterung des Nagaoka-Theorems für alle $0 < u \leq \infty$ gezeigt. Hierbei sind das Gitter Λ und die Hüpfermatrix t so besonders¹⁰, dass das schwierige Problem des Wettkampfs zwischen \hat{H}_{hop} und \hat{H}_{int} nicht stattfindet. Wegen dieser Besonderheit war eine solche Erweiterung für alle $0 < u \leq \infty$ möglich.

Ferner hat Tasaki [Tas1 94], [Tas2 95], [Tas3 95] und [Tas4 03] (*near-flat*-Band-Dispersion) für bestimmte $N < |\Lambda|$ besondere Hüpfermatrizen (mit nichtnull-Hüpferparametern für die übernächsten Nachbarn) konstruiert, so dass das schwierige Problem des Wettkampfs zwischen \hat{H}_{hop} und \hat{H}_{int} stattfindet. Unter der Bedingung, dass die Hüpferparameter der übernächsten Nachbarn genügend klein sind, konnte er immerhin ein genügend großes u finden, ab dem der (gesättigte) Ferromagnetismus entsteht.

⁹Man kann die „connectivity condition“ nur für $d \geq 2$ sichern.

¹⁰ Λ und t sind so ausgewählt, dass $e_1(t) = \dots = e_N(t)$. Daher kommt der Name *flat*-Band-Dispersion.

2.2 Hartree-Fock-Theorie für das Hubbardmodell

Dieses Unterkapitel basiert auf der Referenz [Poelchau 95] (siehe auch [Bach 92] und [Bach 93]).

Die *Approximation von Hartree-Fock* (mit HF abgekürzt) besteht darin, den Hamiltonoperator in (1.1) auf die folgende Teilmenge von $\mathcal{H}^{(N)}$ einzuschränken:

$$SD_N := \{ \varphi_1 \wedge \cdots \wedge \varphi_N \equiv \Phi \in \mathcal{H}^{(N)} \mid \{ \varphi_i \}_{i=1}^N \subset \mathcal{H} \text{ mit } \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij} \} \quad (2.12)$$

Im Rahmen dieser Approximation werden *die Minimierenden* $\Phi_* \in SD_N$ des *HF-Energiefunktionals* untersucht:

$$\mathcal{E}_{hf}^u(\Phi) := \langle \Phi | \hat{H}(u) | \Phi \rangle, \quad \Phi \in SD_N. \quad (2.13)$$

Kurz erklärt: Die Menge $SD_N \subset \mathcal{H}^{(N)}$ besteht aus allen normierten Vektoren Φ , die sich als antisymmetrisierte Tensorprodukte von N zueinander orthonormalen Vektoren φ aus $\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}^{(1)}$ darstellen lassen, nämlich:

$$\Phi \equiv \varphi_1 \wedge \cdots \wedge \varphi_N := \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in S_N} (-1)^\pi \varphi_{\pi(1)} \otimes \cdots \otimes \varphi_{\pi(N)} \quad (2.14)$$

Hierbei ist S_N die Permutationsgruppe von N Elementen.

Die Elemente der Menge SD_N heißen *Slaterdeterminanten* und die *HF-Grundzustandenergie* ist folgendermaßen definiert:

$$E_{hf}^u(N) := \min \{ \langle \Phi | \hat{H}(u) | \Phi \rangle \mid \Phi \in SD_N \}. \quad (2.15)$$

Wir nennen $\Phi_* \in SD_N$ einen *HF-Grundzustand* (oder einen Minimierenden), wenn Φ_* die Gleichung

$$E_{hf}(N) = \langle \Phi_* | \hat{H}(u) | \Phi_* \rangle$$

erfüllt.

2.2.1 Slaterdeterminanten & Fermionische Dichtematrizen

Im Folgenden ist $\{ f_i \mid i \in \Lambda \times \{ \uparrow, \downarrow \} \} \subset \mathcal{H}$ eine beliebige, aber feste orthonormale Basis von \mathcal{H} und weiterhin ist

$$\mathcal{F}(\mathcal{H}) := \bigoplus_{N=0}^{\dim \mathcal{H}} \mathcal{H}^{(N)} \quad (2.16)$$

der *Fockraum* zu dem Ein-Teilchen-Hilbertraum \mathcal{H} . Hierbei sind $\mathcal{H}^{(1)} \equiv \mathcal{H}$, $\mathcal{H}^{(0)} \simeq \mathbb{C}$ und $\dim \mathcal{H} = 2 |\Lambda|$.

Definition 2.6. Sei $\Psi \in \mathcal{F}(\mathcal{H})$ mit $\|\Psi\|_{\mathcal{F}(\mathcal{H})} = 1$. Man definiert einen beschränkten Operator γ_Ψ auf \mathcal{H} folgendermaßen:

$$\Psi \in \mathcal{F} \quad \longmapsto \quad \gamma_\Psi := \sum_{k,m} \langle \Psi | c^\dagger(f_k) c(f_m) \Psi \rangle |f_m\rangle \langle f_k|$$

γ_Ψ heißt die *Einteilchendichtematrix* (1-pdm) zu Ψ .

Weiterhin definiert man einen beschränkten Operator Γ_Ψ nun auf $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ folgendermaßen:

$$\Psi \in \mathcal{F} \quad \longmapsto \quad \Gamma_\Psi := \sum_{k,l;m,n} \langle \Psi | c^\dagger(f_l) c^\dagger(f_k) c(f_m) c(f_n) \Psi \rangle |f_m \otimes f_n\rangle \langle f_k \otimes f_l|$$

Γ_Ψ heißt die Zweiteilchendichtematrix (2-pdm) zu Ψ .

Einige direkte Eigenschaften der 1- und 2-pdm sind:

Proposition 2.3. Für alle $\Psi \in \mathcal{F}(\mathcal{H})$ mit $\|\Psi\|_{\mathcal{F}(\mathcal{H})} = 1$ gilt

$$\mathbf{0} \leq \gamma_\Psi = \gamma_\Psi^\dagger \leq \mathbf{1} \quad , \quad \mathbf{0} \leq \Gamma_\Psi = \Gamma_\Psi^\dagger \leq \text{Tr}\{\Gamma_\Psi\} \mathbf{1} ,$$

$$\text{Tr}\{\gamma_\Psi\} = \langle \Psi | \hat{N} \Psi \rangle \quad , \quad \text{Tr}\{\Gamma_\Psi\} = \langle \Psi | \hat{N}(\hat{N} - \mathbf{1}) \Psi \rangle .$$

Hierbei ist $\hat{N} := \sum_{\substack{x \in \Lambda \\ \sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}}} n_{x\sigma}$ der Gesamtbesetzungszahloperator. Bemerke Folgendes: Im Spezialfall $\Psi \in \mathcal{H}^{(N)}$ gilt $\hat{N} \Psi = N \Psi$.

Im Spezialfall einer Slaterdeterminante $\Phi \in SD_N \subset \mathcal{H}^{(N)}$ lässt sich diese Eigenschaften erheblich vereinfachen, nämlich:

Proposition 2.4. (Charakterisierung der Slaterdeterminanten durch Projektionen)

1. Falls $\Phi \in \mathcal{H}^{(N)}$ eine Slaterdeterminante ist, dann ist ihre dazugehörige 1-pdm $\gamma_\Phi = \gamma_\Phi^2$ eine orthogonale Projektion von Rang $\text{Tr}\{\gamma_\Phi\} = N$.
2. Sei andererseits $\gamma = \gamma^\dagger = \gamma^2$ eine orthogonale Projektion von Rang $\text{Tr}\{\gamma_\Phi\} = N$, dann existiert eine Slaterdeterminante $\Phi \in SD_N$, so dass $\gamma = \gamma_\Phi$.
3. Falls $\Phi \in \mathcal{H}^{(N)}$ eine Slaterdeterminante ist, dann ist ihre dazugehörige 2-pdm durch $\Gamma_\Phi = \gamma_\Phi \otimes \gamma_\Phi - \text{Ex}(\gamma_\Phi \otimes \gamma_\Phi)$ gegeben. Hierbei ist $\text{Ex} : f \otimes g \mapsto g \otimes f$ der Austauschoperator auf $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$.

2.2.2 Das Hartree-Fock-Energiefunktional für das Hubbardmodell

In diesem Unterkapitel wird das HF-Energiefunktional für das Hubbardmodell $\mathcal{E}_{hf}^u(\Phi) := \langle \Phi | \hat{H}(u) \Phi \rangle$ mit Hilfe der Proposition 2.4 durch Einteilchendichtematrizen γ statt Slaterdeterminanten Φ als Variable ausgedrückt. Den gesuchten Ausdruck für $\mathcal{E}_{hf}^u(\gamma)$ werden wir in (2.20) und (2.21) erhalten.

Proposition 2.5. Für $\Phi = \varphi_1 \wedge \cdots \wedge \varphi_N = \prod_{k=1}^N c^\dagger(\varphi_k) |\Omega\rangle \in SD_N$ ($\varphi_k \in \mathcal{H}$) gilt

$$\mathcal{E}_{hf}^u(\Phi) := \langle \Phi | \hat{H}(u) \Phi \rangle = \sum_{k=1}^N \langle \varphi_k | t \otimes \mathbf{1}_2 \varphi_k \rangle + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^N \langle \varphi_k \otimes \varphi_l | V_{\text{Hubb}} \varphi_k \otimes \varphi_l \rangle - \langle \varphi_k \otimes \varphi_l | V_{\text{Hubb}} \varphi_l \otimes \varphi_k \rangle \quad (2.17)$$

wobei

$$V_{\text{Hubb}} := \sum_{x \in \Lambda} (\mathbf{1}_x \otimes \mathbf{1}_2) \otimes (\mathbf{1}_x \otimes \mathbf{1}_2) \in B(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}) \quad (2.18)$$

Bemerkung:

1. Für $V_{\text{Hubb}} \in B(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H})$ gilt

$$\frac{1}{2} d\Gamma(V_{\text{Hubb}}) = \sum_{x \in \Lambda} n_{x\uparrow} n_{x\downarrow} \in B(\mathcal{F}),$$

wobei $d\Gamma(V)$ für ein allgemeines $V \in B(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H})$ folgendermaßen definiert ist:

$$d\Gamma(V) = \sum_{k,l;m,n} V_{kl;mn} c^\dagger(f_l) c^\dagger(f_k) c(f_m) c(f_n) \quad \text{mit} \quad V_{kl;mn} = \langle f_k \otimes f_l | V f_m \otimes f_n \rangle.$$

2. Für $t \otimes \mathbf{1}_2 \in B(\mathcal{H})$ gilt

$$d\Gamma(t \otimes \mathbf{1}_2) = \sum_{\substack{xy \in \Lambda \\ \sigma\tau \in \{\uparrow, \downarrow\}}} t_{xy} c_{x\sigma}^\dagger c_{y\sigma} \in B(\mathcal{F}),$$

wobei $d\Gamma(h)$ für ein allgemeines $h \in B(\mathcal{H})$ folgendermaßen definiert ist:

$$d\Gamma(h) = \sum_{ij} h_{ij} c^\dagger(f_j) c(f_i) \quad \text{mit} \quad h_{ij} = \langle \varphi_i | h \varphi_j \rangle.$$

D.h. $\hat{H}(u)$ lässt sich bezüglich $d\Gamma(t)$ und $d\Gamma(V_{\text{Hubb}})$ folgendermaßen kurz schreiben, nämlich:

$$\hat{H}(u) = d\Gamma(t \otimes \mathbf{1}_2) + u \frac{1}{2} d\Gamma(V_{\text{Hubb}}) \in B(\mathcal{F})$$

Proposition 2.6. Für $\Phi = \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_N = \prod_{k=1}^N c^\dagger(\varphi_k) |\Omega\rangle \in SD_N$ ($\varphi_k \in \mathcal{H}$) gilt Folgendes:

1.

$$\sum_{k=1}^N \langle \varphi_k | t \otimes \mathbf{1}_2 \varphi_k \rangle = \text{Tr}_{\mathcal{H}} \{ (t \otimes \mathbf{1}_2) \gamma_\Phi \}$$

2.

$$\sum_{k,l=1}^N \langle \varphi_k \otimes \varphi_l | V_{\text{Hubb}} \varphi_k \otimes \varphi_l \rangle - \langle \varphi_k \otimes \varphi_l | V_{\text{Hubb}} \varphi_l \otimes \varphi_k \rangle = \text{Tr}_{\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}} \{ V_{\text{Hubb}} (\mathbf{1} - \text{Ex}) (\gamma_\Phi \otimes \gamma_\Phi) \}$$

3.

$$\rho_\Phi(x) := \langle \Phi | \frac{1}{2} (n_{x\uparrow} + n_{x\downarrow}) \Phi \rangle = \frac{1}{2} \text{Tr} \{ (\mathbf{1}_x \otimes \mathbf{1}_2) \gamma_\Phi \} =: \rho_{\gamma_\Phi}(x) \quad \text{Elektronendichte am Gitterplatz } x$$

4.

$$\vec{S}_\Phi(x) := \langle \Phi | \frac{1}{2} \sum_{\tau, \tilde{\tau}} \vec{\sigma}_{\tau, \tilde{\tau}} C_{x\tau}^\dagger C_{x\tilde{\tau}} \Phi \rangle = \frac{1}{2} \text{Tr} \{ (\mathbf{1}_x \otimes \vec{\sigma}) \gamma_\Phi \} =: \vec{S}_{\gamma_\Phi}(x) \quad \text{Spindichte am Gitterplatz } x$$

wobei γ_Φ die Einteilchendichtematrix zu der Slaterdeterminante Φ gemäß der Definition 2.6 und

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

die Pauli-Matrizen sind.

Eine Formel, die physikalisch leichter zu interpretieren ist, erhält man, wenn man den Wechselwirkungsanteil des HF-Energiefunktionals $\langle \Phi | \sum_{x \in \Lambda} n_{x\uparrow} n_{x\downarrow} | \Phi \rangle$ bezüglich Elektronen- und Spindichte umschreibt, nämlich:

Proposition 2.7. *Der Wechselwirkungsanteil des HF-Energiefunktionals lässt sich bezüglich der Elektronen- und Spindichte folgendermaßen bestimmen:*

$$\frac{1}{2} \text{Tr}_{\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}} \{ V_{\text{Hubb}} (\mathbf{1} - \text{Ex}) (\gamma_{\Phi} \otimes \gamma_{\Phi}) \} = \sum_{x \in \Lambda} \{ \rho_{\Phi}^2(x) - |\vec{S}_{\Phi}(x)|^2 \}$$

D.h. nach den Propositionen 2.5, 2.6 und 2.7 gilt

$$\mathcal{E}_{hf}^u(\Phi) := \text{Tr}\{(t \otimes \mathbf{1}_2) \gamma_{\Phi}\} + u \cdot \sum_{x \in \Lambda} \{ \rho_{\gamma_{\Phi}}^2(x) - |\vec{S}_{\gamma_{\Phi}}(x)|^2 \}$$

Weiterhin gilt nach der **Äquivalenz zwischen Slaterdeterminanten Φ und Projektionen γ** (Proposition 2.4) Folgendes:

$$E_{hf}^u(N) = \inf \{ \mathcal{E}_{hf}^u(\gamma) \mid \gamma \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|} \otimes \mathbb{C}^2), \gamma = \gamma^\dagger = \gamma^2, \text{Tr}\{\gamma\} = N \} \quad (2.19)$$

wobei

$$\mathcal{E}_{hf}^u(\gamma) := \text{Tr}\{(t \otimes \mathbf{1}_2) \gamma\} + u \cdot \sum_{x \in \Lambda} \{ \rho_{\gamma}^2(x) - |\vec{S}_{\gamma}(x)|^2 \} \quad (2.20)$$

mit

$$\rho_{\gamma}(x) = \frac{1}{2} \text{Tr}\{(\mathbf{1}_x \otimes \mathbf{1}_2) \gamma\} \quad \text{und} \quad \vec{S}_{\gamma}(x) = \frac{1}{2} \text{Tr}\{(\mathbf{1}_x \otimes \vec{\sigma}) \gamma\} \quad (2.21)$$

Dank dem nachfolgenden Theorem kann man die nicht-konvexe Menge $\{\gamma \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|} \otimes \mathbb{C}^2) \mid \gamma = \gamma^\dagger = \gamma^2, \text{Tr}\{\gamma\} = N\}$ durch die **konvexe Menge** $\{\gamma \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|} \otimes \mathbb{C}^2) \mid \mathbf{0} \leq \gamma \leq \mathbf{1}, \text{Tr}\{\gamma\} = N\}$ ersetzen, um den Minimumwert $E_{hf}^u(N)$ in (2.19) zu bestimmen, nämlich:

Theorem 2.2. *(Liebsches Variationsprinzip [Lieb 81])*

$$E_{hf}^u(N) = \inf \{ \mathcal{E}_{hf}^u(\gamma) \mid \gamma \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|} \otimes \mathbb{C}^2), \mathbf{0} \leq \gamma \leq \mathbf{1}, \text{Tr}\{\gamma\} = N \} \quad (2.22)$$

Für einen einfachen Beweis dieses Theorems siehe auch [Bach 92].

2.2.3 Zusammenfassung

Die Untersuchung der Hartree-Fock-Grundzustände für das Hubbardmodell stellt sich mathematisch folgendermaßen dar:

Auf der folgenden konvexen Menge (siehe (2.22))

$$K(N, 2|\Lambda|) := \{ \gamma \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|} \oplus \mathbb{C}^{|\Lambda|}) \mid \mathbf{0} \leq \gamma \leq \mathbf{1} ; \text{Tr}_1\{\gamma\} = N \}, \quad (0 \leq N \leq 2|\Lambda|) \quad (2.23)$$

soll das *Hartree-Fock-Energiefunktional* (siehe (2.20))

$$\mathcal{E}_{hf}^u(\gamma) = T(\gamma) + u \cdot W(\gamma) \quad , \quad u \geq 0 \quad (2.24)$$

minimiert werden. Hierbei sind die Funktionale $T(\gamma)$ und $W(\gamma)$ gegeben durch:

- 1) $T(\gamma) := \text{Tr}_1\{(-t \oplus -t)\gamma\}$ ist der *Einteilchenenergieanteil* oder die *Hüpfenergie* von $\gamma \in K(N, 2|\Lambda|)$, wobei $t \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|})$ die „*Hopping-Matrix*“ ist. In dieser Dissertation wird t als

$$t = \sum_{\substack{x,y \in \Lambda \\ |x-y|=1}} |\delta_x\rangle\langle\delta_y|, \quad \Lambda = (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d \quad \text{Diskreter Laplace-Operator} \\ \text{ohne diagonale Elemente} \quad (2.25)$$

festgelegt.

- 2) $W(\gamma) := \sum_{x \in \Lambda} W_x(\gamma) = \sum_{x \in \Lambda} \{ \rho_\gamma(x)^2 - \|\vec{s}_\gamma(x)\|^2 \}$ ist der Wechselwirkungsanteil, wobei

$$\rho_\gamma(x) = \frac{1}{2} \text{Tr}\{(\mathbf{1}_x \otimes \mathbf{1})\gamma\} \quad \text{und} \quad \vec{s}_\gamma(x) = \frac{1}{2} \text{Tr}\{(\mathbf{1}_x \otimes \vec{\sigma})\gamma\}$$

die Elektronendichte bzw. Spindichte am Gitterplatz $x \in \Lambda$ sind. Weiterhin entspricht $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ den drei Pauli-Matrizen.

Die Elemente der Menge $K(N, 2|\Lambda|)$, die das HF-Energiefunktional \mathcal{E}_{hf}^u als Definitionsbereich hat, sind als *Einteilchendichtematrizen* oder 1-pdm bekannt.

Einen Minimumwert von \mathcal{E}_{hf}^u auf $K(N, 2|\Lambda|)$ bezeichnet man mit E_{hf}^u (*HF-Grundzustandenergie*) und seine entsprechenden Minimierenden mit γ_* (Die Einteilchendichtematrix des HF-Grundzustandes).

Die (echte) Grundzustandenergie des Standard-Hubbardmodells (nicht in der HF-Approximation) bezeichnet man mit E_{gs}^u . Selbstverständlich gilt $E_{gs}^u \leq E_{hf}^u$.

2.3 Bekannte Resultate

Direkt aus (2.24) ist die HF-Grundzustandenergie bei unendlicher Kopplung folgendermaßen definiert:

Definition 2.7. (*HF-Grundzustandenergie bei unendlicher Kopplung*)

$$E_{hf}^{u=\infty}(N, |\Lambda|) := \inf\{ T(\gamma) \mid \gamma \in K(N, 2|\Lambda|) \text{ und } W(\gamma) = 0 \} \quad (2.27)$$

Die Minimierenden von (2.27) heißen *HF-Grundzustände bei unendlicher Kopplung*.

Im nachfolgenden Theorem geht es um eine Erweiterung des Nagaoka-Theorems (siehe Unterkapitel 2.1) bezüglich der Füllung N . Bei dieser Erweiterung *bleibt die Kopplung u jedoch unendlich*.

Theorem 2.3. (*Ferromagnetismus bei unendlicher Kopplung u für das HF-Hubbardmodell [BLS 94]*)
Für alle $0 \leq N \leq |\Lambda|$ gilt Folgendes:

$$E_{hf}^{u=\infty}(N, |\Lambda|) = E_{\text{ferro}}(N, |\Lambda|) \quad (2.28)$$

Hierbei sind $E_{hf}^{u=\infty}(N, |\Lambda|)$ und $E_{\text{ferro}}(N, |\Lambda|)$ durch die Definition 2.7 bzw. durch $\sum_{i=1}^N e_i(t)$ gegeben (siehe Definition 2.2).

Eine Familie von Minimierenden γ_* , die den (gesättigten) ferromagnetischen Zuständen entspricht, ist gegeben durch:

$$\gamma_* = \omega \begin{pmatrix} \chi_N(t) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \omega^\dagger$$

wobei ω eine beliebige $SU(2)$ -Matrix und $\chi_N(t)$ die Spektralprojektion auf die Eigenvektoren zu den Eigenwerten $e_1 \leq e_2 \leq \dots \leq e_N$ sind.

Ein Kriterium (bestimmte “Connectivity condition“) dafür, dass alle HF-Grundzustände durch diese Familie gegeben sind, befindet sich in [BLS 94].

Die Gleichung (2.28) enthält genau die erste Aussage des Nagaoka-Satzes ($E_{gs}^{u=\infty}(N = |\Lambda| - 1, |\Lambda|) = E_{\text{ferro}}(N = |\Lambda| - 1, |\Lambda|)$). Genauer besagt die Gleichung (2.28), dass in der HF-Approximation diese Aussage des Nagaoka-Theorems nicht nur für $N = |\Lambda| - 1$, sondern auch für alle $N \leq |\Lambda|$ gilt.

In dieser Arbeit beschäftigen wir uns mit der Erweiterung des Nagaoka-Theorems für endliche, aber hinreichend große Kopplung u und kleine Füllung ($N \ll |\Lambda|$).

Beenden wir dieses Unterkapitel mit einer Beweisskizze des Theorems 2.3.

Beweisskizze des Theorems 2.3:

Jedes $\gamma \in K(N, 2|\Lambda|)$ lässt sich durch $f_i, g_i \in \mathbb{C}^{|\Lambda|}$, $i = 1, \dots, N$ folgendermaßen ausdrücken:

$$\gamma = \sum_i^N \left| \begin{pmatrix} f_i \\ g_i \end{pmatrix} \right\rangle \left\langle \begin{pmatrix} f_i \\ g_i \end{pmatrix} \right| \quad (2.29)$$

wobei $0 \leq \langle f_i | f_j \rangle + \langle g_i | g_j \rangle \leq \delta_{ij}$. Weiterhin definiert man $\gamma' \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|})$ für jedes $\gamma \in K(N, 2|\Lambda|)$ folgendermaßen:

$$\gamma' := F + G \quad (2.30)$$

wobei $F = \sum_i |f_i\rangle \langle f_i|$, $G = \sum_i |g_i\rangle \langle g_i|$.

Offensichtlich gilt nach (2.29) und (2.30) Folgendes:

$$\text{Tr}_{2\Lambda}\{\gamma\} = \text{Tr}_\Lambda\{\gamma'\} = N \quad (2.31)$$

Analog gilt Folgendes für die Hüpfenergie von γ :

$$T(\gamma) := \text{Tr}_{2\Lambda}\{(t \oplus t)\gamma\} = \text{Tr}_\Lambda\{t\gamma'\} \quad (2.32)$$

Andererseits lässt sich die Wechselwirkungsenergie von γ ($W(\gamma) = \sum_{x \in \Lambda} W_x(\gamma)$ siehe (2.26)) bezüglich f_i und g_i folgendermaßen ausdrücken:

$$W_x(\gamma) = W_x(f_i, g_i) = \left(\sum_i |f_i(x)|^2 \right) \left(\sum_i |g_i(x)|^2 \right) - \left| \sum_i \overline{f_i(x)} g_i(x) \right|^2 \quad (2.33)$$

Im Prinzip ist schon $0 \leq \gamma' \leq 2 \cdot \mathbf{1}$ und die Methode von [BLS 94] besteht wesentlich darin, Folgendes zu zeigen:

$$\begin{aligned} W(\gamma) = 0 \quad (\text{entspricht } u = \infty) &\stackrel{(2.33)}{\implies} g_i = A f_i \quad \text{mit einem normalen Operator } A \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|}) \\ &\implies (\gamma')^2 \leq \gamma' \implies \mathbf{0} \leq \gamma' \leq \mathbf{1} \end{aligned} \quad (2.34)$$

Nun sind wir in der Lage den Beweis des Theorems 2.3 zu schließen, nämlich:

$$\begin{aligned} E_{\text{ferro}}(N, |\Lambda|) &\geq E_{hf}^{u=\infty}(N, |\Lambda|) \quad (\text{da } \gamma_{\text{ferro}} \oplus \mathbf{0} \text{ eine Probezustände mit } W(\gamma_{\text{ferro}} \oplus \mathbf{0}) = 0 \text{ ist.}) \\ &:= \min\{\text{Tr}\{(t \oplus t)\gamma\} \mid \gamma \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|} \oplus \mathbb{C}^{|\Lambda|}); \mathbf{0} \leq \gamma \leq \mathbf{1}; \text{Tr}\{\gamma\} = N; W(\gamma) = 0\} \\ &= \text{Tr}\{(t \oplus t)\gamma_*\} \quad \begin{array}{l} \text{für ein gewisses } \gamma_* \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|} \oplus \mathbb{C}^{|\Lambda|}) \\ \text{mit } \mathbf{0} \leq \gamma_* \leq \mathbf{1}, \text{Tr}\{\gamma_*\} = N \text{ und } W(\gamma_*) = 0 \end{array} \\ &= \text{Tr}\{t\gamma'_*\} \quad \begin{array}{l} \text{dieses wegen (2.32) und weiterhin mit } \mathbf{0} \leq \gamma'_* \leq \mathbf{1} \text{ nach (2.34)} \\ \text{und } \text{Tr}\{\gamma'_*\} = \text{Tr}\{\gamma_*\} = N \text{ nach (2.31)} \end{array} \\ &\geq \min\{\text{Tr}\{t\eta\} \mid \mathbf{0} \leq \eta \leq \mathbf{1}; \text{Tr}\{\eta\} = N\} \\ &= \sum_{j=1}^N e_j(t) =: E_{\text{ferro}}(N, |\Lambda|) \end{aligned}$$

Also gilt $E_{hf}^{u=\infty}(N, |\Lambda|) = E_{\text{ferro}}(N, |\Lambda|)$.

□

2.4 Das Großkanonische Ensemble

Betrachtet man das Hubbardmodell mit variabler Anzahl von Elektronen (Großkanonisches Ensemble)¹¹, lautet sein Hamiltonoperator:

$$\widehat{H}(u, \mu) = - \sum_{\substack{\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\} \\ x, y \in \Lambda: \\ |x-y|=1}} c_{x\sigma}^\dagger c_{y\sigma} + u \sum_{x \in \Lambda} n_{x\uparrow} n_{x\downarrow} - \tilde{\mu} \sum_{x \in \Lambda} n_{x\uparrow} + n_{x\downarrow} \quad (2.35)$$

Dieser Hamiltonoperator wirkt nun auf den Fockraum $\mathcal{F}(\mathcal{H}) := \bigoplus_{N=0}^{\dim \mathcal{H}=2|\Lambda|} \mathcal{H}^{(N)}$ zu dem Ein-Teilchen-Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathbb{C}^{|\Lambda|} \oplus \mathbb{C}^{|\Lambda|}$ und der zusätzliche Parameter $\tilde{\mu} \in \mathbb{R}$ (*Chemisches Potential*) kontrolliert die Anzahl von Elektronen, die im Gitter $\Lambda = (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ bleiben.

Das HF-Energiefunktional

$$\mathcal{E}_{hf}^{u, \mu}(\Phi) := \langle \Phi | \widehat{H}(u, \mu) \Phi \rangle \quad (2.36)$$

wirkt nun auf die Slaterdeterminanten ohne feste Anzahl N von Faktoren in antisymmetrischem Produkt (vergleiche (2.12)):

$$SD := \{ \varphi_1 \wedge \cdots \wedge \varphi_N = \Phi \in \mathcal{H}^{(N)} \mid \{\varphi_i\}_{i=1}^N \subset \mathcal{H} \text{ mit } \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij} \text{ und } N \leq 2|\Lambda| \} \quad (2.37)$$

Kurz erklärt: Die Menge $SD \subset \mathcal{F}(\mathcal{H}) := \bigoplus_{N=0}^{2|\Lambda|} \mathcal{H}^{(N)}$ besteht aus allen normierten Vektoren Φ , die sich als antisymmetrisierte Tensorprodukte von maximal $2|\Lambda|$ zueinander orthonormalen Vektoren φ aus $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)}$ darstellen lassen, nämlich:

$$\Phi \equiv \varphi_1 \wedge \cdots \wedge \varphi_N := \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in S_N} (-1)^\pi \varphi_{\pi(1)} \otimes \cdots \otimes \varphi_{\pi(N)}, \quad 0 \leq N \leq 2|\Lambda| \quad (2.38)$$

Nun wird das HF-Energiefunktional in der Schreibweise von Einteilchendichtematrizen $\gamma \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|} \otimes \mathbb{C}^2)$ im Großkanonischen Ensemble leicht verändert und lautet (vgl. (2.20) und (2.21)):

$$\mathcal{E}_{hf}^{u, \mu}(\gamma) = T_\mu(\gamma) + u \cdot W(\gamma) \quad (2.39)$$

Weiterhin wirkt dieses Funktional nun auf die Menge der Einteilchendichtematrizen ohne feste Spur (vgl. Definition (2.23)), nämlich:

$$K(2|\Lambda|) := \{ \gamma \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|} \oplus \mathbb{C}^{|\Lambda|}) \mid \mathbf{0}_{2\Lambda} \leq \gamma \leq \mathbf{1}_{2\Lambda} \}. \quad (2.40)$$

Hierbei sind $\mu := \tilde{\mu} + 2d$ festgelegt und $T_\mu(\gamma)$ und $W(\gamma)$ folgendermaßen definiert:

$$T_\mu(\gamma) := \text{Tr}_{2\Lambda} \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1}_\Lambda \oplus -\Delta - \mu \mathbf{1}_\Lambda) \gamma \} = \text{Tr}_\Lambda \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1}) \gamma_\uparrow \} + \text{Tr}_\Lambda \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1}) \gamma_\downarrow \} \quad (2.41)$$

bzw.

$$W(\gamma) \stackrel{(2.26)}{:=} \sum_{x \in \Lambda} \rho_\gamma(x)^2 - \|\vec{s}_\gamma(x)\|^2 \stackrel{\text{(leicht zu zeigen)}}{=} \sum_{x \in \Lambda} \langle x \uparrow | \gamma x \uparrow \rangle \langle x \downarrow | \gamma x \downarrow \rangle - |\langle x \uparrow | \gamma x \downarrow \rangle|^2 \quad (2.42)$$

¹¹D. h. das System steht im Elektronenaustausch mit der Umgebung.

Hierbei ist

$$-\Delta = -\Delta_\Lambda := 2d\mathbf{1}_\Lambda - t_\Lambda = 2d\mathbf{1}_\Lambda - \sum_{\substack{x,y \in \Lambda \\ |x-y|=1}} |x\rangle\langle y| \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|}) \quad (\text{Diskreter Laplace-Operator}) \quad (2.43)$$

Im Gegensatz zu t besitzt der Operator $-\Delta$ den Vorteil, positiv zu sein, genauer: Sein Spektrum befindet sich auf dem Intervall $[0, 4d]$.

Auch für das Großkanonische Ensemble gilt das Theorem 2.3 aus [BLS 94] (Ferromagnetismus bei unendlicher Kopplung für das HF-Hubbardmodell), da sich alle seine Beweisschritte unmittelbar auf den Fall des Großkanonischen Ensembles übertragen lassen. Nämlich lautet die großkanonische Version des Theorems 2.3:

Theorem 2.4. (*Ferromagnetismus bei unendlicher Kopplung u für das HF-Hubbardmodell im Großkanonischen Ensemble [BLS 94]*)

Seien $e_1 \leq e_2 \leq \dots < 0$ und $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ die negativen Eigenwerte von $-\Delta - \mu$ bzw. ihre dazugehörigen Eigenvektoren, dann gilt Folgendes:

1.

$$E_{hf}^{u=\infty}(\mu, |\Lambda|) = E_{\text{ferro}}(\mu, |\Lambda|)$$

wobei

$$E_{hf}^{u=\infty}(\mu, |\Lambda|) := \min_{\substack{\gamma \in K(2|\Lambda|): \\ W(\gamma)=0}} \mathcal{E}_{hf}^{u,\mu}(\gamma)$$

und

$$\sum_{\substack{j=1: \\ e_i < 0}}^{|\Lambda|} e_i =: E_{\text{ferro}}(\mu, \Lambda) \quad \left(\begin{array}{l} \text{ferromagnetische Energie} \\ \text{im Großkanonischen Ensemble} \end{array} \right) \quad (\text{vgl. Definition 2.2})$$

2. Unter den Minimierenden des HF-Energiefunctionals $\mathcal{E}_{hf}^{u,\mu}(\gamma)$ auf $K(2|\Lambda|)$ befindet sich folgende Einteilchendichtematrix:

$$\gamma_{\text{ferro}} \oplus \mathbf{0} \in K(2|\Lambda|) \subset B(\mathbb{C}^{|\Lambda|} \oplus \mathbb{C}^{|\Lambda|}) \quad (\text{Ferromagnetische Einteilchendichtematrix})$$

mit

$$\gamma_{\text{ferro}} := \sum_{\substack{j=1: \\ e_i < 0}}^{|\Lambda|} |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|$$

2.5 Das in dieser Dissertation zu betrachtende Modell (Vereinfachung des HF-Funktional zum HFz-Funktional)

In dieser Dissertation betrachten wir den Hamiltonoperator im Großkanonischen Ensemble $\widehat{H}(u, \mu)$ (siehe (2.35)) und schränken das HF-Energiefunktional $\mathcal{E}_{hf}^{u, \mu}(\Phi) := \langle \Phi | \widehat{H}(u, \mu) \Phi \rangle$ mit Definitionsbereich SD (siehe (2.37)) auf folgende Teilmenge von SD ein:

$$SD_z := \left\{ \Phi = \varphi_1 \wedge \cdots \wedge \varphi_N \in SD \mid \{\varphi_i\}_{i=1}^N \subset \mathbb{C}^{|\Lambda|} \otimes \mathbb{C}^2 \text{ sind Eigenfunktionen der Matrix } \mathcal{S}_{\text{tot}}^{(z)} \right\} \quad (2.44)$$

Hierbei ist die Matrix $\mathcal{S}_{\text{tot}}^{(z)} \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|} \otimes \mathbb{C}^2)$ definiert durch:

$$\mathcal{S}_{\text{tot}}^{(z)} := \frac{1}{2} \sum_{x \in \Lambda} \mathbf{1}_x \otimes \sigma^{(z)} = \frac{1}{2} \sum_{x \in \Lambda} \mathbf{1}_x \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \mathbf{1}_\Lambda \otimes \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|} \otimes \mathbb{C}^2) \quad (2.45)$$

Das auf SD_z eingeschränkte HF-Energiefunktional $\mathcal{E}_{hf}^{u, \mu}(\Phi) = \langle \Phi | \widehat{H}(u, \mu) \Phi \rangle$ wird HFz-Energiefunktional genannt.

Physikalisch lässt sich diese Einschränkung von SD auf SD_z für das HF-Energiefunktional durch folgende Behauptung interpretieren:

Behauptung 2.1. *Ist $\Phi = \varphi_1 \wedge \cdots \wedge \varphi_N$ ein Vektor von SD_z , dann gilt Folgendes:*

1. *Seine dazugehörige Einteilchendichtematrix $\gamma_\Phi := \sum_{i=1}^N |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|} \otimes \mathbb{C}^2)$ hat außerhalb der Diagonale verschwindende Matrixelemente, wenn man γ_Φ als eine 2×2 Matrix ansieht, nämlich:*

$$\langle x \sigma | \gamma_\Phi | y \tau \rangle = 0, \quad \text{es sei denn } \sigma = \tau. \quad (2.46)$$

2. *Sein Spinoperator-Erwartungswert an einer Stelle $x \in \Lambda$ ist immer parallel zur z -Richtung, nämlich:*

$$\langle \vec{S} \rangle_\Phi(x) := \left(\langle \Phi | \hat{S}_x^{(x)} \Phi \rangle, \langle \Phi | \hat{S}_x^{(y)} \Phi \rangle, \langle \Phi | \hat{S}_x^{(z)} \Phi \rangle \right) = \left(0, 0, \langle \Phi | \hat{S}_x^{(z)} \Phi \rangle \right) \quad (2.47)$$

wobei $\hat{S}_x^{(\alpha)} \in B(\mathcal{F}(\mathcal{H}))$ mit $\alpha = x, y, z$ in (2.1) definiert sind.

Anschaulich gemacht bedeutet (2.47) Folgendes:

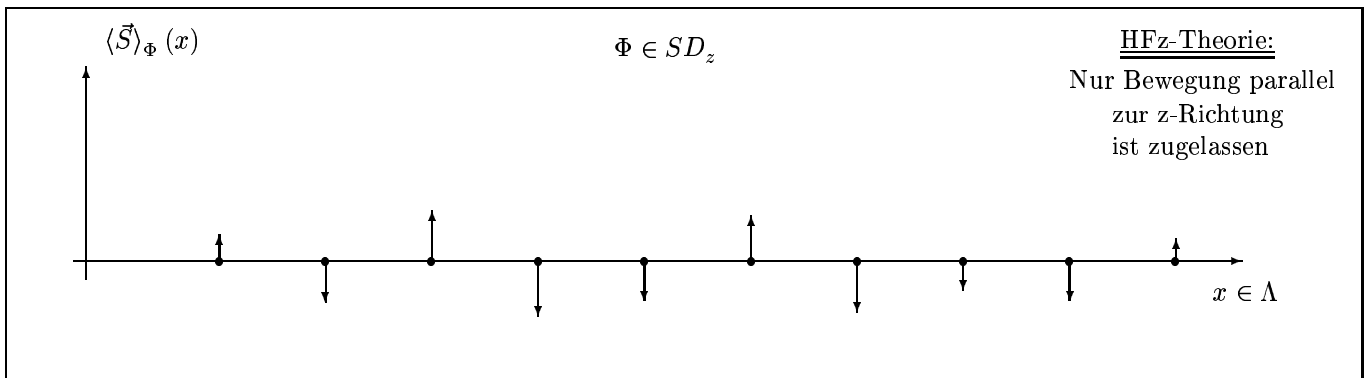
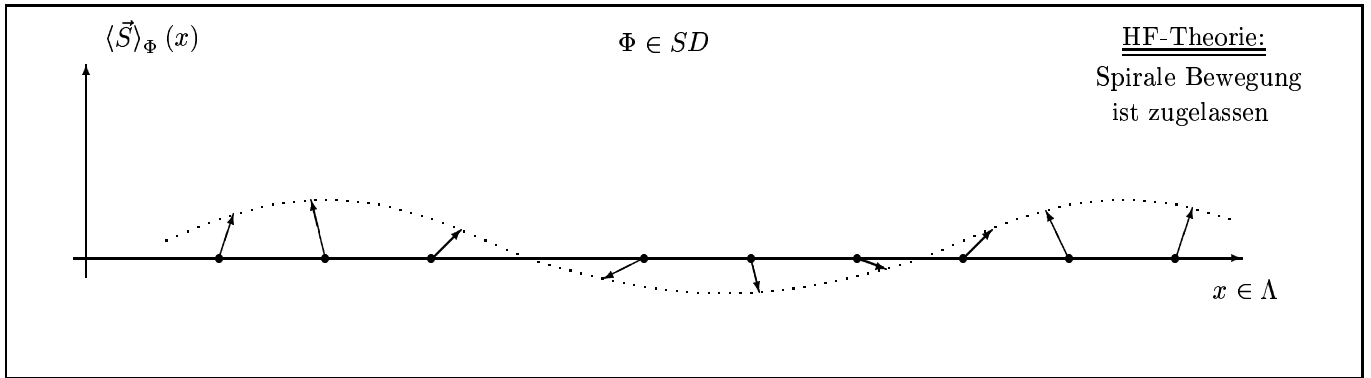


Abb.: Physikalische Interpretation für die HFz-Theorie

Zwei direkte Konsequenzen aus (2.46) sind:

1. Die dazugehörigen Einteilchendichtematrizen aus SD_z bilden nun folgende Teilmenge von $K(2|\Lambda|)$ (siehe (2.40)):

$$\mathbf{K} := \{ \gamma \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|} \oplus \mathbb{C}^{|\Lambda|}) \mid \mathbf{0}_{2\Lambda} \leq \gamma \leq \mathbf{1}_{2\Lambda} \text{ und } \gamma = \begin{pmatrix} \gamma_{\uparrow} & \mathbf{0}_{\Lambda} \\ \mathbf{0}_{\Lambda} & \gamma_{\downarrow} \end{pmatrix} \} \quad (2.48)$$

Ferner gilt für die Menge \mathbf{K} Folgendes:

$$\mathbf{K} = K(\Lambda) \times K(\Lambda) \quad \text{mit} \quad K(\Lambda) := \{ \xi \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|}) \mid \mathbf{0}_{\Lambda} \leq \xi \leq \mathbf{1}_{\Lambda} \}, \quad (2.49)$$

Der Grund für diese Zerlegung von \mathbf{K} in $K(\Lambda) \times K(\Lambda)$ ist Folgendes:

$\gamma = (\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow})$ erfüllt $\mathbf{0}_{2\Lambda} \leq \gamma = \begin{pmatrix} \gamma_{\uparrow} & \mathbf{0}_{\Lambda} \\ \mathbf{0}_{\Lambda} & \gamma_{\downarrow} \end{pmatrix} \leq \mathbf{1}_{2\Lambda}$ genau dann, wenn γ_{\uparrow} und γ_{\downarrow} $\mathbf{0}_{\Lambda} \leq \gamma_{\uparrow} \leq \mathbf{1}_{\Lambda}$ und $\mathbf{0}_{\Lambda} \leq \gamma_{\downarrow} \leq \mathbf{1}_{\Lambda}$ erfüllen.

2. Auf dieser Menge \mathbf{K} wird das HF-Energiefunktional $\mathcal{E}_{hf}^{u,\mu} = T_{\mu}(\gamma) + W(\gamma)$ (siehe (2.39)) folgendermaßen vereinfacht:

2.1 Der nichtlineare Teil $W(\gamma)$ in (2.42) wird nun auf \mathbf{K} vereinfacht¹², nämlich:

$$W(\gamma) = \langle x \uparrow \mid \gamma x \uparrow \rangle \langle x \downarrow \mid \gamma x \downarrow \rangle \quad (2.50)$$

2.2 Der lineare Teil $T_{\mu}(\gamma)$ in (2.41) bleibt auf \mathbf{K} erhalten.

D.h. in dieser Dissertation betrachten wir folgendes Energiefunktional mit folgender konvexen Menge (1-pdm) als Definitionsbereich:

HFz-Hubbardmodell:

$$\mathcal{E}_{hfz}^{u,\mu}((\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow})) = \text{Tr}_{\Lambda}\{(-\Delta - \mu\mathbf{1})\gamma_{\uparrow}\} + \text{Tr}_{\Lambda}\{(-\Delta - \mu\mathbf{1})\gamma_{\downarrow}\} + \sum_{x \in \Lambda} \langle x \mid \gamma_{\uparrow} x \rangle \langle x \mid \gamma_{\downarrow} x \rangle, \quad (2.51)$$

mit

$$(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow}) \in \mathbf{K} = K(\Lambda) \times K(\Lambda) \quad \text{wobei} \quad K(\Lambda) := \{ \xi \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|}) \mid \mathbf{0}_{\Lambda} \leq \xi \leq \mathbf{1}_{\Lambda} \}.$$

und wie immer ist das Gitter $\Lambda := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ mit $L, d \in \mathbb{N}$.

¹²In der Tat kann man leicht zeigen, dass

$$W(\gamma_{\Phi}) := \sum_{x \in \Lambda} \rho_{\gamma_{\Phi}}^2(x) - \left\| \vec{s}_{\gamma_{\Phi}}(x) \right\|^2 \stackrel{(\bullet)}{=} \sum_{x \in \Lambda} \rho_{\gamma_{\Phi}}^2(x) - \left(s_{\gamma_{\Phi}}^{(z)}(x) \right)^2 = \sum_{x \in \Lambda} \langle x \uparrow \mid \gamma_{\Phi} x \uparrow \rangle \langle x \downarrow \mid \gamma_{\Phi} x \downarrow \rangle \text{ gilt, wenn } \Phi \in SD_z.$$

Die Tatsache, dass nur die z -Komponente der Spindichte in (\bullet) übrig bleibt, begründet weiterhin den Namen HFz-Hubbardmodell.

Auch für das HFz-Hubbardmodell haben wir als Konsequenz des Theorems 2.4 aus [BLS 94] Ferromagnetismus bei unendlicher Kopplung, nämlich:

Korollar 2.1. (*Ferromagnetismus bei unendlicher Kopplung u für das HFz-Hubbardmodell, [BLS 94]*)

Seien $e_1 \leq e_2 \leq \dots < 0$ und $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ die negativen Eigenwerte von $-\Delta - \mu$ bzw. ihre dazugehörigen Eigenvektoren, dann gilt Folgendes:

1.

$$E_{hfz}^{u=\infty}(\mu, |\Lambda|) = E_{\text{ferro}}(\mu, |\Lambda|) \quad (2.52)$$

wobei

$$E_{hfz}^{u=\infty}(\mu, |\Lambda|) := \min_{\substack{(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow}) \in K(\Lambda) \times K(\Lambda): \\ W(\gamma) = 0}} \mathcal{E}_{hfz}^{u, \mu}(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow})$$

und

$$\sum_{\substack{j=1: \\ e_i < 0}}^{|\Lambda|} e_i =: E_{\text{ferro}}(\mu, \Lambda) \quad \left(\begin{array}{l} \text{ferromagnetische Energie} \\ \text{im Großkanonischen Ensemble} \end{array} \right) \quad (\text{vgl. Definition 2.2})$$

2. Unter den Minimierenden des HFz-Energiefunktionals $\mathcal{E}_{hfz}^{u, \mu}(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow})$ auf $K(\Lambda) \times K(\Lambda)$ befindet sich folgende Einteilchendichtematrix:

$$(\gamma_{\text{ferro}}, \mathbf{0}) \in K(\Lambda) \times K(\Lambda) \subset B(\mathbb{C}^{|\Lambda|} \oplus \mathbb{C}^{|\Lambda|}) \quad (\text{Ferromagnetische Einteilchendichtematrix})$$

mit

$$\gamma_{\text{ferro}} := \sum_{\substack{j=1: \\ e_i < 0}}^{|\Lambda|} |\varphi_j\rangle \langle \varphi_j|$$

2.6 Ziel dieser Dissertation

Das von uns in dieser Dissertation angestrebte Ziel ist es zu zeigen, dass nach dem HFz-Hubbardmodell Ferromagnetismus (siehe Definition 2.3) entsteht, wenn die Kopplung u hinreichend groß, aber **endlich** ist. Nämlich:

Seien $0 < \mu < 1$ und $d \in \mathbb{N}$ fest, dann werden wir in dieser Arbeit Folgendes zeigen:

1. Es existieren eine endliche Kopplung $u_{cr}(\mu, d)$ und eine endliche Kantenlänge $L_{cr}(\mu, d)$ des Gitters Λ , so dass

$$E_{hfz}^u(\mu) = E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) \quad \text{für alle } u > u_{cr}(\mu, d) \quad \text{und} \quad \text{für alle } L > L_{cr}(\mu, d) \quad (2.53)$$

gilt. Hierbei ist $E_{hfz}^u(\mu)$ der Minimumwert des HFz-Energiefunktional $\mathcal{E}_{hfz}^{u,\mu}(\Phi)$ mit $\Phi \in SD_z$.

D.h. die Gleichung (2.52) besteht fort, wenn die Kopplung u hinreichend groß, aber **endlich** ist.

Insbesondere beweist dies, dass der HF-Zustand

$$\Phi_{\text{ferro}} := \varphi_{1,\uparrow} \wedge \cdots \wedge \varphi_{N,\uparrow} \quad \text{wobei} \quad \begin{array}{l} \varphi_{j,\uparrow} \equiv \varphi_j \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{|\Lambda|} \otimes \mathbb{C}^2 \\ \text{und } \{\varphi_j\}_{j=1}^N \text{ Eigenvektoren zu den} \\ \text{negativen Eigenwerten von } -\Delta - \mu \end{array}$$

sich unter den Minimierenden dieses Energiefunktional befindet, wenn $u > u_{cr}(\mu, d)$ und $L > L_{cr}(\mu, d)$.

Dies zeigt physikalisch, dass der Ferromagnetismus im schwachen Sinn (siehe Definitionen 2.4 und 2.3) in einem HFz-Hubbardmodell mit $L > L_{cr}(\mu, d)$ für $u > u_{cr}(\mu, d)$ entsteht.

2. Weiterhin sollte Folgendes gezeigt werden: Die einzigen Minimierenden (ξ_*, η_*) von $\mathcal{E}_{hfz}^{u,\mu}$ auf $\mathbf{K} = K(\Lambda) \times K(\Lambda)$ sind im Fall $u > u_{cr}(\mu, d)$ und $L > L_{cr}(\mu, d)$

$$\text{entweder } (\xi_*, \eta_*) = (\xi_* \in \Gamma_{\text{ferro}}, \mathbf{0}) \quad \text{oder} \quad (\xi_*, \eta_*) = (\mathbf{0}, \eta_* \in \Gamma_{\text{ferro}}). \quad (2.54)$$

Hierbei ist $(\Gamma_{\text{ferro}}, \mathbf{0}) \subset K(\Lambda) \times K(\Lambda)$ die Menge aller vollpolarisierten Einteilchendichtematrizen mit kleinster Energie, die in diesem Fall die ferromagnetische Energie $E_{\text{ferro}}(\mu, d)$ ist, nämlich:

$$\min_{(\xi, \mathbf{0}) \in \mathbf{K}} \mathcal{E}^{u,\mu}(\xi, \mathbf{0}) = \min_{\xi \in K(\Lambda)} \text{Tr}\{(-\Delta - \mu)\xi\} =: E_{\text{ferro}}(\mu, d)$$

Die Bedingung (2.54) entspricht der Eindeutigkeit (bis auf die Spinrotationssymmetrie (siehe Unterkapitel 2.1)) des HF-Grundzustandes Φ_{ferro} .

Nach den obigen Punkten 1 und 2 und nach Bemerkung 2.1 folgt, dass Ferromagnetismus (im starken Sinn, siehe Definition 2.3) im HFz-Hubbardmodell für hinreichend große, aber endliche Kopplung u entsteht.

Im Kapitel 3 werden die Punkte 1 und 2 bewiesen (siehe Theorem 3.1).

Bemerkung 2.3. Eine ähnliche Vereinfachung von HF zum HFz , d.h. nur die Komponente z zu betrachten, befindet sich z.B. in folgendem Hamiltonoperator aus dem aktuellen Artikel [FU 04], nämlich:

Im "2-band Hund-Hubbard-Hamiltonoperator"

$$\begin{aligned} \hat{H}_\Lambda^{HH} := & \sum_{a=1,2} t_a \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\substack{x,y \in \Lambda \\ |x-y|=1}} c_{a\sigma}^\dagger(x) c_{a\sigma}(y) + \sum_{a=1,2} U_a \sum_{x \in \Lambda} n_{a\uparrow}(x) n_{a\downarrow}(x) \\ & + U_{12} \sum_{x \in \Lambda} n_1(x) n_2(x) - J \sum_{x \in \Lambda} \mathbf{S}(x) \cdot \mathbf{S}_2(x) \end{aligned}$$

wird der Term $\mathbf{S}_1(x) \cdot \mathbf{S}_2(x)$ durch $S_1^{(3)}(x) \cdot S_2^{(3)}$ ersetzt. Für Details über diesen Hamiltonoperator siehe [FU 04].

2.7 Übrige Beweise dieses Kapitels: Beweis der Behauptung 2.1 und Korollar 2.1

Beweis der Behauptung 2.1:

Zu 1. :

Es ist leicht zu sehen, dass das Spektrum der Matrix $\mathcal{S}_{\text{tot}}^{(z)} \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|} \otimes \mathbb{C}^2)$ (siehe (2.45)) besteht nur aus zwei Punkten, nämlich $1/2$ und $-1/2$. Daher gibt es zwei Klassen von Eigenvektoren $\varphi \in \mathbb{C}^{|\Lambda|} \otimes \mathbb{C}^2$, nämlich:

Ist $\varphi \in \mathbb{C}^{|\Lambda|} \otimes \mathbb{C}^2$ ein Eigenvektor der Matrix $\mathcal{S}_{\text{tot}}^{(z)}$, dann erfüllt φ

(i) entweder

$$\mathcal{S}_{\text{tot}}^{(z)}\varphi = \frac{1}{2}\varphi \implies \varphi(x, \downarrow) = 0 \quad \text{für alle } x \in \Lambda \quad (2.55)$$

(ii) oder

$$\mathcal{S}_{\text{tot}}^{(z)}\varphi = -\frac{1}{2}\varphi \implies \varphi(x, \uparrow) = 0 \quad \text{für alle } x \in \Lambda. \quad (2.56)$$

Die Implikationen (2.55) und (2.56) sind leichter zu verstehen, wenn man $\mathcal{S}_{\text{tot}}^{(z)}$ als $\mathbf{1}_\Lambda \otimes \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}$ ansieht.

Um den Punkt 1 zu beweisen, reicht es zu zeigen, dass sowohl im Fall (i) als auch im Fall (ii) $\langle x\sigma | \gamma_\Phi y\tau \rangle = 0$ gilt, wenn $\sigma \neq \tau$.

In der Tat

$$\langle x\sigma | \gamma_\Phi y\tau \rangle = \langle x\sigma | \left(\sum_{j=1}^N |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j| \right) | y\tau \rangle = \sum_{j=1}^N \langle x\sigma | \varphi_j\rangle\langle\varphi_j | y\tau \rangle = \sum_{j=1}^N \varphi_j(x, \sigma) \bar{\varphi}_j(y, \tau)$$

Also gilt

$$\langle x\sigma | \gamma_\Phi y\tau \rangle = \sum_{j=1}^N \varphi_j(x, \sigma) \bar{\varphi}_j(y, \tau) \quad (2.57)$$

Ist $\Phi \in SD_z$, dann gilt nach (2.55) und (2.56), dass es für jedes $j = 1, \dots, N$ entweder

(i)

$$\varphi_j(x, \sigma) \bar{\varphi}_j(y, \tau) = \delta_{\{\sigma=\uparrow\}} \varphi_j(x, \sigma) \bar{\varphi}_j(y, \tau) \delta_{\{\tau=\uparrow\}}$$

oder

(ii)

$$\varphi_j(x, \sigma) \bar{\varphi}_j(y, \tau) = \delta_{\{\sigma=\downarrow\}} \varphi_j(x, \sigma) \bar{\varphi}_j(y, \tau) \delta_{\{\tau=\downarrow\}}$$

zutrifft.

D. h. für alle $j = 1, \dots, N$ und für sowohl den Fall (i) als auch den Fall (ii) gilt $\varphi_j(x, \sigma) \bar{\varphi}_j(y, \tau) = 0$, wenn $\sigma \neq \tau$. Daher folgt nach (2.57), dass $\langle x\sigma | \gamma_\Phi y\tau \rangle = 0$, wenn $\sigma \neq \tau$. Dies beweist (2.46).

Zu dem Punkt 2. :

Ist $\Phi \in SD_z$, dann gilt Folgendes:

$$\begin{aligned}
\langle \vec{S} \rangle_{\Phi}(x) &:= \left(\langle \Phi | \hat{S}_x^{(x)} \Phi \rangle, \langle \Phi | \hat{S}_x^{(y)} \Phi \rangle, \langle \Phi | \hat{S}_x^{(z)} \Phi \rangle \right) \\
&= \left(\frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \left(\mathbf{1}_x \otimes \sigma^{(x)} \right) \gamma_{\Phi} \right\}, \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \left(\mathbf{1}_x \otimes \sigma^{(y)} \right) \gamma_{\Phi} \right\}, \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \left(\mathbf{1}_x \otimes \sigma^{(z)} \right) \gamma_{\Phi} \right\} \right) \quad \left(\text{nach Proposition 2.6 Punkt 4} \right) \\
&= \left(\frac{1}{2} \langle x \uparrow | \gamma_{\Phi} x \downarrow \rangle + \frac{1}{2} \langle x \downarrow | \gamma_{\Phi} x \uparrow \rangle, \frac{i}{2} \langle x \uparrow | \gamma_{\Phi} x \downarrow \rangle - \frac{i}{2} \langle x \downarrow | \gamma_{\Phi} x \uparrow \rangle, \frac{1}{2} \langle x \uparrow | \gamma_{\Phi} x \uparrow \rangle - \frac{1}{2} \langle x \downarrow | \gamma_{\Phi} x \downarrow \rangle \right) \\
&= \left(0, 0, \frac{1}{2} \langle x \uparrow | \gamma_{\Phi} x \uparrow \rangle - \frac{1}{2} \langle x \downarrow | \gamma_{\Phi} x \downarrow \rangle \right) \quad \text{nach (2.46)} \\
&= \left(0, 0, \langle \Phi | \hat{S}_x^{(z)} \Phi \rangle \right) \quad \left(\text{nach Proposition 2.6 Punkt 4} \right)
\end{aligned}$$

□

Beweis des Korollars 2.1:

Da $(\mathbf{1}_{[-\Delta - \mu \mathbf{1} < 0]}, \mathbf{0}) \in K(\Lambda) \times K(\Lambda)$ ist, gilt

$$\begin{aligned}
E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) &= \text{Tr}_{\Lambda} \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1}) \mathbf{1}_{[-\Delta - \mu \mathbf{1} < 0]} \} = \mathcal{E}_{hfz}^{u, \mu}(\mathbf{1}_{[-\Delta - \mu \mathbf{1} < 0]}, \mathbf{0}) \quad \text{für alle } u \geq 0 \\
&\geq \min_{\mathbf{0} \leq \gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow} \leq \mathbf{1}} \mathcal{E}_{hfz}^{u, \mu}(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow}) \quad \text{für alle } u \geq 0
\end{aligned} \tag{2.58}$$

Nach der Tatsache

$$\mathcal{E}_{hfz}^{u, \mu}(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow}) = \mathcal{E}_{hf}^{u, \mu}(\gamma_{\uparrow} \oplus \gamma_{\downarrow}) \quad \text{für alle } \mathbf{0}_{\Lambda} \leq \gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow} \leq \mathbf{1}_{\Lambda}$$

gilt andererseits, dass

$$\min_{\mathbf{0}_{\Lambda} \leq \gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow} \leq \mathbf{1}_{\Lambda}} \mathcal{E}_{hfz}^{u, \mu}(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow}) \geq \min_{\mathbf{0}_{2\Lambda} \leq \gamma \leq \mathbf{1}_{2\Lambda}} \mathcal{E}_{hf}^{u, \mu}(\gamma) \quad \text{für alle } u \geq 0 \tag{2.59}$$

Nach (2.58) und (2.59) folgt:

$$E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) \geq \min_{\mathbf{0}_{\Lambda} \leq \gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow} \leq \mathbf{1}_{\Lambda}} \mathcal{E}_{hfz}^{u, \mu}(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow}) \geq \min_{\mathbf{0}_{2\Lambda} \leq \gamma \leq \mathbf{1}_{2\Lambda}} \mathcal{E}_{hf}^{u, \mu}(\gamma) \quad \text{für alle } u \geq 0 \tag{2.60}$$

daher

$$E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) \geq \lim_{u \rightarrow \infty} \left\{ \min_{\mathbf{0}_{\Lambda} \leq \gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow} \leq \mathbf{1}_{\Lambda}} \mathcal{E}_{hfz}^{u, \mu}(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow}) \right\} \geq \lim_{u \rightarrow \infty} \left\{ \min_{\mathbf{0}_{2\Lambda} \leq \gamma \leq \mathbf{1}_{2\Lambda}} \mathcal{E}_{hf}^{u, \mu}(\gamma) \right\} \tag{2.61}$$

aber nach Theorem 2.3 gilt

$$\lim_{u \rightarrow \infty} \left\{ \min_{\mathbf{0}_{2\Lambda} \leq \gamma \leq \mathbf{1}_{2\Lambda}} \mathcal{E}_{hf}^{u, \mu}(\gamma) \right\} = E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) \tag{2.62}$$

Nach (2.61) und (2.62) folgt unmittelbar, dass

$$E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) = \lim_{u \rightarrow \infty} \left\{ \min_{\mathbf{0}_{\Lambda} \leq \gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow} \leq \mathbf{1}_{\Lambda}} \mathcal{E}_{hfz}^{u, \mu}(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow}) \right\},$$

was das Korollar 2.1 beweist.

□

3 Ferromagnetismus bei endlicher Kopplung im HFz-Hubbardmodell (Hauptresultat der Dissertation)

In diesem Kapitel wird das Hauptresultat (Theorem 3.1) dieser Dissertation bewiesen.

3.1 Problemstellung

Durch das folgende Modell¹³ werden Elektronen auf einem Gitter $\Lambda = \Lambda_{L,d} := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z}^d)$, wobei $L, d \in \mathbb{N}$ unter einem chemischen Potential $\mu > 0$ beschrieben.

Definition 3.1. (das HF-Energiefunktional nur mit z -Spinkomponente oder das HFz-Energiefunktional)

$$\mathcal{E}_{L,d}^{u,\mu}(\gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow) := \text{Tr}_\Lambda\{(-\Delta - \mu\mathbf{1})\gamma_\uparrow\} + \text{Tr}_\Lambda\{(-\Delta - \mu\mathbf{1})\gamma_\downarrow\} + u \cdot \sum_{x \in \Lambda} D(\gamma_\uparrow)(x) D(\gamma_\downarrow)(x)$$

wobei

$$\gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow \in K(\Lambda) := \{ \xi \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|}) \mid \mathbf{0} \leq \xi \leq \mathbf{1} \} \quad (\text{Dichtematrizen}),$$

$$D(\gamma_\uparrow) := \sum_{x \in \Lambda} D(\gamma_\uparrow)(x) \mathbf{1}_x, \quad D(\gamma_\downarrow) := \sum_{x \in \Lambda} D(\gamma_\downarrow)(x) \mathbf{1}_x \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|}) \quad \left(\begin{array}{l} \text{Diagonalanteil} \\ \text{von } \gamma_\uparrow \text{ bzw. von } \gamma_\downarrow \end{array} \right)$$

D. h.

$$D(\gamma_\uparrow)(x) := \langle \delta_x \mid \gamma_\uparrow \delta_x \rangle, \quad D(\gamma_\downarrow)(x) := \langle \delta_x \mid \gamma_\downarrow \delta_x \rangle.$$

Weiterhin ist

$$-\Delta = - \sum_{\substack{x,y \in \Lambda: \\ |x-y|=1}} |\delta_x\rangle \langle \delta_y| + 2d\mathbf{1} = -t + 2d\mathbf{1} \quad (\text{Diskreter Laplace-Operator})$$

Definition 3.2. (HFz-Grundzustandenergie)

$$E_{L,d}^u(\mu) := \min\{ \mathcal{E}_{L,d}^{u,\mu}(\gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow) \mid \gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow \in K(\Lambda) \}$$

und unter $E_{L,d}^{u=\infty}(\mu)$ versteht man

$$E_{L,d}^{u=\infty}(\mu) := \lim_{u \rightarrow \infty} E_{L,d}^u(\mu)$$

Da $u > 0$ und $\sum_{x \in \Lambda} D(\gamma_\uparrow)(x) D(\gamma_\downarrow)(x) > 0$ für $\gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow \in K(\Lambda)$ sind, folgt, dass $E_{L,d}^u(\mu)$ monoton steigend bezüglich u ist, nämlich:

$$E_{L,d}^{u'}(\mu) \geq E_{L,d}^u(\mu) \quad \text{wenn } u' > u > 0$$

und damit ist $E_{L,d}^{u=\infty}(\mu)$ die kleinste obere Schranke an $E_{L,d}^u(\mu)$ bezüglich u . Selbstverständlich ist diese obere Schranke unabhängig von u .

Eine andere obere Schranke an $E_{L,d}^u(\mu)$, die auch von u unabhängig ist, ist gegeben durch:

¹³Physikalische Hintergründe und die Ableitung dieses Modells aus dem Standard-Hubbardmodell befinden sich im Kapitel 2.

Definition 3.3. (ferromagnetische Energie und ferromagnetische Dichtematrizen)

Die ferromagnetische Energie ist definiert durch:

$$E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) := \sum_{e_j < 0} e_j(-\Delta - \mu \mathbf{1}) \quad \left(\begin{array}{l} \text{die Summe der negativen} \\ \text{Eigenwerte von } -\Delta - \mu \mathbf{1} \end{array} \right) \quad (3.1)$$

und unter einer ferromagnetischen Dichtematrix $\mathbf{0}_\Lambda \leq \gamma_{\text{ferro}} \leq \mathbf{1}_\Lambda$ versteht man eine Minimierende des linearen Minimierungsproblems:

$$\min_{\mathbf{0}_\Lambda \leq \xi \leq \mathbf{1}_\Lambda} \mathcal{E}_{L,d}^{u,\mu}(\xi, \mathbf{0}) \equiv \min_{\mathbf{0}_\Lambda \leq \xi \leq \mathbf{1}_\Lambda} \text{Tr}_\Lambda \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1}) \xi \}, \quad (3.2)$$

dessen Minimumwert $E_{\text{ferro}}(\mu, d, L)$ ist.

Die Menge solcher Minimierenden bezeichnet man mit $\Gamma_{\text{ferro}} \subset K(\Lambda)$.

Bem.: Die Bezeichnungen „ferromagnetische Energie“ und „ferromagnetische Dichtematrizen“ sind im Unterkapitel 2.1 motiviert.

In der Tat ist $E_{\text{ferro}}(\mu, d, L)$ eine obere Schranke bezüglich u an $E_{L,d}^u(\mu)$, nämlich

$$E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) \geq E_{L,d}^u(\mu) \quad \text{für alle } u > 0, \quad (3.3)$$

da

$$\begin{aligned} E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) &:= \sum_{e_j < 0} e_j(-\Delta - \mu \mathbf{1}) = \text{Tr} \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1}) \mathbf{1}_{[-\Delta - \mu \mathbf{1} < 0]} \} \\ &= \mathcal{E}_{L,d}^{u,\mu}(\mathbf{1}_{[-\Delta - \mu \mathbf{1} < 0]}, \mathbf{0}) \\ &\geq \min_{\substack{\mathbf{0} \leq \gamma_\uparrow \leq \mathbf{1} \\ \mathbf{0} \leq \gamma_\downarrow \leq \mathbf{1}}} \mathcal{E}_{L,d}^{u,\mu}(\gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow) = E_{L,d}^u(\mu) \end{aligned}$$

D.h. (3.3) besagt nichts anderes, als dass $(\mathbf{1}_{[-\Delta - \mu \mathbf{1} < 0]}, \mathbf{0})$ ein Probezustand mit dem Energiewert $E_{\text{ferro}}(\mu, d, L)$ ist.

Da $E_{L,d}^{u=\infty}(\mu)$ die kleinste obere Schranke an $E_{L,d}^u(\mu)$ ist, gilt offensichtlich, dass

$$E_{L,d}^{u=\infty}(\mu) \leq E_{\text{ferro}}(\mu, d, L). \quad (3.4)$$

Aber andererseits ist uns folgendes Resultat bekannt:

Kontext: Bach, Lieb und Solovej [BLS 94] haben gezeigt, dass die Gleichheit¹⁴ in (3.4) tatsächlich gilt, nämlich:

Theorem ([BLS 94], Ferromagnetismus bei unendlicher Kopplung im HFz-Hubbardmodell)

Folgendes gilt im Limes $u \rightarrow \infty$:

$$E_{L,d}^{u=\infty}(\mu) = E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) \quad (3.5)$$

¹⁴Für das Standard-Hubbardmodell, d.h. nicht in der HF- oder HFz-Approximation, gilt die Gleichheit in (3.4) im Allgemeinen nicht! Nur in dem überraschenden Fall $N = |\Lambda| - 1$ ist es bekannt, dass die Gleichheit für das Standard-Hubbardmodell gilt. Dies ist die Hauptaussage des sogenannten Nagaoka-Theorems. Für Details siehe Unterkapitel 2.1.

siehe Theorem 2.3, Theorem 2.4 und Korollar 2.1 für Details über dieses bekannte Resultat aus [BLS 94].

Ziel dieser Dissertation:

Unser angestrebtes Ziel ist es zu zeigen, dass (3.5) nicht nur für $u = \infty$, sondern auch für hinreichend großes, aber **endliches** u gilt. Mit anderen Worten wollen wir zeigen, dass ein endlicher kritischer Wert $u_{cr}(d, \mu) < \infty$ existiert, so dass

$$E_{L,d}^u(\mu) = E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) \quad \text{für alle } u > u_{cr}(\mu, d) \quad (3.6)$$

gilt. Weiterhin sollte $u_{cr}(d, \mu) < \infty$ für hinreichend große, aber endliche Gitterkantenlänge L , unabhängig von L sein. Diese Unabhängigkeit von $u_{cr}(\mu, d)$ bezüglich der Gitterkantenlänge L ist von der Physik her erwartet (Thermodynamischer Limes).

3.2 Hauptresultat der Dissertation (Theorem 3.1)

Das Hauptresultat dieser Arbeit fassen wir in Form eines Theorems zusammen:

Theorem 3.1. (*Ferromagnetismus bei endlicher Kopplung im HFz-Hubbardmodell*)

Für alle $0 < \mu < 1$ und $d \in \mathbb{N}$ existiert eine **endliche** Kopplung $u_{cr}(\mu, d)$ und eine endliche Kantenlänge $L_{cr}(\mu, d)$, so dass folgende Abschätzung mit Randterm für das HFz-Energiefunktional gilt:

Für alle $\mathbf{0} \leq \gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow} \leq \mathbf{1}$ gilt

$$\mathcal{E}_{L,d}^{u,\mu}(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow}) \geq E_{\text{ferro}}(\mu, L, d) + \mathcal{F}(u, \mu, d) |\partial\Omega_{\delta_{cr}(\mu,d), \gamma_{\uparrow}}| \quad \text{mit } \mathcal{F}(u, \mu, d) > 0 \quad (3.7)$$

vorausgesetzt, $u > u_{cr}(\mu, d)$ und $L > L_{cr}(\mu, d)$.

Hierbei ist

$$\Omega_{\delta_{cr}(\mu,d), \gamma_{\uparrow}} := \{x \in \Lambda \mid \langle x | \gamma_{\uparrow} x \rangle < \delta_{cr}(\mu, d)\} \quad \text{mit } 0 < \delta_{cr}(\mu, d) \leq 1 \quad (3.8)$$

Da $E_{\text{ferro}}(\mu, L, d)$ selbst eine obere Schranke an $E_{L,d}^u(\mu)$ ist, folgen aus der Ungleichung (3.7) unmittelbar diese beiden Aussagen: Für $L > L_{cr}(\mu, d)$ gilt Folgendes:

1. Der Minimumwert des Energiefunktionals ändert sich nicht mehr, wenn die Kopplung $u > u_{cr}(\mu, d)$ ist, nämlich:

$$E_{L,d}^u(\mu) = E_{\text{ferro}}(\mu) \quad \text{für alle } u > u_{cr}(\mu, d) \text{ mit } u_{cr}(\mu, d) \text{ endlich !} \quad (3.9)$$

2. Wenn $u > u_{cr}(\mu, d)$ ist, dann gibt es nur und genau zwei Klassen von Minimierenden (ξ_*, η_*) für das HFz-Energiefunktional, nämlich:

$$\text{Entweder } (\xi_*, \eta_*) = (\xi_* \in \Gamma_{\text{ferro}}, \mathbf{0}) \quad \text{oder} \quad (\xi_*, \eta_*) = (\mathbf{0}, \eta_* \in \Gamma_{\text{ferro}}) . \quad (3.10)$$

Hierbei ist $(\Gamma_{\text{ferro}}, \mathbf{0}) \subset \mathbf{K}$ die Menge aller vollpolarisierten Matrizen (Zustände) mit kleinster Energie, die in diesem Fall die ferromagnetische Energie $E_{\text{ferro}}(\mu, d)$ ist, nämlich:

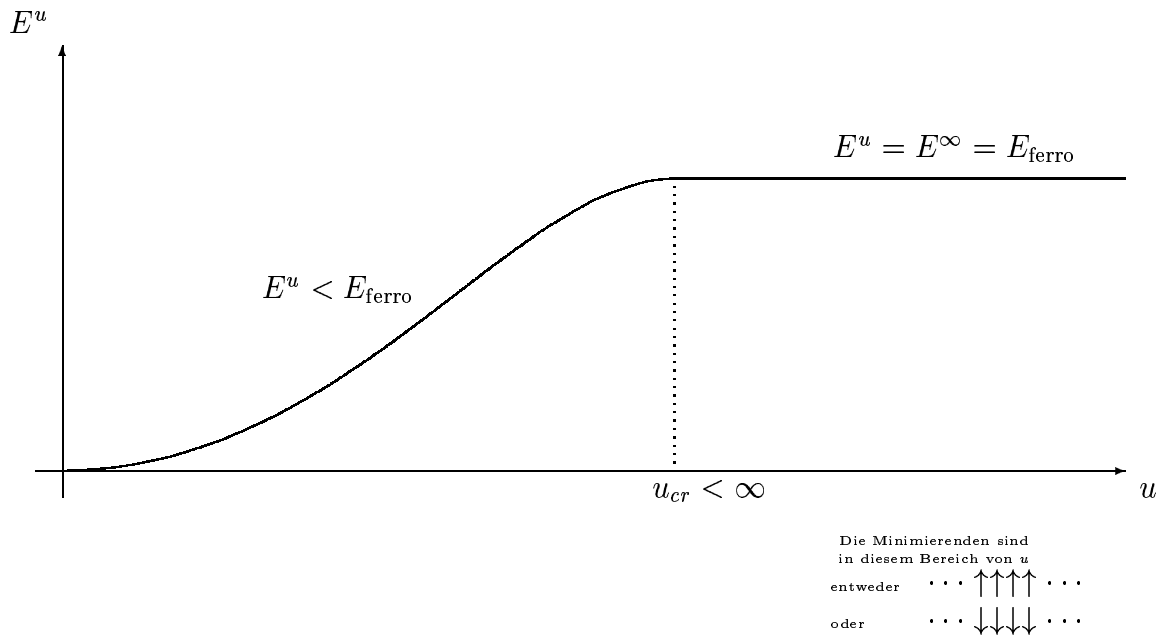
$$E_{\text{ferro}}(\mu, d) := \min_{(\xi, \mathbf{0}) \in \mathbf{K}} \mathcal{E}^{u,\mu}(\xi, \mathbf{0})$$

Die Folgerungen 1. und 2. bedeuten genau, dass Ferromagnetismus¹⁵ für große, aber endliche Kopplung entsteht.

Explizite Ausdrücke für $u_{cr}(\mu, d)$, $L_{cr}(\mu, d)$, $\delta_{cr}(\mu, d)$ und $\mathcal{F}(u, \mu, d)$ befinden sich im Unterkapitel 3.5.

¹⁵Die Definition von Ferromagnetismus befindet sich im Unterkapitel 2.1, Definition 2.3.

Graphisch versteht man dieses Theorem folgendermaßen:



Physikalische Interpretation:

Für alle $\mu \in (0, 1)$ (man befindet sich also im Fall μ kleiner als halbe Füllung!) ist die HF-Grundzustandsenergie pro Gitterplatz des Systemes im thermodynamischen Limes ($L \rightarrow \infty$) für endliche Kopplung u (hier $u_{cr}(\mu, d) < u < \infty$) schon gleich die ferromagnetische Energie pro Gitterplatz. Mathematisch ausgedrückt:

$$e^u(\mu, d) := \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{E_{\Lambda_{L,d}}^u(\mu)}{|\Lambda_{L,d}|} = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{E_{\text{ferro}}(L, d, \mu)}{|\Lambda_{L,d}|} =: e_{\text{ferro}}(\mu, d) \quad \text{für alle } u > u_{cr}(\mu, d) \quad (3.11)$$

Und die Minimierenden sind in diesem Bereich von u entweder spinaufwärts-vollpolarisiert oder spinabwärts-vollpolarisiert (Ferromagnetismus im starken Sinn, siehe Unterkapitel 2.1).

3.3 Umformung des HFz-Energiefunktional

Lemma 3.1. (*Äquivalentes Minimierungsproblem*)

Im Folgenden ist $K(\Lambda)$ die konvexe Teilmenge $\{\xi \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|}) \mid \mathbf{0} \leq \xi \leq \mathbf{1}\}$ von $B(\mathbb{C}^{|\Lambda|})$ und ist $\Lambda = \Lambda_{L,d}$ das Gitter $(\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$.

Das ursprüngliche Minimierungsproblem

$$\text{MP : } \left. \begin{array}{l} \text{Minimiere } \mathcal{E}_\Lambda^{u,\mu}(\gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow) \text{ auf } (\gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow) \in K(\Lambda) \times K(\Lambda) \\ \text{mit } \mathcal{E}_\Lambda^{u,\mu}(\gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow) := \text{Tr}_\Lambda\{(-\Delta - \mu\mathbf{1})\gamma_\uparrow\} + \text{Tr}_\Lambda\{(-\Delta - \mu\mathbf{1})\gamma_\downarrow\} + u \cdot \sum_{x \in \Lambda} D(\gamma_\uparrow)(x) D(\gamma_\downarrow)(x) \end{array} \right\}$$

ist äquivalent zu dem Minimierungsproblem

$$\widehat{\text{MP}} : \left. \begin{array}{l} \text{Minimiere } \hat{\mathcal{E}}_\Lambda^{u,\mu}(\xi) \text{ auf } \xi \in K(\Lambda) \\ \text{mit } \hat{\mathcal{E}}_\Lambda^{u,\mu}(\xi) := \text{Tr}_\Lambda\{(-\Delta - \mu\mathbf{1})\xi\} + \text{Tr}_\Lambda\{[-\Delta - \mu\mathbf{1} + uD(\xi)]_-\} \end{array} \right\}$$

im folgenden Sinn:

(a) Ist $\xi_* \in K(\Lambda)$ ein Minimierender (oder eine Lösung) von $\widehat{\text{MP}}$, dann sind

$$(\xi_*, \mathbf{1}_{[-\Delta - \mu\mathbf{1} + uD(\xi_*) < 0]}) \quad \text{und} \quad (\mathbf{1}_{[-\Delta - \mu\mathbf{1} + uD(\xi_*) < 0]}, \xi_*)$$

Minimierenden (oder Lösungen) von MP.

(b) Ist $(a_*, b_*) \in K(\Lambda) \times K(\Lambda)$ ein Minimierender (oder eine Lösung) von MP, dann sind sowohl a_* als auch b_* Minimierende (oder Lösungen) von $\widehat{\text{MP}}$.

und weiterhin sind die Minimumwerte von $\widehat{\text{MP}}$ (bezeichnet mit $\hat{E}_\Lambda^u(\mu)$) und von MP (bezeichnet mit $E_\Lambda^u(\mu)$) gleich. D. h.

$$\hat{E}_\Lambda^u(\mu) := \min_{\xi \in K(\Lambda)} \hat{\mathcal{E}}_\Lambda^{u,\mu}(\xi) = \min_{(\gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow) \in K(\Lambda) \times K(\Lambda)} \mathcal{E}_\Lambda^{u,\mu}(\gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow) =: E_\Lambda^u(\mu).$$

Wegen dieser Äquivalenz werden wir uns im Folgenden nur auf das Energiefunktional

$$\hat{\mathcal{E}}_\Lambda^{u,\mu}(\xi) := \text{Tr}_\Lambda\{(-\Delta - \mu\mathbf{1})\xi\} + \text{Tr}_\Lambda\{[-\Delta - \mu\mathbf{1} + uD(\xi)]_-\} \quad (3.12)$$

konzentrieren.

Weiterhin nennen wir $\text{Tr}_\Lambda\{(-\Delta - \mu\mathbf{1})\xi\}$ und $\text{Tr}_\Lambda\{[-\Delta - \mu\mathbf{1} + uD(\xi)]_-\}$ den linearen Anteil bzw. den nichtlinearen Anteil des HFz-Energiefunktional.

3.4 Beweis des Theorems 3.1

In diesem Unterkapitel wird das Theorem 3.1 bewiesen. Der Beweis dieses Theorems wurde in eine Folge von Lemmata aufgespalten, um die Übersichtlichkeit zu gewährleisten. Der Beweis dieser Lemmata befindet sich im Unterkapitel 3.8.

Definition 3.4. (Teilmengen des Gitters $\Lambda := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ nach $\delta \in (0, 1)$, $\xi \in K(\Lambda)$ und $M \in \mathbb{N}$)

Die Teilmenge $\Omega = \Omega_{\delta, \xi}$ des Gitters Λ ist folgendermaßen definiert:

$$\Omega = \Omega_{\delta, \xi} := \{x \in \Lambda \mid \langle \delta_x \mid \xi \delta_x \rangle < \delta\} \quad (3.13)$$

Ihre Komplementärmenge ist explizit gegeben durch:

$$\Omega^c = \Omega_{\delta, \xi}^c := \{x \in \Lambda \mid \langle \delta_x \mid \xi \delta_x \rangle \geq \delta\} \quad (3.14)$$

Die folgenden Teilmengen von Ω werden hier folgendermaßen definiert:

$$\partial\Omega := \{x \in \Omega \mid \text{dist}_1(x, \Omega^c) = 1\} \quad (\text{Rand von } \Omega) \quad (3.15)$$

und

$$\Omega_M = \Omega_{\delta, \xi, M} := \{x \in \Omega \mid \text{dist}_1(x, \Omega^c) > M\} \quad (3.16)$$

Hierbei versteht man unter dist_1 Folgendes:

$$\text{dist}_1(x, A) := \min_{y \in A} \text{dist}(x, y) \quad \text{wobei } x \in \Lambda, A \subset \Lambda$$

wobei

$$\text{dist}_1(x, y) := \|x - y\|_1 := \sum_{\nu=1}^d |x_\nu - y_\nu| \quad x, y \in \Lambda = (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$$

Bem.: Ist x ein Element von Ω_M , dann gilt selbstverständlich $B_{r \leq M}^{(1)}(x) \subset \Omega$, wobei

$$B_{r \leq M}^{(1)}(x) := \{y \in \Lambda \mid \text{dist}_1(x, y) \leq M\}$$

Die folgenden zwei Lemmata liefern untere Schranken an dem linearen bzw. nichtlinearen Anteil des HFz-Energiefunktional:

Lemma 3.2. (*Untere Schranke an dem linearen Anteil des HFz-Energiefunktional*)

Für alle $\mu \in (0, 1)$, $d \in \mathbb{N}$, $L \in \mathbb{N}$, $\delta \in (0, 1]$, $\mathbf{0}_\Lambda \leq \xi \leq \mathbf{1}_\Lambda$ und $M \in \mathbb{N}$ gilt folgende untere Schranke an $\text{Tr}_\Lambda\{(-\Delta - \mu\mathbf{1})\xi\}$:

$$\begin{aligned} \text{Tr}_\Lambda\{(-\Delta - \mu\mathbf{1})\xi\} &\geq \\ \text{Tr}_\Lambda\{[P_{\Omega_{\delta,\xi}^c}(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_{\Omega_{\delta,\xi}^c}]_-\} &- (\mu G_d(M)\delta + 4d\sqrt{\delta})|\partial\Omega_{\delta,\xi}| - \mu \sum_{x \in \Omega_{\delta,\xi,M}} D(\xi)(x), \end{aligned} \quad (3.17)$$

wobei $G_d(M)$ eine beliebige obere Schranke an $\frac{|\Omega \setminus \Omega_M|}{|\partial\Omega|}$ ist. Zum Beispiel:

$$G_d(M) := \begin{cases} 1 + 2(M-1), & \text{falls } d = 1 \\ 1 + 4 \frac{(M-1)M}{2}, & \text{falls } d = 2 \\ 1 + 2(M-1) + 4 \frac{(M-1)M(2M-1)}{6}, & \text{falls } d = 3 \\ (1 + 2(M-1))^d, & \text{lasst sich grob setzen, falls } d \geq 4. \end{cases} \quad (3.18)$$

Lemma 3.3. (*V. Bach*)

(*Untere Schranke mit Randterm an dem nichtlinearen Anteil des HFz-Energiefunktional mit Hilfe der Feshbach-Abbildung-Methode, siehe Kapitel 4*)

Für alle $\mu \in (0, 1)$, $d \in \mathbb{N}$, $L \in \mathbb{N}$, $\delta \in (0, 1]$, $\mathbf{0}_\Lambda \leq \xi \leq \mathbf{1}_\Lambda$ und $u > \frac{\mu}{\delta}$ gilt Folgendes:

$$\text{Tr}_\Lambda\{[-\Delta - \mu\mathbf{1} + uD(\xi)]_-\} \geq \text{Tr}_\Lambda\{[P_{\Omega_{\delta,\xi}}(-\Delta - \mu\mathbf{1} + uD(\xi))P_{\Omega_{\delta,\xi}}]_-\} - \frac{C_d^{(\text{FB})}}{u\delta - \mu}|\partial\Omega_{\delta,\xi}| \quad (3.19)$$

wobei

$$C_d^{(\text{FB})} := 4d^2 \quad (3.20)$$

Als nächstes Ziel wird der Summand $\text{Tr}_\Lambda\{[P_{\Omega_{\delta,\xi}}(-\Delta - \mu\mathbf{1} + uD(\xi))P_{\Omega_{\delta,\xi}}]_-\}$ in (3.19) nach unten abgeschätzt. In dieser Abschätzung sollte ein zusätzlicher positiver Summand auf Ω_M auftauchen. Der Grund dafür ist: Der negative Summand $-\mu \sum_{x \in \Omega_{\delta,\xi,M}} D(\xi)(x)$ in (3.17) soll durch diesen zusätzlichen positiven Summanden kompensiert werden.

Um dieses Ziel zu erreichen, führen wir folgende Potentiale (Funktionen auf dem Gitter Λ nach \mathbb{R}) ein:

Definition 3.5. (Die Potentiale $\tilde{D}(\xi, \mu, u)$ und $V_{u,\mu} : \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$)

$$\tilde{D}(\xi, u, \mu)(x) := \min\left\{ D(\xi)(x), \frac{\mu}{2u} \right\}, \quad x \in \Lambda \quad (3.21)$$

$$V_{\xi,u,\mu}(x) := -\mu + u\tilde{D}(\xi, \mu, u)(x), \quad x \in \Lambda \quad (3.22)$$

Es folgt unmittelbar nach Definition von $\tilde{D}(\xi, \mu, u)$ und $V_{u,\mu}(x)$, dass

$$\tilde{D}(\xi, \mu, u)(x) \leq D(\xi)(x) \quad \text{für alle } x \in \Lambda, \mathbf{0}_\Lambda \leq \xi \leq \mathbf{1}_\Lambda, u > 0 \text{ und } \mu > 0 \quad (3.23)$$

und

$$-\mu \leq V_{\xi,u,\mu}(x) \leq -\mu/2 \quad \text{für alle } x \in \Lambda, \mathbf{0}_\Lambda \leq \xi \leq \mathbf{1}_\Lambda, u > 0 \text{ und } \mu > 0 \quad (3.24)$$

gelten.

Lemma 3.4. Umgekehrt bzgl. (3.23) gilt für alle $\mu > 0$, $\delta \in (0, 1]$ und $\mathbf{0}_\Lambda \leq \xi \leq \mathbf{1}_\Lambda$ Folgendes:

$$u\tilde{D}(\xi, \mu, u)(x) \geq \frac{\mu}{2\delta} D(\xi)(x) \quad \text{vorausgesetzt, dass } x \in \Omega_{\delta,\xi} \text{ und } u > \mu/\delta. \quad (3.25)$$

Als eine unmittelbare Konsequenz der Definition von $\tilde{D}(\xi, \mu, u)$ in (3.21) haben wir

$$\text{Tr}\{ [P_{\Omega_{\delta,\xi}}(-\Delta - \mu\mathbf{1} + uD(\xi))P_{\Omega_{\delta,\xi}}]_- \} \geq \text{Tr}\{ [P_{\Omega_{\delta,\xi}}(-\Delta - \mu\mathbf{1} + u\tilde{D}(\xi, \mu, u))P_{\Omega_{\delta,\xi}}]_- \} \quad (3.26)$$

Kombinieren wir (3.26) mit (3.19), erhalten wir

Lemma 3.5. Für alle $\mu \in (0, 1)$, $d \in \mathbb{N}$, $L \in \mathbb{N}$, $\delta \in (0, 1)$, $\mathbf{0}_\Lambda \leq \xi \leq \mathbf{1}_\Lambda$ und $u > \frac{\mu}{\delta}$ gilt:

$$\text{Tr}_\Lambda\{ [-\Delta - \mu\mathbf{1} + uD(\xi)]_- \} \geq \text{Tr}\{ [P_{\Omega_{\delta,\xi}}(-\Delta - \mu\mathbf{1} + u\tilde{D}(\xi, \mu, u))P_{\Omega_{\delta,\xi}}]_- \} - \frac{C_d^{(\text{FB})}}{u\delta - \mu} |\partial\Omega_{\delta,\xi}| \quad (3.27)$$

Andererseits lässt sich der Summand $\text{Tr}\{ [P_{\Omega_{\delta,\xi}}(-\Delta - \mu\mathbf{1} + u\tilde{D}(\xi, \mu, u))P_{\Omega_{\delta,\xi}}]_-$ in (3.27) mit Hilfe von (3.25) folgendermaßen nach unten abschätzen:

Lemma 3.6. Für alle $\mu \in (0, 1)$, $d \in \mathbb{N}$, $L \in \mathbb{N}$, $\delta \in (0, 1)$, $\mathbf{0}_\Lambda \leq \xi \leq \mathbf{1}_\Lambda$ und $u > \frac{\mu}{\delta}$ gilt Folgendes:

$$\begin{aligned} & \text{Tr}\{ [P_{\Omega_{\delta,\xi}}(-\Delta - \mu\mathbf{1} + u\tilde{D}(\xi, \mu, u))P_{\Omega_{\delta,\xi}}]_- \} \geq \\ & \text{Tr}\{ [P_{\Omega_{\delta,\xi}}(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_{\Omega_{\delta,\xi}}]_- \} + \frac{\mu}{2\delta} \sum_{x \in \Omega_{\delta,\xi,M}} D(\xi)(x) \mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu, d](x) \end{aligned} \quad (3.28)$$

wobei

$$\mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu, d](x) := \langle x | \mathbf{1}_{[P_{\Omega_{\delta, \xi}}(-\Delta - \mu \mathbf{1} + u \tilde{D}(\xi, \mu, u))P_{\Omega_{\delta, \xi}} < 0]} x \rangle \quad (3.29)$$

Kombiniert man das Lemma 3.5 mit dem Lemma 3.6, erhält man **die gewünschte untere Schranke** an dem nichtlinearen Anteil des HFz-Energiefunktionals:

Lemma 3.7. (*Untere Schranke an dem nichtlinearen Anteil des HFz-Energiefunktionals mit einem positiven Summanden auf Ω_M*)

Für alle $\mu \in (0, 1)$, $d \in \mathbb{N}$, $L \in \mathbb{N}$, $\delta \in (0, 1)$, $\mathbf{0}_\Lambda \leq \xi \leq \mathbf{1}_\Lambda$ und $u > \frac{\mu}{\delta}$ gilt Folgendes:

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{[-\Delta - \mu \mathbf{1} + uD(\xi)]_-\} &\geq \\ \text{Tr}\{[P_{\Omega_{\delta, \xi}}(-\Delta - \mu \mathbf{1})P_{\Omega_{\delta, \xi}}]_-\} &- \frac{C_d^{(\text{FB})}}{u\delta - \mu} |\partial\Omega_{\delta, \xi}| + \frac{\mu}{2\delta} \sum_{x \in \Omega_{\delta, \xi, M}} D(\xi)(x) \mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu, d](x) \end{aligned} \quad (3.30)$$

wobei

$$\mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu, d](x) := \langle x | \mathbf{1}_{[P_{\Omega_{\delta, \xi}}(-\Delta - \mu \mathbf{1} + u \tilde{D}(\xi, \mu, u))P_{\Omega_{\delta, \xi}} < 0]} x \rangle \quad (3.31)$$

Das gesamte HFz-Energiefunktional (3.12) ist nach (3.17) für den linearen Anteil und nach (3.30) für den nichtlinearen Anteil folgendermaßen nach unten abgeschätzt:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{E}}_\Lambda^{u, \mu}(\xi) &:= \text{Tr}_\Lambda\{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) \xi\} + \text{Tr}_\Lambda\{[-\Delta - \mu \mathbf{1} + uD(\xi)]_-\} \\ &\geq \text{Tr}_\Lambda\{[P_{\Omega_{\delta, \xi}^c}(-\Delta - \mu \mathbf{1})P_{\Omega_{\delta, \xi}^c}]_-\} + \text{Tr}\{[P_{\Omega_{\delta, \xi}}(-\Delta - \mu \mathbf{1})P_{\Omega_{\delta, \xi}}]_-\} \\ &\quad - \left(\mu G_d(M) \delta + 4d \sqrt{\bar{\delta}} + \frac{C_d^{(\text{FB})}}{u\delta - \mu} \right) |\partial\Omega_{\delta, \xi}| \\ &\quad + \frac{\mu}{2\delta} \sum_{x \in \Omega_{\delta, \xi, M}} \left\{ \mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu](x) - 2\delta \right\} D(\xi)(x), \end{aligned} \quad (3.32)$$

für alle $\mu \in (0, 1)$, $L, M, d \in \mathbb{N}$, $\mathbf{0}_\Lambda \leq \xi \leq \mathbf{1}_\Lambda$, $\delta \in (0, 1]$ und $u > \mu/\delta$.

Die ersten zwei Summanden in (3.32) werden mit Hilfe eines Ergebnisses aus [FLU 02] durch E_{ferro} plus einen positiven Randterm nach unten abgeschätzt, nämlich:

Lemma 3.8. (Korollar der FLU Großkanonische Ensemble-Version, [FLU 02], siehe Kapitel 5)

Seien $0 < \mu < 1$ und $d \in \mathbb{N}$. Für alle beliebigen Teilmengen Ω des Gitters $\Lambda := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ gilt folgende Abschätzung:

$$\mathrm{Tr}_\Lambda\{[P_\Omega(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_\Omega]_-\} + \mathrm{Tr}_\Lambda\{[P_{\Omega^c}(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_{\Omega^c}]_-\} - \mathrm{Tr}_\Lambda\{[-\Delta - \mu\mathbf{1}]_-\} \geq \tilde{\alpha}_1(\mu, d) |\partial\Omega| \quad (3.33)$$

mit

$$\tilde{\alpha}_1(\mu, d) > 0 \quad \text{positiv ! und unabhängig von } \Omega \quad (3.34)$$

vorausgesetzt,

$$0 < \mu < 1 \quad \text{und} \quad L > L_o^{(\mathrm{FLU})}(\mu, d) \quad (3.35)$$

Hierbei sind

$$\tilde{\alpha}_1(\mu, d) := \left(1 + \frac{1}{4d}\right) \frac{1}{(4d)^2} \frac{(1-\mu)}{(4d-\mu)} \frac{1}{8} \frac{|S_d|}{(2\pi)^d} \left(\frac{\mu}{2}\right)^{\frac{2+d}{2}} > 0 \quad \text{für alle } 0 < \mu < 1 \quad (3.36)$$

und

$$L_o^{(\mathrm{FLU})}(\mu, d) := 4\pi d \frac{(2\pi)^d}{|S_d|} \left(\frac{2}{\mu}\right)^{\frac{2+d}{2}} < \infty \quad \text{für alle } 0 < \mu < 1 \quad (3.37)$$

Nach (3.32), nach Definition von $E_{\mathrm{ferro}}(\mu, L, d) := \mathrm{Tr}_\Lambda\{[-\Delta - \mu\mathbf{1}]_-\}$ und nach Lemma 3.8 erhalten wir Folgendes:

Für alle $\mu \in (0, 1)$, $d \in \mathbb{N}$, $L \geq L_o^{(\mathrm{FLU})}(\mu, d)$, $M \in \mathbb{N}$, $\mathbf{0}_\Lambda \leq \xi \leq \mathbf{1}_\Lambda$, $\delta \in (0, 1]$ und $u > \mu/\delta$ gilt

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{E}}_\Lambda^{u, \mu}(\xi) &:= \mathrm{Tr}_\Lambda\{(-\Delta - \mu\mathbf{1})\xi\} + \mathrm{Tr}_\Lambda\{[-\Delta - \mu\mathbf{1} + uD(\xi)]_-\} \\ &\geq E_{\mathrm{ferro}}(\mu, L, d) + \left[\tilde{\alpha}_1(\mu, d) - \left(\mu G_d(M) \delta + 4d \sqrt{\delta} + \frac{C_d^{(\mathrm{FB})}}{u\delta - \mu} \right) \right] |\partial\Omega_{\delta, \xi}| \\ &\quad + \frac{\mu}{2\delta} \sum_{x \in \Omega_{\delta, \xi, M}} \left\{ \mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu, d](x) - 2\delta \right\} D(\xi)(x), \end{aligned} \quad (3.38)$$

wobei

$$\mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu, d](x) := \langle x | \mathbf{1}_{[P_{\Omega_{\delta, \xi}}(-\Delta - \mu\mathbf{1} + u\tilde{D}(\xi, \mu, u))P_{\Omega_{\delta, \xi}}]_{<0}} x \rangle$$

Als nächstes Ziel zeigen wir, dass der letzte Summand in (3.38),

$$\frac{\mu}{2\delta} \sum_{x \in \Omega_{\delta, \xi, M}} \left\{ \mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu, d](x) - 2\delta \right\} D(\xi)(x),$$

nicht negativ ist, wenn wir M hinreichend groß und δ hinreichend klein auswählen.

Sei nun $V_{\xi, u, \mu} = -\mu \mathbf{1} + u \tilde{D}(\xi, \mu, u)$, wie in (3.22) definiert, dann lässt sich $\mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu, d](x)$ folgendermaßen ausdrücken:

$$\mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu, d](x) = \mathcal{D}_-[\Omega_{\delta, \xi}, V_{\xi, u, \mu}, d](x) = \langle x | \mathbf{1}_{[P_{\Omega_{\delta, \xi}}(-\Delta + V_{\xi, u, \mu})P_{\Omega_{\delta, \xi}} < 0]} x \rangle$$

Wie schon in (3.24) erwähnt wurde, gilt $-\mu/2 \leq V_{\xi, u, \mu}(x) \leq -\mu/2$ für alle $x \in \Lambda$. Diese Tatsache ist eine Voraussetzung für folgendes wichtiges Lemma:

Lemma 3.9. *(Untere Schranke $\approx \mu^{d+\varepsilon}$ an der Dichte an einer Stelle x des Gitters Λ ; Anwendung der Trotter-Formel-Methode, siehe Kapitel 6, Theorem 6.1)*

Für alle $0 < \mu < 1$, $d \in \mathbb{N}$, existiert eine endliche Halbkantenlänge $M_o \equiv M_o(\mu, d) < \infty$, so dass Folgendes gilt:

Für alle beliebigen Teilmengen Ω des Gitters $\Lambda := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ mit $L > 2M_o(\mu, d) + 1$ und für alle Potentiale $V : \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ mit $-\mu \leq V \leq -\mu/2$ gilt

$$\mathcal{D}_-[\Omega, -\mu \leq V \leq -\mu/2, d](x) := \langle x | \mathbf{1}_{[P_{\Omega}(-\Delta + V)P_{\Omega} < 0]} x \rangle \geq \mathcal{A}(\mu, d) > 0, \quad (3.39)$$

vorausgesetzt, $x \in \Omega$, so dass die

$$\text{Box}(x) := \{-M_o + x, \dots, x, \dots, M_o + x\}^d \quad \text{in } \Omega \text{ bleibt.} \quad (3.40)$$

Die **positive** Funktion $\mathcal{A}(\mu, d)$ hängt weder von Ω noch von V ab und verhält sich im Limes $\mu \rightarrow 0$ folgendermaßen:

$$\lim_{\mu \rightarrow 0} \mathcal{A}(\mu, d) \left[\left(\frac{1}{\mu} \right) \ln \left(\frac{1}{\mu} \right) \right]^d = \frac{1}{16} \left(\frac{\text{erf}^2(\pi)}{32\pi d} \right)^d.$$

Explizite Ausdrücke für $\mathcal{A}(\mu, d)$ und $M_o(\mu, d)$ befinden sich im Theorem 6.1.

Lemma 3.10. *(Die Voraussetzung (3.40) für Lemma 3.9 wird für $x \in \Omega_M$ mit $M = d M_o(\mu, d)$ erfüllt)*

Ist x Element von $\Omega_{\delta, \xi, M=dM_o}$, dann bleibt die $\text{Box}(x) := \{-M_o + x, \dots, x, \dots, M_o + x\}^d$ in $\Omega_{\delta, \xi}$.

Nach Lemma 3.10 und Lemma 3.9 folgt

Lemma 3.11. *Sei $\delta_{cr1}(\mu, d) := \frac{1}{3}\mathcal{A}(\mu, d)$ definiert. Ist $0 < \delta < \delta_{cr1}(\mu, d)$, dann gilt¹⁶*

$$+ \frac{\mu}{2\delta} \sum_{x \in \Omega_{\delta, \xi, M=d M_o(\mu, d)}} \left\{ \mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu, d](x) - 2\delta \right\} D(\xi)(x) \geq 0 \quad (3.41)$$

für alle $0 < \mu < 1$, $d \in \mathbb{N}$ und $\mathbf{0} \leq \xi \leq \mathbf{1}$.

Setze man $M = d M_o(\mu, d)$, folgt nach (3.38) und Lemma 3.11, dass

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{E}}_{\Lambda}^{u, \mu}(\xi) &:= \text{Tr}_{\Lambda} \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1}) \xi \} + \text{Tr}_{\Lambda} \{ [-\Delta - \mu \mathbf{1} + u D(\xi)]_- \} \\ &\geq E_{\text{ferro}}(\mu, L, d) + \left[\tilde{\alpha}_1(\mu, d) - \left(\mu G_d(d M_o(\mu, d)) \delta + 4d \sqrt{\delta} + \frac{C_d^{(\text{FB})}}{u\delta - \mu} \right) \right] |\partial \Omega_{\delta, \xi}| \end{aligned} \quad (3.42)$$

für alle $\mu \in (0, 1)$, $d \in \mathbb{N}$, $L \geq L_{cr}(\mu, d)$, $\mathbf{0}_{\Lambda} \leq \xi \leq \mathbf{1}_{\Lambda}$, $u > \mu/\delta$ und $0 < \delta < \delta_{cr1}(\mu, d)$ gilt.

Hierbei wird $L_{cr}(\mu, d)$ folgendermaßen definiert:

$$L_{cr}(\mu, d) := \max \{ L_o^{(\text{FLU})}(\mu, d), 2M_o(\mu, d) + 1 \} \quad (3.43)$$

Definition 3.6. *Seien*

$$\mathcal{M}_0(\mu, d) := \mu G_d(d M_o(\mu, d)) \quad \text{und} \quad F(\mu, d, \delta) := \tilde{\alpha}_1(\mu, d) - \mathcal{M}_0(\mu, d)\delta - 4d \sqrt{\delta} \quad (3.44)$$

definiert.

Lemma 3.12. *Für alle $0 < \mu < 1$ und $d \in \mathbb{N}$ existiert ein echt positiver Wert*

$$\delta_{cr2}(\mu, d) := \frac{[\tilde{\alpha}_1(\mu, d)]^2}{64d^2 + 8\tilde{\alpha}_1(\mu, d)\mathcal{M}_0(\mu, d)} > 0 \quad (3.45)$$

, so dass

$$\tilde{\alpha}_1(\mu, d) > F(\mu, d, \delta) > \frac{1}{2} \tilde{\alpha}_1(\mu, d) > 0 \quad \text{für alle } 0 < \delta < \delta_{cr2}(\mu, d) \quad (3.46)$$

gilt.

¹⁶Wir könnten hier selbstverständlich $\delta_{cr1}(\mu, d) := \frac{1}{2}\mathcal{A}(\mu, d)$ optimal setzen, damit der Ausdruck (3.41) nicht negativ bleibt. Wir haben trotzdem $\delta_{cr1}(\mu, d) := \frac{1}{3}\mathcal{A}(\mu, d)$ gesetzt, damit $\left\{ \mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu, d](x) - 2\delta \right\}$ echt positiv bleibt. Diese Tatsache wird später bei dem Beweis der Eindeutigkeit des Minimierenden (siehe (3.10)) eine Rolle spielen.

Nun definieren wir

$$\delta_{cr}(\mu, d) := \min\{\delta_{cr1}(\mu, d), \delta_{cr2}(\mu, d)\} \quad (3.47)$$

Nach (3.42), Definition von $\mathcal{M}_o(\mu, d)$ und $F(\mu, d, \delta)$ in (3.44) und Lemma 3.12 gilt Folgendes:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{E}}_{\Lambda}^{u, \mu}(\xi) &:= \text{Tr}_{\Lambda}\{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) \xi\} + \text{Tr}_{\Lambda}\{[-\Delta - \mu \mathbf{1} + uD(\xi)]_{-}\} \\ &\geq E_{\text{ferro}}(\mu, L, d) + \left[\tilde{\alpha}_1(\mu, d) - \left(\mathcal{M}_o(\mu, d) \delta + 4d\sqrt{\delta} + \frac{C_d^{(\text{FB})}}{u\delta - \mu} \right) \right] |\partial\Omega_{\delta, \xi}| \\ &= E_{\text{ferro}}(\mu, L, d) + \left[\tilde{\alpha}_1(\mu, d) - \mathcal{M}_o(\mu, d) \delta - 4d\sqrt{\delta} - \frac{C_d^{(\text{FB})}}{u\delta - \mu} \right] |\partial\Omega_{\delta, \xi}| \\ &= E_{\text{ferro}}(\mu, L, d) + \left[F(\mu, d, \delta) - \frac{C_d^{(\text{FB})}}{u\delta - \mu} \right] |\partial\Omega_{\delta, \xi}| \\ &\geq E_{\text{ferro}}(\mu, L, d) + \left[\frac{1}{2}\tilde{\alpha}_1(\mu, d) - \frac{C_d^{(\text{FB})}}{u\delta - \mu} \right] |\partial\Omega_{\delta, \xi}| \quad (\text{nach Lemma 3.12}) \end{aligned} \quad (3.48)$$

für alle $\mu \in (0, 1)$, $d \in \mathbb{N}$, $L \geq L_{cr}(\mu, d)$, $\mathbf{0}_{\Lambda} \leq \xi \leq \mathbf{1}_{\Lambda}$, $u > \mu/\delta$ und $0 < \delta < \delta_{cr}(\mu, d) := \min\{\delta_{cr1}(\mu, d), \delta_{cr2}(\mu, d)\}$.

Abschließend wird das gesuchte $u_{\text{cr}}(\mu, d)$ bestimmt, so dass

$$\mathcal{F}(u, \mu, d) := \left[\frac{1}{2} \tilde{\alpha}_1(\mu, d) - \frac{C_d^{(\text{FB})}}{u \delta_{\text{cr}}(\mu, d) - \mu} \right] \stackrel{!}{=} 0 \quad \text{mit} \quad \delta_{\text{cr}}(\mu, d) := \min\{\delta_{\text{cr}1}(\mu, d), \delta_{\text{cr}2}(\mu, d)\} \quad (3.49)$$

gilt.

D.h. das gesuchte $u_{\text{cr}}(\mu, d)$ ist gegeben durch:

$$\boxed{u_{\text{cr}}(\mu, d) := \frac{2 C_d^{(\text{FB})}}{\delta_{\text{cr}}(\mu, d) \tilde{\alpha}_1(\mu, d)} + \frac{\mu}{\delta_{\text{cr}}(\mu, d)} < \infty} \quad (3.50)$$

Bemerke, dass dieses $u_{\text{cr}}(\mu, d)$ in (3.50) tatsächlich *endlich* ist und die Bedingung $u > \mu/\delta$ in (3.48) automatisch erfüllt wird. Daher folgt nach (3.48) für $\delta = \delta_{\text{cr}}(\mu, d)$, $u > u_{\text{cr}}(\mu, d)$ und $L > L_{\text{cr}}(\mu, d)$, dass

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{E}}_{\Lambda}^{u, \mu}(\xi) &:= \text{Tr}_{\Lambda}\{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) \xi\} + \text{Tr}_{\Lambda}\{[-\Delta - \mu \mathbf{1} + uD(\xi)]_{-}\} \\ &\geq E_{\text{ferro}}(\mu, L, d) + \left[\frac{1}{2} \tilde{\alpha}_1(\mu, d) - \frac{C_d^{(\text{FB})}}{u \delta_{\text{cr}}(\mu, d) - \mu} \right] |\partial\Omega_{\delta_{\text{cr}}(\mu, d), \xi}| \\ &= E_{\text{ferro}}(\mu, L, d) + \mathcal{F}(u, \mu, d) |\partial\Omega_{\delta_{\text{cr}}(\mu, d), \xi}| \quad \text{mit } \mathcal{F}(u, \mu, d) > 0, \text{ da } u > u_{\text{cr}}(\mu, d), \end{aligned} \quad (3.51)$$

für alle $\mathbf{0} \leq \xi \leq \mathbf{1}$ gilt.

Mit der Ungleichung (3.51) und der Tatsache

$$\mathcal{E}_{L, d}^{u, \mu}(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow}) \geq \mathcal{E}_{L, d}^{u, \mu}(\gamma_{\uparrow}, \mathbf{1}_{[-\Delta - \mu + uD(\gamma_{\uparrow}) < 0]}) := \hat{\mathcal{E}}_{L, d}^{u, \mu}(\gamma_{\uparrow})$$

folgt

$$\mathcal{E}_{L, d}^{u, \mu}(\gamma_{\uparrow}, \gamma_{\downarrow}) \geq E_{\text{ferro}}(\mu, L, d) + \mathcal{F}(u, \mu, d) |\partial\Omega_{\delta_{\text{cr}}(\mu, d), \gamma_{\uparrow}}| \quad \text{mit } \mathcal{F}(u, \mu, d) > 0$$

für $u > u_{\text{cr}}(\mu, d)$ und $L > L_{\text{cr}}(\mu, d)$.

Damit schließen wir **den Beweis der wichtigen unteren Schranke mit Randterm (3.7) in Theorem 3.1.**

Zum Beweis von E_{ferro} als Minimumwert und der Eindeutigkeit der Minimierenden

Zum Beweis von (3.9) und (3.10) im Theorem 3.1 haben wir Folgendes:

Sei $u > u_{cr}(\mu, d)$ und $L > L_{cr}(\mu, d) := \max\{L_o^{(\text{FLU})}(\mu, d), 2M_o(\mu, d) + 1\}$ und sei weiterhin $(a_*, b_*) \in K(\Lambda) \times K(\Lambda)$ ein Minimierender des Energiefunktional $\mathcal{E}_{L,d}^{u,\mu}$, dann gilt selbstverständlich

$$E_{L,d}^u(\mu) = \mathcal{E}_{L,d}^{u,\mu}(a_*, b_*) \quad (3.52)$$

Nun gilt einerseits

$$E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) \geq E_{L,d}^u(\mu) \quad \text{für alle } u > 0, \quad (3.53)$$

da $E_{\text{ferro}}(\mu, d, L)$ eine obere Schranke an $E_{L,d}^u(\mu)$ ist (siehe (3.3)).

Andererseits gilt nach der schon bewiesenen Ungleichung (3.7)

$$\mathcal{E}_{L,d}^{u,\mu}(a_*, b_*) \geq E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) + \mathcal{F}(u, \mu, d) |\partial\Omega_{\delta_{cr}(\mu,d),a_*}| \quad \text{mit } \mathcal{F}(u, \mu, d) > 0 \quad (3.54)$$

Kombiniert man (3.52), (3.53) und (3.54) miteinander, erhält man

$$E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) \geq E_{L,d}^u(\mu) \geq E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) + \mathcal{F}(u, \mu, d) |\partial\Omega_{\delta_{cr}(\mu,d),a_*}| \quad \text{mit } \mathcal{F}(u, \mu, d) > 0 \quad (3.55)$$

Da $\mathcal{F}(u, \mu, d) > 0$ folgt unmittelbar nach (3.55), dass

1. $E_{L,d}^u(\mu)$ gleich $E_{\text{ferro}}(\mu, d, L)$ sein muss. Dies beweist (3.9).
2. $|\partial\Omega_{\delta_{cr}(\mu,d),a_*}|$ gleich 0 sein muss.

Dies heißt, es gibt nur zwei Möglichkeit für die Menge $\Omega_{\delta_{cr}(\mu,d),a_*}$:

- 2.1. Entweder ist $\Omega_{\delta_{cr}(\mu,d),a_*} = \emptyset$. D.h. $D(a_*)(x) \geq \delta_{cr}(\mu, d)$ für alle $x \in \Lambda$ (siehe Def. 3.4)
- 2.2. oder ist $\Omega_{\delta_{cr}(\mu,d),a_*} = \Lambda$. D.h. $D(a_*)(x) < \delta_{cr}(\mu, d)$ für alle $x \in \Lambda$ (siehe Definition 3.4)

Bevor wir mit den Fällen 2.1 und 2.2 anfangen, bemerken wir, dass für diese beiden Fälle Folgendes gilt:

Nach der Tatsache, dass $E_{L,d}^u(\mu) = E_{\text{ferro}}(\mu, d, L)$ gilt, folgt

$$\begin{aligned} E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) &= E_{L,d}^u(\mu) \\ &= \mathcal{E}_{L,d}^{u,\mu}(a_*, b_*) \\ &:= \text{Tr}\{(-\Delta - \mu)a_*\} + \text{Tr}\{(-\Delta - \mu)b_*\} + u \sum_{x \in \Lambda} D(a_*)(x) D(b_*)(x) \\ &= \text{Tr}\{(-\Delta - \mu)a_*\} + \text{Tr}\{(-\Delta - \mu + uD(a_*))b_*\} \\ &\geq \text{Tr}\{(-\Delta - \mu)a_*\} + \text{Tr}\{[-\Delta - \mu + uD(a_*)]_-\} \end{aligned}$$

D.h.

$$E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) \geq \text{Tr}\{(-\Delta - \mu)a_*\} + \text{Tr}\{[-\Delta - \mu + uD(a_*)]_-\} \quad (3.56)$$

Im Fall 2.1. ($D(a_*)(x) \geq \delta_{cr}(\mu, d)$ für alle $x \in \Lambda$) folgt

$$\begin{aligned}
[-\Delta - \mu + uD(a_*)]_- &\geq [-\Delta - \mu + u\delta_{cr}(\mu, d)]_- && \left(\begin{array}{l} \text{da } D(a_*)(x) \geq \delta_{cr}(\mu, d) \\ \text{für alle } x \in \Lambda \end{array} \right) \\
&\geq [-\Delta - \mu + u_{cr}(\mu, d)\delta_{cr}(\mu, d)]_- && \text{(da } u > u_{cr}\text{)} \\
&= [-\Delta - \mu + \frac{2C_d^{(FB)}}{\tilde{\alpha}_1(\mu, d)} + \mu]_- && \text{(nach (3.50))} \\
&= [-\Delta + \frac{2C_d^{(FB)}}{\tilde{\alpha}_1(\mu, d)}]_- = \mathbf{0} && \left(\text{da } -\Delta \geq 0 \text{ und } \frac{2C_d^{(FB)}}{\tilde{\alpha}_1(\mu, d)} \geq 0 \right)
\end{aligned} \tag{3.57}$$

D.h. im Fall 2.1. gilt $\text{Tr}\{[-\Delta - \mu + uD(a_*)]_-\} = 0$ daher folgt,

$$\begin{aligned}
E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) &\geq \text{Tr}\{(-\Delta - \mu)a_*\} + \text{Tr}\{[-\Delta - \mu + uD(a_*)]_-\} && \text{(nach (3.56))} \\
&= \text{Tr}\{(-\Delta - \mu)a_*\} + 0 && \text{(nach (3.57))} \\
&\geq \text{Tr}\{[-\Delta - \mu]_-\} = E_{\text{ferro}}(\mu, d, L)
\end{aligned}$$

D. h.

$$E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) \geq \text{Tr}\{(-\Delta - \mu)a_*\} \geq E_{\text{ferro}}(\mu, d, L)$$

und damit ist $\text{Tr}\{(-\Delta - \mu)a_*\} = E_{\text{ferro}}(\mu, d, L)$, was $a_* \in \Gamma_{\text{ferro}}$ bedeutet.

Also gilt $a_* \in \Gamma_{\text{ferro}}$ im Fall 2.1.

Im Fall 2.2. ($D(a_*)(x) < \delta_{cr}(\mu, d)$ für alle $x \in \Lambda$) folgt

$$\begin{aligned}
E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) &\geq \text{Tr}\{(-\Delta - \mu)a_*\} + \text{Tr}\{[-\Delta - \mu + uD(a_*)]_-\} && \text{(nach (3.56))} \\
&\geq -\mu \sum_{x \in \Lambda} D(a_*)(x) + \text{Tr}\{[-\Delta - \mu + uD(a_*)]_-\} && \text{(da } -\Delta \geq 0\text{)} \\
&\geq -\mu \sum_{x \in \Lambda} D(a_*)(x) + \text{Tr}\{[-\Delta - \mu + u\tilde{D}(a_*)]_-\} && \text{(da } \tilde{D} \leq D\text{)}
\end{aligned} \tag{3.58}$$

wobei

$$\tilde{D}(a_*)(x) := \min \left\{ D(a_*)(x), \frac{\mu}{2u} \right\} \tag{3.59}$$

Die Ungleichung (3.58) lässt sich weiter nach unten abschätzen, nämlich:

$$\begin{aligned}
E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) &\geq -\mu \sum_{x \in \Lambda} D(a_*)(x) + \text{Tr}\{[-\Delta - \mu + u\tilde{D}(a_*)]_-\} \\
&= -\mu \sum_{x \in \Lambda} D(a_*)(x) + \text{Tr}\{(-\Delta - \mu + u\tilde{D}(a_*))\mathbf{1}_{[-\Delta - \mu + u\tilde{D}(a_*) < 0]}\} \\
&= -\mu \sum_{x \in \Lambda} D(a_*)(x) + \text{Tr}\{(-\Delta - \mu)\mathbf{1}_{[-\Delta - \mu + u\tilde{D}(a_*) < 0]}\} + u \sum_{x \in \Lambda} \tilde{D}(a_*)(x) \langle x | \mathbf{1}_{[-\Delta - \mu + u\tilde{D}(a_*) < 0]} x \rangle \\
&\geq -\mu \sum_{x \in \Lambda} D(a_*)(x) + \text{Tr}\{[-\Delta - \mu]_-\} + u \sum_{x \in \Lambda} \tilde{D}(a_*)(x) \langle x | \mathbf{1}_{[-\Delta - \mu + u\tilde{D}(a_*) < 0]} x \rangle \\
&= -\mu \sum_{x \in \Lambda} D(a_*)(x) + \text{Tr}\{[-\Delta - \mu]_-\} + u \sum_{x \in \Lambda} \tilde{D}(a_*)(x) \mathcal{D}_-[\Omega = \Lambda, V](x)
\end{aligned} \tag{3.60}$$

wobei

$$\mathcal{D}_-[\Omega = \Lambda, V](x) := \langle x | \mathbf{1}_{[P_\Omega(-\Delta + V)P_\Omega < 0]} x \rangle = \langle x | \mathbf{1}_{[-\Delta + V < 0]} x \rangle \quad \text{mit} \quad V := -\mu + u\tilde{D}(a_*) \tag{3.61}$$

Nach Lemma 3.4 mit $\Omega_{\delta_{cr}(\mu, d), a_*} = \Lambda \ni x$ (da es sich um den Fall 2.2. handelt) und $u > u_{cr}(\mu, d) > \mu/\delta_{cr}(\mu, d)$ (siehe Definition von $u_{cr}(\mu, d)$ in (3.50)) folgt, dass

$$u \tilde{D}(a_*)(x) \geq \frac{\mu}{2\delta_{cr}(\mu, d)} D(a_*)(x) \quad \text{für alle} \quad x \in \Omega_{\delta_{cr}(\mu, d), a_*} = \Lambda \tag{3.62}$$

Setze man (3.62) in (3.60) ein, erhält man:

$$\begin{aligned}
E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) &\geq -\mu \sum_{x \in \Lambda} D(a_*)(x) + \text{Tr}\{[-\Delta - \mu]_-\} + \frac{\mu}{2\delta_{cr}(\mu, d)} \sum_{x \in \Lambda} D(a_*)(x) \mathcal{D}_-[\Omega = \Lambda, V](x) \\
&= \text{Tr}\{[-\Delta - \mu]_-\} + \frac{\mu}{2\delta_{cr}(\mu, d)} \sum_{x \in \Lambda} D(a_*)(x) \left\{ \mathcal{D}_-[\Omega = \Lambda, V](x) - 2\delta_{cr}(\mu, d) \right\} \\
&= E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) + \frac{\mu}{2\delta_{cr}(\mu, d)} \sum_{x \in \Lambda} D(a_*)(x) \left\{ \mathcal{D}_-[\Omega = \Lambda, V](x) - 2\delta_{cr}(\mu, d) \right\}
\end{aligned} \tag{3.63}$$

Nach definition von $\tilde{D}(a_*)$ in (3.59) folgt, dass V in (3.61) $-\mu \leq V \leq -\mu/2$ erfüllt. Daher gibt es nach Lemma 3.9 eine endliche Halbkantenlänge $M_o(\mu, d)$, so dass

$$\mathcal{D}_-[\Omega = \Lambda, V](x) \geq \mathcal{A}(\mu, d) > 0 \tag{3.64}$$

vorausgesetzt, $x \in \Omega = \Lambda$, so dass die

$$\text{Box}(x) := \{-M_o + x, \dots, x, \dots, x + M_o(\mu, d)\} \text{ in } \Omega \text{ bleibt.} \tag{3.65}$$

Die Bedingung (3.65) ist für alle $x \in \Lambda := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ immer erfüllt, da $\Omega = \Lambda$ (da es sich um den Fall 2.2. handelt) und $L > 2M_o(\mu, d) + 1$ vorausgesetzt ist.

Nach Definition von $\delta_{cr}(\mu, d)$ in (3.47) und nach Definition von $\delta_{cr1}(\mu, d)$ im Lemma 3.11 gilt $\delta_{cr}(\mu, d) \leq \delta_{cr1}(\mu, d) := \frac{1}{3}\mathcal{A}(\mu, d)$ und weiterhin mit (3.64) folgt

$$\left\{ \mathcal{D}_-[\Omega = \Lambda, V](x) - 2\delta_{cr}(\mu, d) \right\} \geq \mathcal{A}(\mu, d) - \frac{2}{3}\mathcal{A}(\mu, d) = \frac{1}{3}\mathcal{A}(\mu, d) > 0, \tag{3.66}$$

was mit (3.63) zu $D(a_*)(x) = 0$ für alle $x \in \Lambda$ führt. Aber dies bedeutet, dass ¹⁷ $a_* = \mathbf{0}$.

Also gilt $a_* = \mathbf{0}$ im Fall 2.2.

In allen Fällen (gleichgültig ob man sich im Fall 2.1 oder im Fall 2.2 befindet) gilt Folgendes:

Ist (a_, b_*) ein Minimierender von $\mathcal{E}_{L,d}^{u,\mu}$, dann ist entweder $a_* \in \Gamma_{\text{ferro}}$ oder $a_* = \mathbf{0}$.*

Da $\mathcal{E}_{L,d}^{u,\mu}(a_*, b_*) = \mathcal{E}_{L,d}^{u,\mu}(b_*, a_*)$ gilt, haben wir nach (3.55) auch

$$E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) \geq E_{L,d}^u(\mu) \geq E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) + \mathcal{F}(u, \mu, d) |\partial\Omega_{\delta_{cr}(\mu, d), b_*}| \quad \text{mit } \mathcal{F}(u, \mu, d) > 0 \quad (3.67)$$

und daher genauso wie beim Fall mit a_* gibt es auch nur zwei Möglichkeit für b_* , nämlich: entweder $b_* \in \Gamma_{\text{ferro}}$ oder $b_* = \mathbf{0}$.

Damit haben wir nur vier mögliche Minimierenden, nämlich:

- a) $(\mathbf{0}, \mathbf{0})$
- b) $(a_* \in \Gamma_{\text{ferro}}, b_* \in \Gamma_{\text{ferro}})$
- c) $(a_* \in \Gamma_{\text{ferro}}, \mathbf{0})$
- d) $(\mathbf{0}, b_* \in \Gamma_{\text{ferro}})$

Andererseits ist es einfach nachzuprüfen, dass a) und b) keine Minimierenden sein dürfen und c) und d) tatsächlich Minimierenden von $\mathcal{E}_{L,d}^{u,\mu}$ sind. Daher sind c) und d) die einzigen Minimierenden, was (3.10) beweist.

Damit beenden wir den Beweis des Theorems 3.1.

□

¹⁷Für alle $x, y \in \Lambda$ gilt: $|\langle y|a_*x \rangle|^2 \stackrel{(\circ)}{\leq} \langle y|y \rangle \langle a_*x|a_*x \rangle = \langle x|a_*^2x \rangle \stackrel{(\bullet)}{\leq} \langle x|a_*x \rangle := D(a_*)(x)$.
Im (◦) und (•) haben wir Cauchy-Schwarz-Ungleichung bzw. $\mathbf{0} \leq a_* \leq \mathbf{1}$ benutzt.
Daher folgt: $D(a_*)(x) = 0$ für alle $x \in \Lambda \Rightarrow \langle y|a_*x \rangle = 0$ für alle $x, y \in \Lambda \Rightarrow a_* = \mathbf{0}$.

3.5 Zusammenfassung des Hauptergebnisses (Ausdruck für $u_{cr}(\mu, d)$)

Seien $0 < \mu < 1$ und $d \in \mathbb{N}$ fest, dann existiert eine endliche Kopplung $u_{cr}(\mu, d)$ und eine endliche Kantenlänge $L_{cr}(\mu, d)$, so dass Folgendes gilt:

$$\mathcal{E}_{L,d}^{u,\mu}(\gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow) \geq \hat{\mathcal{E}}_{L,d}^{u,\mu}(\gamma_\uparrow) \geq E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) + \mathcal{F}(u, \mu, d) |\Omega_{\delta_{cr}(\mu, d), \gamma_\uparrow}| \quad \text{mit } \mathcal{F}(u, \mu, d) > 0 \quad (3.68)$$

vorausgesetzt, $u > u_{cr}(\mu, d)$ und $L > L_{cr}(\mu, d)$ gelten.

Die expliziten Ausdrücke für $u_{cr}(\mu, d)$, $L_{cr}(\mu, d)$, $\delta_{cr}(\mu, d)$ und $\mathcal{F}(u, \mu, d)$ sind unten gegeben. An der rechten Seite neben jedem Ausdruck steht das jeweilige Kapitel, in dem dieser Ausdruck bewiesen wurde. Für eine graphische Darstellung von $u_{cr}(\mu, d)$ siehe Unterkapitel 3.6.

$$u_{cr}(\mu, d) := \frac{2 C_d^{(\text{FB})}}{\delta_{cr}(\mu, d) \tilde{\alpha}_1(\mu, d)} + \frac{\mu}{\delta_{cr}(\mu, d)} < \infty \quad (\text{Kapitel 3})$$

und

$$L_{cr}(\mu, d) := \max \left\{ L_o^{(\text{FLU})}(\mu, d), 2M_o(\mu, d) + 1 \right\} \quad (\text{Kapitel 3})$$

wobei

$$1) \quad \delta_{cr}(\mu, d) := \min \{ \delta_{cr1}(\mu, d), \delta_{cr2}(\mu, d) \} > 0 \quad (\text{Kapitel 3})$$

$$1a) \quad \delta_{cr1}(\mu, d) := \frac{1}{3} \mathcal{A}(\mu, d) > 0 \quad \text{mit} \quad (\text{Kapitel 3})$$

$$\mathcal{A}(\mu, d) := \frac{C_d^{(\text{Trotter})}}{\left(\frac{1}{\mu}\right)^d \left[\ln \frac{1}{C_d^{(\text{Trotter})} \mu^d} \right]^d} \quad \text{für alle } d \leq 23 \quad (\text{Kapitel 6})$$

oder

$$\mathcal{A}(\mu, d) := \frac{C_d^{(\text{Trotter})}}{\left(\frac{1}{\mu}\right)^d \left[\max \left\{ \ln \frac{1}{C_d^{(\text{Trotter})} \mu^d}, X(d) \right\} \right]^d} \quad \text{für alle } d \in \mathbb{N} \quad (\text{Kapitel 6})$$

wobei

$$C_d^{(\text{Trotter})} := \frac{1}{16} \left(\frac{\text{erf}^2(\pi)}{32\pi} \right)^d \quad (\text{Kapitel 6})$$

$$1b) \quad \delta_{cr2}(\mu, d) := \frac{[\tilde{\alpha}_1(\mu, d)]^2}{64 d^2 + 8 \tilde{\alpha}_1(\mu, d) \mathcal{M}_o(\mu, d)} > 0 \quad (\text{Kapitel 3})$$

wobei

$$\mathcal{M}_o(\mu, d) := \mu G_d(dM_o(\mu, d)) \quad (\text{Kapitel 3})$$

mit

$$G_d(M) := \begin{cases} 1 + 2(M-1), & \text{falls } d = 1 \\ 1 + 4 \frac{(M-1)M}{2}, & \text{falls } d = 2 \\ 1 + 2(M-1) + 4 \frac{(M-1)M(2M-1)}{6}, & \text{falls } d = 3 \\ (1 + 2(M-1))^d, & \text{lasst sich grob setzen, falls } d \geq 4 \end{cases} \quad (\text{Kapitel 3})$$

und

$$M_o(\mu, d) := \left\lceil \frac{1}{2} \ell_3(\beta_*(\mu, d), d) - 1 \right\rceil \in \mathbb{N} \quad (\text{Kapitel 6})$$

wobei

$$\ell_3(\beta_*(\mu, d), d) := \max \left\{ \frac{2d}{\ln 2} \beta_*(\mu, d), \left(\frac{4\pi}{\operatorname{erf}(\pi)} \sqrt{\frac{2\pi}{e}} \right) \beta_*(\mu, d) \right\} \quad (\text{Kapitel 6})$$

und

$$\beta_*(\mu, d) := \frac{2}{\mu} \ln \frac{1}{C_d^{(\text{Trotter})} \mu^d} \quad \text{fur alle } d \leq 23 \quad (\text{Kapitel 6})$$

oder

$$\beta_*(\mu, d) := \frac{2}{\mu} \max \left\{ \ln \frac{1}{C_d^{(\text{Trotter})} \mu^d}, X(d) \right\} \quad \text{fur alle } d \in \mathbb{N} \quad (\text{Kapitel 6})$$

Die in 1a) und 1b) aufgetauchte Funktion $X(d)$ der Dimension d des Gitters ist folgendermaen definiert:

$$X(d) = \begin{cases} e \approx 2,71828 & \text{falls } d = 1, 2. \\ \text{implizit definiert durch } X(d) = d \ln X(d) \text{ mit } X(d) \geq e & \text{falls } d = 3, 4, \dots \end{cases} \quad (3.69)$$

2)

$$\tilde{\alpha}_1(\mu, d) := \left(1 + \frac{1}{4d}\right) \frac{1}{(4d)^2} \frac{(1-\mu)}{(4d-\mu)} \frac{1}{8} \frac{|S_d|}{(2\pi)^d} \left(\mu/2\right)^{\frac{2+d}{2}} \quad (\text{Kapitel 5})$$

3)

$$L_o^{(FLU)}(\mu, d) := 4\pi d \frac{(2\pi)^d}{|S_d|} \left(2/\mu\right)^{\frac{2+d}{2}} < \infty \quad (\text{Kapitel 5})$$

Die in 2) und 3) aufgetauchte Funktion $|S_d|$ der Dimension d des Gitters ist das Volumen der d -dimensionalen Einheitskugel, namlich: $|S_d| = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2}+1)}$

4)

$$C_d^{(\text{FB})} := 4d^2 \quad (\text{Kapitel 4})$$

5)

$$\mathcal{F}(u, \mu, d) := \left[\frac{1}{2} \tilde{\alpha}_1(\mu, d) - \frac{C_d^{(\text{FB})}}{u \delta_{cr}(\mu, d) - \mu} \right] \quad (\text{Kapitel 3})$$

3.6 Phasendiagramm für das HFz-Hubbardmodell

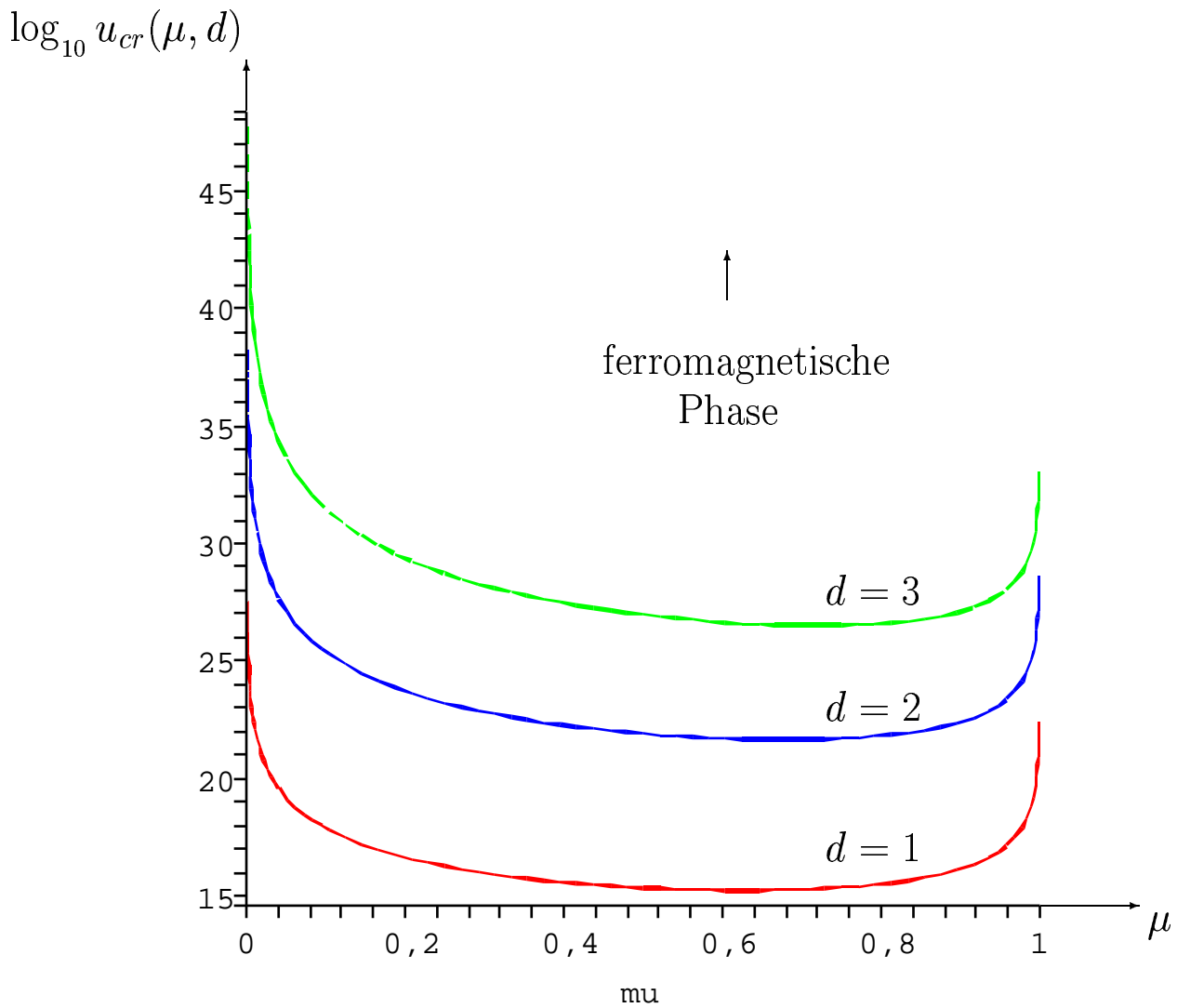


Abb.: Phasendiagramm für das HFz-Hubbardmodell.
Oberhalb jeder Kurve der jeweiligen Dimension ist die Existenz der ferromagnetischen Phase gesichert.

3.7 Diskussion des Phasendiagramms und Ergänzung zum Theorem Ferro

Ähnliche Phasendiagramme haben [Penn 66] ($d = 3$ HF-Hubbardmodell) und [Hirsch 85] ($d = 2$ HF-Hubbardmodell) erhalten. Diese zwei Studien haben eine ähnliche Kurve im Bereich $\mu \ll 1$ gezeigt, wobei solche Kurven eine Separation zwischen der ferromagnetischen Phase und der paramagnetischen Phase¹⁸ liefern.

Für $d \geq 3$ können wir das asymptotische Verhältnis $\mu \rightarrow 0 \Rightarrow u_{cr}(\mu, d) \rightarrow \infty$ in unserem Phasendiagramm durch das sogenannte Stoner-Kriterium für Ferromagnetismus im HF-Hubbardmodell erklärt. Dieses Kriterium lautet:

Zur Entstehung des Ferromagnetismus' ist es notwendig, dass

$$\rho(\epsilon_F) u \gg 1 \quad (3.70)$$

wobei $\rho(\epsilon_F)$ die Zustandsdichte an der Fermikante ϵ_F ist. In unserem Fall ist die Temperatur $T \rightarrow 0$ und daher ist ϵ_F gleich das chemische Potential μ . Diese Zustandsdichte ist in der Variablen μ gegeben durch (siehe [Faz 99]):

$$\rho(\mu) := \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 E^0}{\partial n^2} \right)^{-1} \quad (3.71)$$

Hierbei sind

$$n \equiv n_\Lambda(\mu, d) := \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{j=1:}^{|\Lambda|} 1_{[e_j(-\Delta-\mu) < 0]} \quad \text{und} \quad E^0 \equiv 2(-e_\Lambda)(\mu, d) := -\frac{2}{|\Lambda|} \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} e_j(-\Delta - \mu)$$

die Füllung oder Dichte für ein festes chemisches Potential μ bzw. die Minimum-Energie pro Gitterplatz des Hamiltonoperators $\hat{H} = \sum_{\substack{xy \in \Lambda \\ \sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}}} (-\Delta)_{xy} C_{x\sigma}^\dagger C_{y\sigma}$ für eine feste Dichte n . Der Faktor $\frac{1}{2}$ in (3.71) kommt wegen des Spins.

Da $n_\Lambda(\mu, d) \approx \mu^{d/2}$ (siehe Lemma 3.13) und $-e_\Lambda(n, d) \approx \mu^{\frac{d+2}{2}}$ (siehe Lemma 3.14) gilt, folgt nach (3.71), dass

$$\rho(\epsilon_F) = \rho(\mu) \approx \mu^{\frac{d-2}{2}} \quad (3.72)$$

Damit lautet das Stoner-Kriterium für Ferromagnetismus bezüglich μ (nicht mehr bzgl. $\rho(\epsilon_F)$):

$$\boxed{\mu^{\frac{d-2}{2}} u \gg 1 \quad \text{Qualitatives Stoner-Kriterium für } \mu \text{ und } u} \quad (3.73)$$

Dies erklärt für $d \geq 3$ das asymptotische Verhältnis des Phasendiagramms, wobei allerdings hier das HF- und nicht das HFz-Hubbardmodell betrachtet wurde.

¹⁸Paramagnetische Zustände sind diejenigen, die das Energiefunktional mit $u = 0$ minimieren. Sie haben die Energie $2E_{\text{ferro}}(\mu, d)$.
Bemerkte, dass $E_{\text{para}}(\mu, d) = 2E_{\text{ferro}}(\mu, d) \leq E_{\text{ferro}}(\mu, d) \leq 0$.

Andererseits können wir eine quantitative Version des Stoner-Kriteriums sowohl für das HF-Hubbardmodell als auch für das HFz-Hubbardmodell ableiten, die lautet:

Proposition 3.1. *(Ein quantitatives Stoner-Kriterium für Ferromagnetismus im HF- und im HFz-Hubbardmodell; für kleine Füllung entsteht der Ferromagnetismus nur mit sehr großer Kopplung ($d \geq 3$))*

Damit der Ferromagnetismus entsteht, muss folgendes Kriterium erfüllt werden:

$$\mu^{\frac{d-2}{2}} u \geq C_d^{(\text{Stoner})} \quad \text{mit} \quad C_d^{(\text{Stoner})} := \frac{2^{-4}}{|S_d|} \left(\frac{2\sqrt{2}}{\pi} \right)^d > 0 \quad (3.74)$$

*vorausgesetzt*¹⁹

$$L > L_o^{(en)}(\mu, d) := \max \left\{ L_o^{(e)}(\mu, d) = 4 \pi d \frac{|\mathbb{T}_d|}{|S_d|} \left(\frac{2}{\mu} \right)^{\frac{2+d}{2}}, L_o^{(n)}(\mu, d) = 2 d \left(\frac{4}{\mu} \right)^{\frac{d}{2}} \right\}$$

Der Beweis der Proposition 3.1 befindet sich im Unterkapitel 3.9.

Dieses Kriterium gilt als eine Ergänzung zum Theorem Ferro im folgenden Sinn: *Das Theorem Ferro bewältigt die schwierige Aufgabe, eine hinreichende Bedingung in u für die Entstehung des Ferromagnetismus' zu liefern. D.h. das Theorem Ferro liefert eine Kurve u_{cr} versus μ , wobei oberhalb dieser Kurve der Ferromagnetismus gesichert ist. Andererseits liefert die Proposition 3.1 eine notwendige Bedingung zur Entstehung des Ferromagnetismus'. D.h. die Proposition 3.1 liefert eine Kurve u_{cr} versus μ , unterhalb welcher die Abwesenheit des Ferromagnetismus' gesichert ist (siehe nächsten Graphen).*

¹⁹Hierbei ist $|S_d|$ das Volumen der d -dimensionalen Einheitskugel und $|\mathbb{T}_d| = (2\pi)^d$ (Torus).

Phasendiagramm für das dreidimensionale HFz-Hubbardmodell; Vergleich mit dem Stoner-Kriterium

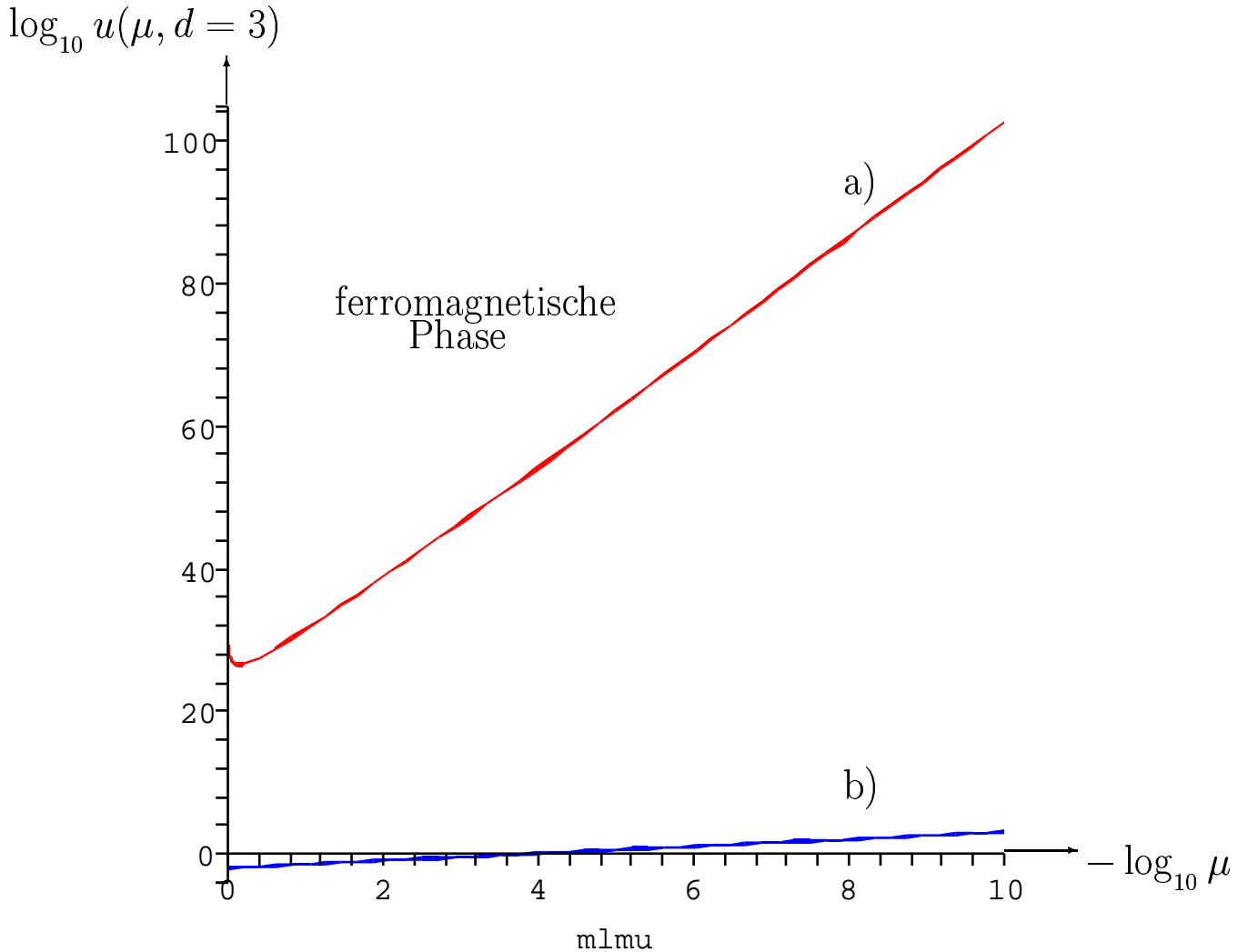


Abb.: a) Graph $\log_{10} u_{cr}(\mu, d = 3)$ versus $-\log_{10} \mu$.
Oberhalb dieser Kurve ist die Anwesenheit der ferromagnetischen Phase gesichert.

b) Graph $\log_{10} u_S(\mu, d = 3)$ versus $-\log_{10} \mu$.
Unterhalb dieser Kurve ist die Abwesenheit der ferromagnetischen Phase gesichert.

Hierbei ist $u_S(\mu, d) = C_d^{(\text{Stoner})} \mu^{\frac{2-d}{2}}$

Im Folgenden vergleichen wir die Funktion $u_{cr}(\mu, d)$ (siehe Unterkapitel 3.5) mit der Funktion $\tilde{\alpha}_1(\mu, d)$ (siehe Kapitel 5).

Interessanterweise sind die Kurven $\tilde{\alpha}_1(\mu, d)$ versus μ für $d = 1, 2$ und 3 ähnlich wie die Kurven $u_{cr}(\mu, d)$ versus μ für die jeweilige Dimension d . Dies ist im nächsten Graphen präsentiert. Um eine quantitative Information dieser Ähnlichkeit zu bekommen, haben wir den Graphen der Kurve $\frac{\log_{10} u_{cr}(\mu, d)}{-\log_{10} \tilde{\alpha}_1(\mu, d)}$ versus μ für die jeweilige Dimension d angefertigt (siehe den übernächsten Graphen). In diesem Graphen ist es interessant zu bemerken, dass diesmal die Kurven mit der Dimension d abnehmen!²⁰ Wegen dieser Tatsache können wir für praktische Zwecke $u_{cr}(\mu, d)$ folgendermaßen setzen:

$$u_{cr}(\mu, d) = \left(\frac{1}{\tilde{\alpha}_1(\mu, d)} \right)^{3.62} \quad \text{für alle } 0 < \mu < 1 \text{ und } d = 1, 2, 3.$$

Diese Annahme für $u_{cr}(\mu, d)$ ist nicht nur praktisch, sondern auch tieflegend, da $\tilde{\alpha}_1(\mu, d)$ eine schöne Interpretation als Lokalisationsfehler hat (siehe Kapitel 5).

²⁰Leider wurde später festgestellt, dass die Kurven $\frac{\log_{10} u_{cr}(\mu, d)}{-\log_{10} \tilde{\alpha}_1(\mu, d)}$ versus μ nur von $d = 1$ bis $d = 4$ mit der Dimension d tatsächlich abnehmen.

Graph der Funktion $-\log_{10} \tilde{\alpha}_1(\mu, d)$

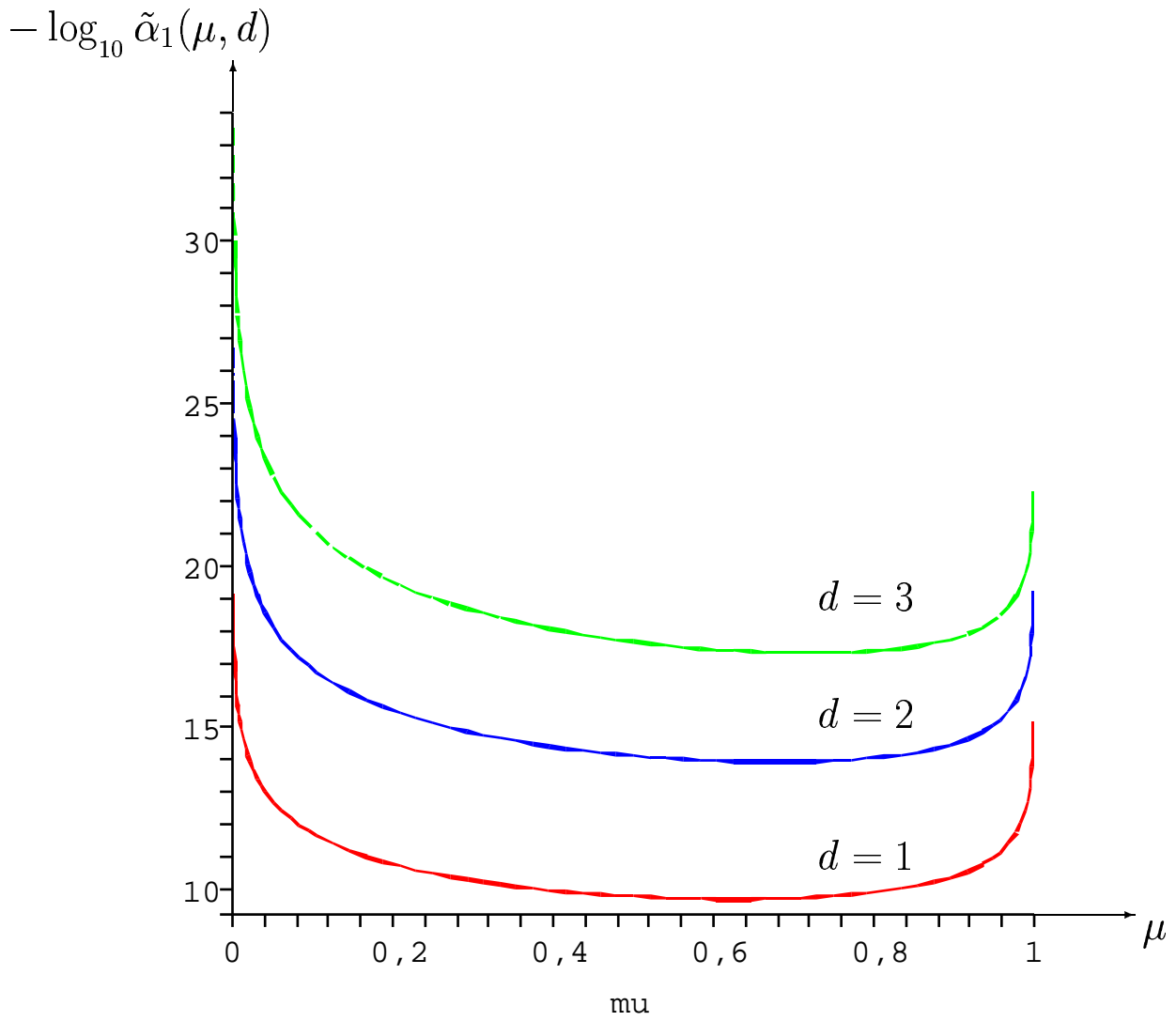


Abb.: Graph $-\log_{10} \tilde{\alpha}_1(\mu, d)$ versus μ .

Graph der Funktion $\frac{\log_{10} u_{cr}(\mu, d)}{-\log_{10} \tilde{\alpha}_1(\mu, d)}$

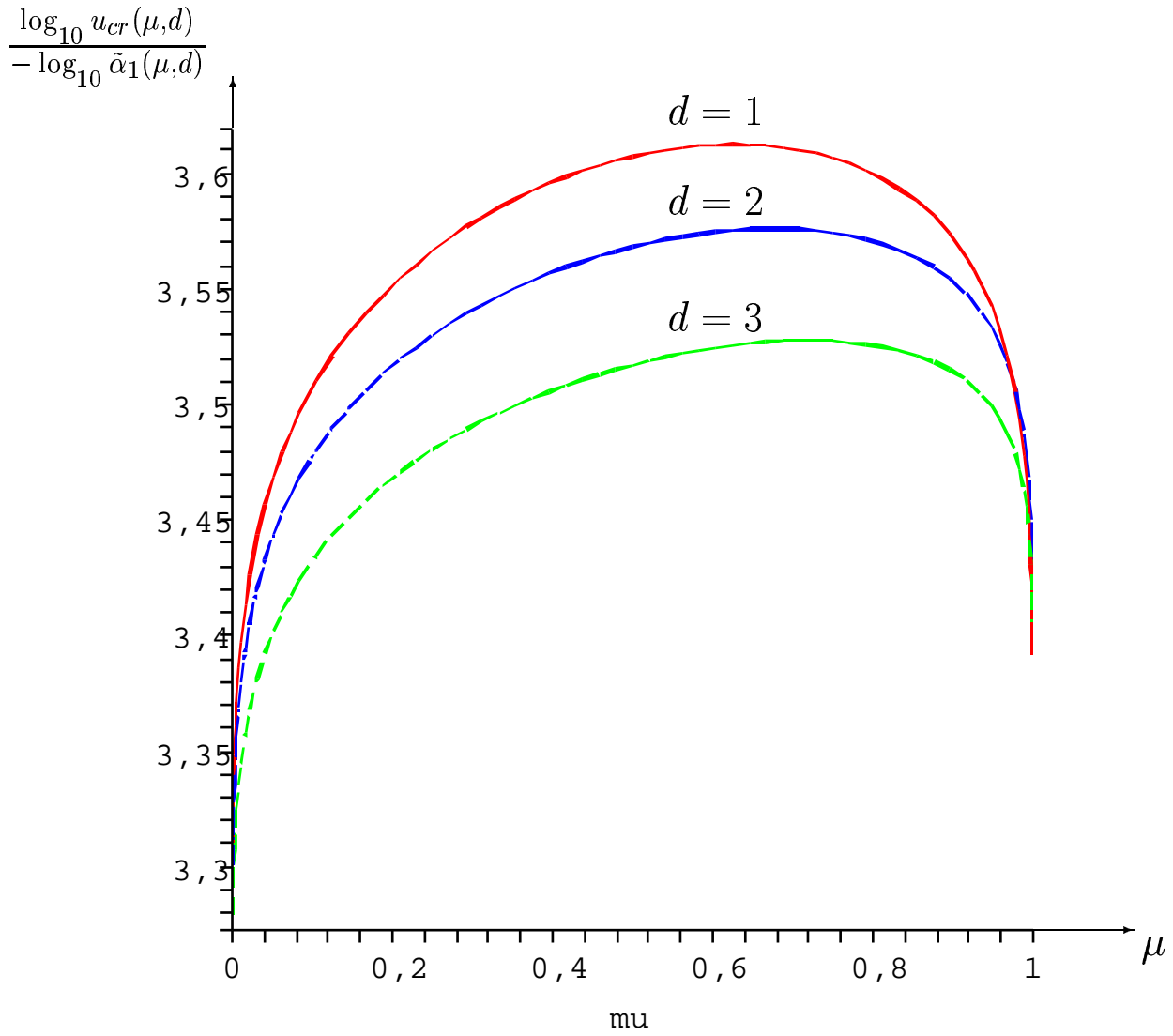


Abb.: Graph $\frac{\log_{10} u_{cr}(\mu, d)}{-\log_{10} \tilde{\alpha}_1(\mu, d)}$ versus μ .

3.8 Beweis einiger Lemmata für das Theorem 3.1

Der Beweis des Theorems 3.1 beruht auf den Lemmata 3.1 bis 3.12. In diesem Unterkapitel werden die Lemmata 3.1, 3.2, 3.4, 3.6, 3.10, 3.11 und 3.12 bewiesen. Das Lemma 3.5 und das Lemma 3.7 wurden schon im Unterkapitel 3.4 bewiesen. Die übrigen Lemmata 3.3, 3.8 und 3.9 werden jeweils in einem eigenen Kapitel bewiesen und zwar in den Kapiteln 4, 5 bzw. 6.

Beweis des Lemmas 3.1:

Zuerst zeigen wir, dass die Minimumwerte von $\widehat{\text{MP}}$ und MP gleich sind.

$$\begin{aligned}
E_\Lambda^u(\mu) &= \min \{ \mathcal{E}_\Lambda^{u,\mu}(\gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow) \mid (\gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow) \in K(\Lambda) \times K(\Lambda) \} \\
&= \min \left\{ \text{Tr}_\Lambda \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1}) \gamma_\uparrow \} + \text{Tr}_\Lambda \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1}) \gamma_\downarrow \} + u \cdot \sum_{x \in \Lambda} D(\gamma_\uparrow)(x) D(\gamma_\downarrow)(x) \mid (\gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow) \in K(\Lambda) \times K(\Lambda) \right\} \\
&= \min \left\{ \text{Tr}_\Lambda \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1}) \gamma_\uparrow \} + \text{Tr}_\Lambda \left\{ (-\Delta - \mu \mathbf{1} + u \sum_{x \in \Lambda} D(\gamma_\uparrow)) \gamma_\downarrow \right\} \mid (\gamma_\uparrow, \gamma_\downarrow) \in K(\Lambda) \times K(\Lambda) \right\} \\
&= \min_{\gamma_\uparrow \in K(\Lambda)} \left\{ \min_{\gamma_\downarrow \in K(\Lambda)} \left\{ \text{Tr}_\Lambda \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1}) \gamma_\uparrow \} + \text{Tr}_\Lambda \left\{ (-\Delta - \mu \mathbf{1} + u \sum_{x \in \Lambda} D(\gamma_\uparrow)) \gamma_\downarrow \right\} \right\} \right\} \\
&= \min_{\gamma_\uparrow \in K(\Lambda)} \left\{ \text{Tr}_\Lambda \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1}) \gamma_\uparrow \} + \min_{\gamma_\downarrow \in K(\Lambda)} \left\{ \text{Tr}_\Lambda \left\{ (-\Delta - \mu \mathbf{1} + u \sum_{x \in \Lambda} D(\gamma_\uparrow)) \gamma_\downarrow \right\} \right\} \right\} \\
&= \min_{\gamma_\uparrow \in K(\Lambda)} \left\{ \text{Tr}_\Lambda \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1}) \gamma_\uparrow \} + \text{Tr}_\Lambda \left\{ [-\Delta - \mu \mathbf{1} + u \sum_{x \in \Lambda} D(\gamma_\uparrow)]_- \right\} \right\} \\
&= \min_{\xi \in K(\Lambda)} \hat{\mathcal{E}}_\Lambda^{u,\mu}(\xi) = \hat{E}_\Lambda^u(\mu)
\end{aligned}$$

Also gilt

$$E_\Lambda^u(\mu) = \hat{E}_\Lambda^u(\mu) \quad (3.75)$$

Sei nun ξ_* ein Minimierender von $\widehat{\text{MP}}$. D. h.

$$\min_{0 \leq \xi \leq 1} \hat{\mathcal{E}}_\Lambda^{u,\mu}(\xi) = \hat{\mathcal{E}}_\Lambda^{u,\mu}(\xi_*) = \hat{E}_\Lambda^u(\mu), \quad (3.76)$$

dann folgt:

$$\begin{aligned}
E_\Lambda^u(\mu) &= \hat{E}_\Lambda^u(\mu) \quad (\text{nach 3.75}) \\
&= \hat{\mathcal{E}}_\Lambda^{u,\mu}(\xi_*) \quad (\text{nach 3.76}) \\
&= \text{Tr}_\Lambda \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1}) \xi_* \} + \text{Tr}_\Lambda \{ [-\Delta - \mu \mathbf{1} + u D(\xi_*)]_- \} \\
&= \text{Tr}_\Lambda \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1}) \xi_* \} + \text{Tr}_\Lambda \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1} + u D(\xi_*)) \mathbf{1}_{[-\Delta - \mu \mathbf{1} + u D(\xi_*) < 0]} \} \\
&= \text{Tr}_\Lambda \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1}) \xi_* \} + \text{Tr}_\Lambda \{ (-\Delta - \mu \mathbf{1}) \mathbf{1}_{[-\Delta - \mu \mathbf{1} + u D(\xi_*) < 0]} \} + u \sum_{x \in \Lambda} D(\xi_*)(x) D(\mathbf{1}_{[-\Delta - \mu \mathbf{1} + u D(\xi_*) < 0]})(x) \\
&= \mathcal{E}_\Lambda^{u,\mu}(\xi_*, \mathbf{1}_{[-\Delta - \mu \mathbf{1} + u D(\xi_*) < 0]})
\end{aligned}$$

D. h.

$$E_{\Lambda}^u(\mu) = \mathcal{E}_{\Lambda}^{u,\mu}(\xi_*, \mathbf{1}_{[-\Delta - \mu \mathbf{1} + u D(\xi_*) < 0]}) \quad (3.77)$$

Aus (3.77) folgt unmittelbar, dass $(\xi_*, \mathbf{1}_{[-\Delta - \mu \mathbf{1} + u D(\xi_*) < 0]}) \in K(\Lambda) \times K(\Lambda)$ ein Minimierender von $\mathcal{E}_{\Lambda}^{u,\mu}$ ist.

Da $\mathcal{E}_{\Lambda}^{u,\mu}(a, b) = \mathcal{E}_{\Lambda}^{u,\mu}(b, a)$ für alle $a, b \in K(\Lambda)$ gilt, folgt, dass auch $(\mathbf{1}_{[-\Delta - \mu \mathbf{1} + u D(\xi_*) < 0]}, \xi_*)$ ein Minimierender von $\mathcal{E}_{\Lambda}^{u,\mu}$ ist. Damit ist (a) bewiesen.

Der Beweis zu (b) folgt ähnlicherweise. Nämlich:

Sei nun (a_*, b_*) ein Minimierender von MP. D. h.

$$\min_{\mathbf{0} \leq a, b \leq \mathbf{1}} \mathcal{E}_{\Lambda}^{u,\mu}(a, b) = \mathcal{E}_{\Lambda}^{u,\mu}(a_*, b_*) = E_{\Lambda}^u(\mu), \quad (3.78)$$

dann folgt:

$$\begin{aligned} \widehat{E}_{\Lambda}^u(\mu) &= E_{\Lambda}^u(\mu) \quad (\text{nach 3.75}) \\ &= \mathcal{E}_{\Lambda}^{u,\mu}(a_*, b_*) \quad (\text{nach 3.78}) \\ &= \text{Tr}_{\Lambda}\{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) a_*\} + \text{Tr}_{\Lambda}\{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) b_*\} + u \sum_{x \in \Lambda} D(a_*)(x) D(b_*)(x) \\ &= \text{Tr}_{\Lambda}\{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) a_*\} + \text{Tr}_{\Lambda}\{(-\Delta - \mu \mathbf{1} + u D(a_*)) b_*\} \\ &\geq \text{Tr}_{\Lambda}\{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) a_*\} + \text{Tr}_{\Lambda}\{[-\Delta - \mu \mathbf{1} + u D(a_*)]_-\} \\ &= \widehat{\mathcal{E}}_{\Lambda}^{u,\mu}(a_*) \end{aligned}$$

D. h.

$$\widehat{E}_{\Lambda}^u(\mu) \geq \widehat{\mathcal{E}}_{\Lambda}^{u,\mu}(a_*) \quad (3.79)$$

Aus (3.79) folgt unmittelbar, dass $a_* \in K(\Lambda)$ ein Minimierender von $\widehat{\mathcal{E}}_{\Lambda}^{u,\mu}$ ist.

Analog

$$\begin{aligned} \widehat{E}_{\Lambda}^u(\mu) &= E_{\Lambda}^u(\mu) \quad (\text{nach 3.75}) \\ &= \mathcal{E}_{\Lambda}^{u,\mu}(a_*, b_*) \quad (\text{nach 3.78}) \\ &= \text{Tr}_{\Lambda}\{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) a_*\} + \text{Tr}_{\Lambda}\{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) b_*\} + u \sum_{x \in \Lambda} D(a_*)(x) D(b_*)(x) \\ &= \text{Tr}_{\Lambda}\{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) b_*\} + \text{Tr}_{\Lambda}\{(-\Delta - \mu \mathbf{1} + u D(b_*)) a_*\} \\ &\geq \text{Tr}_{\Lambda}\{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) b_*\} + \text{Tr}_{\Lambda}\{[-\Delta - \mu \mathbf{1} + u D(b_*)]_-\} \\ &= \widehat{\mathcal{E}}_{\Lambda}^{u,\mu}(b_*) \end{aligned}$$

D. h.

$$\widehat{E}_{\Lambda}^u(\mu) \geq \widehat{\mathcal{E}}_{\Lambda}^{u,\mu}(b_*) \quad (3.80)$$

Aus (3.80) folgt unmittelbar, dass $b_* \in K(\Lambda)$ ein Minimierer von $\widehat{\mathcal{E}}_{\Lambda}^{u,\mu}$ ist. □

Beweis des Lemmas 3.2:

Um die Notation zu vereinfachen, führen wir zum Beweis dieses Lemmas $P := P_{\Omega, \delta, \xi}$ und $Q := P_{\Omega^c, \delta, \xi}$ ein. Selbstverständlich gilt $P + Q = \mathbf{1}$ und $PQ = \mathbf{0} = QP$.

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}_\Lambda \{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) \xi\} &= \mathrm{Tr}_\Lambda \{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) (Q + P) \xi (Q + P)\} \\
&= \mathrm{Tr}_\Lambda \{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) Q \xi Q\} + \mathrm{Tr}_\Lambda \{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) P \xi P\} \\
&\quad + \mathrm{Tr}_\Lambda \{(-t) Q \xi P\} + \mathrm{Tr}_\Lambda \{(-t) P \xi Q\} \quad (\text{Bem.: } -\Delta = 2d\mathbf{1} - t) \\
&= \mathrm{Tr}_\Lambda \{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) Q \xi Q\} + \mathrm{Tr}_\Lambda \{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) P \xi P\} + 2\mathrm{Re}\{\mathrm{Tr}_\Lambda \{(-t) Q \xi P\}\} \\
&\geq \mathrm{Tr}_\Lambda \{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) Q \xi Q\} - \mu \mathrm{Tr}_\Lambda \{P \xi P\} + 2\mathrm{Re}\{\mathrm{Tr}_\Lambda \{(-t) Q \xi P\}\} \quad (\text{da } -\Delta \geq \mathbf{0}) \\
&= \mathrm{Tr}_\Lambda \{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) Q \xi Q\} - \mu \sum_{x \in \Omega} D(\xi)(x) + 2\mathrm{Re}\{\mathrm{Tr}_\Lambda \{(-t) Q \xi P\}\} \\
&= \mathrm{Tr}_\Lambda \{Q (-\Delta - \mu \mathbf{1}) Q \xi\} - \mu \sum_{x \in \Omega} D(\xi)(x) + 2\mathrm{Re}\{\mathrm{Tr}_\Lambda \{(-t) Q \xi P\}\} \quad (\text{n. Zyklizität der Spur}) \\
&\geq \mathrm{Tr}_\Lambda \{[Q (-\Delta - \mu \mathbf{1}) Q]_-\} - \mu \sum_{x \in \Omega} D(\xi)(x) + 2\mathrm{Re}\{\mathrm{Tr}_\Lambda \{(-t) Q \xi P\}\} \quad (3.81)
\end{aligned}$$

Behauptung 3.1. *Der vorletzte Summand in (3.81) lässt sich folgendermaßen nach unten abschätzen:*

Für alle $M \in \mathbb{N}$ gilt Folgendes:

$$-\mu \sum_{x \in \Omega} D(\xi)(x) \geq -\mu G_d(M) \delta |\partial\Omega| - \mu \sum_{x \in \Omega_M} D(\xi)(x) \quad (3.82)$$

Behauptung 3.2. *Der letzte Summand in (3.81) lässt sich folgendermaßen nach unten abschätzen:*

$$2\mathrm{Re}\{\mathrm{Tr}_\Lambda \{(-t) Q \xi P\}\} \geq -4d\sqrt{\delta} |\partial\Omega| \quad (3.83)$$

Nach (3.81), (3.82) und (3.83) folgt

$$\mathrm{Tr}_\Lambda \{(-\Delta - \mu \mathbf{1}) \xi\} \geq \mathrm{Tr}_\Lambda \{[Q (-\Delta - \mu \mathbf{1}) Q]_-\} - (\mu G_d(M) \delta + 4d\sqrt{\delta}) |\partial\Omega| - \sum_{x \in \Omega_M} D(\xi)(x),$$

was bis auf Behauptungen 3.1 und 3.2 den Beweis des Lemmas 3.2 schließt. Unten beweisen wir diese beiden Behauptungen.

Beweis der Behauptung 3.1:

Zuerst zerlegen wir Ω in $\Omega \setminus \Omega_M$ und Ω_M :

$$-\mu \sum_{x \in \Omega} D(\xi)(x) = -\mu \sum_{x \in \Omega \setminus \Omega_M} D(\xi)(x) - \mu \sum_{x \in \Omega_M} D(\xi)(x) \quad (3.84)$$

Der erste Summand in (3.84) schätzen wir folgendermaßen nach unten ab:

$$-\mu \sum_{x \in \Omega \setminus \Omega_M} D(\xi)(x) \geq -\mu \delta \sum_{x \in \Omega \setminus \Omega_M} 1 = -\mu \delta |\Omega \setminus \Omega_M| \quad (\text{da } x \in \Omega \Rightarrow D(\xi)(x) < \delta)$$

D. h.

$$-\mu \sum_{x \in \Omega} D(\xi)(x) \geq -\mu \delta |\Omega \setminus \Omega_M| - \mu \sum_{x \in \Omega_M} D(\xi)(x) \quad (3.85)$$

Nach Definition von Ω_M gilt

$$\Omega \setminus \Omega_M = \{x \in \Omega \mid \text{dist}(x, \Omega^c) \leq M\} \quad (3.86)$$

Behauptung 3.3. (obere Schranke mit Randterm an $|\Omega \setminus \Omega_M|$)

Es gilt Folgendes:

$$\Omega \setminus \Omega_M = \{x \in \Omega \mid \text{dist}(x, \Omega^c) \leq M\} \subset \bigcup_{y \in \partial\Omega} B_{r \leq M-1}^{(1)}(y) \quad (3.87)$$

Hierbei ist

$$B_{r \leq R}^{(1)}(y) := \{z \in \Lambda \mid \text{dist}_1(z, y) \leq R\} \quad (3.88)$$

Weiterhin gilt

$$|\Omega \setminus \Omega_M| \leq |\partial\Omega| |B_{r \leq M-1}^{(1)}(0)| \leq |\partial\Omega| G_d(M) \quad (3.89)$$

mit $G_d(M)$ eine obere Schranke an $|B_{r \leq M-1}^{(1)}(0)|$, die z.B. folgendermaßen ausgewählt werden kann:

$$G_d(M) := |B_{r \leq M-1}^{(1)}(0)| = \begin{cases} 1 + 2(M-1), & \text{falls } d = 1 \\ 1 + 4 \frac{(M-1)M}{2}, & \text{falls } d = 2 \\ 1 + 2(M-1) + 4 \frac{(M-1)M(2M-1)}{6}, & \text{falls } d = 3 \end{cases} \quad (3.90)$$

oder kann man einfach

$$G_d(M) := (2M-1)^d = |B_{r \leq M-1}^{(\infty)}(0)| \gg |B_{r \leq M-1}^{(1)}(0)| \quad (3.91)$$

als eine grobere Schranke setzen.

Nach (3.89) folgt

$$-\mu \delta |\Omega \setminus \Omega_M| \geq -\mu \delta G_d(M) |\partial\Omega|,$$

was mit (3.85) die Behauptung 3.1 beweist.

△

Beweis der Behauptung 3.2: Erinnern wir uns, dass hier $P := P_\Omega$ und $Q := P_{\Omega^c}$ sind.

$$\begin{aligned}
2\operatorname{Re}\{ \operatorname{Tr}_\Lambda\{(-t) Q \xi P\} \} &= -2\operatorname{Re}\{ \operatorname{Tr}_\Lambda\{t Q \xi P\} \} = -2\operatorname{Re}\left\{ \sum_{\substack{x,y,z,w \\ \in \Lambda}} t_{xy} Q_{yz} \xi_{zw} P_{wx} \right\} \\
&= -2\operatorname{Re}\left\{ \sum_{\substack{y=z \in \Omega^c \\ x=w \in \Omega}} t_{xy} \xi_{zw} \right\} = -2\operatorname{Re}\left\{ \sum_{\substack{y=z \in \Omega^c \\ x=w \in \Omega}} t_{xy} \xi_{yx} \right\} \\
&= -2\operatorname{Re}\left\{ \sum_{\substack{x,y \in \Lambda: \\ |x-y|=1}} \delta_{[y \in \Omega^c]} \xi_{yx} \delta_{[x \in \Omega]} \right\} = -2 \sum_{\substack{x,y \in \Lambda: \\ |x-y|=1}} \delta_{[y \in \Omega^c]} \operatorname{Re}\{ \xi_{yx} \} \delta_{[x \in \Omega]} \\
&\geq -2 \sum_{\substack{x,y \in \Lambda: \\ |x-y|=1}} \delta_{[y \in \Omega^c]} |\xi_{yx}| \delta_{[x \in \Omega]}
\end{aligned}$$

Andererseits nach Cauchy-Schwarz-Ungleichung

$$\begin{aligned}
\delta_{[y \in \Omega^c]} |\xi_{yx}| \delta_{[x \in \Omega]} &= \delta_{[y \in \Omega^c]} |\langle y | \xi x \rangle| \delta_{[x \in \Omega]} \leq \delta_{[y \in \Omega^c]} \sqrt{\langle y | y \rangle} \sqrt{\langle x | \xi x \rangle} \delta_{[x \in \Omega]} \quad (\text{nach CS-Ungl.}) \\
&= \delta_{[y \in \Omega^c]} 1 \sqrt{\langle x | \xi^2 x \rangle} \delta_{[x \in \Omega]} \leq \delta_{[y \in \Omega^c]} \sqrt{\langle x | \xi x \rangle} \delta_{[x \in \Omega]} \quad (\text{da } \xi^2 \leq \xi, \text{ weil } \mathbf{0} \leq \xi \leq \mathbf{1}) \\
&\leq \delta_{[y \in \Omega^c]} \sqrt{\delta} \delta_{[x \in \Omega]} \quad (\text{nach Definition von } \Omega = \Omega_{\delta, \xi})
\end{aligned}$$

Also gilt

$$2\operatorname{Re}\{ \operatorname{Tr}_\Lambda\{(-t) Q \xi P\} \} \geq -2\sqrt{\delta} \sum_{\substack{x,y \in \Lambda: \\ |x-y|=1}} \delta_{[y \in \Omega^c]} \delta_{[x \in \Omega]} \quad (3.92)$$

Andererseits

$$\begin{aligned}
\sum_{\substack{x,y \in \Lambda: \\ |x-y|=1}} \delta_{[y \in \Omega^c]} \delta_{[x \in \Omega]} &= \sum_{\substack{x,e \in \Lambda: \\ |e|=1}} \delta_{[x+e \in \Omega^c]} \delta_{[x \in \Omega]} \quad (\text{setze } y = x + e) \\
&= \sum_{x \in \partial\Omega} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} \delta_{[x+e \in \Omega^c]} \quad (\text{nach Definition von } \partial\Omega) \\
&\leq \sum_{x \in \partial\Omega} \#\{x + e \mid e \in \Lambda \text{ und } |e| = 1\} = \sum_{x \in \partial\Omega} 2d = 2d |\partial\Omega|
\end{aligned}$$

Also gilt

$$2\operatorname{Re}\{ \operatorname{Tr}_\Lambda\{(-t) Q \xi P\} \} \geq -4d\sqrt{\delta} |\partial\Omega| \quad (3.93)$$

△

Beweis der Behauptung 3.3:

Sei $z \in \Omega \setminus \Omega_M = \{x \in \Omega \mid \text{dist}(x, \Omega^c) \leq M\}$, dann existiert ein $w \in \Omega^c$, so dass $\text{dist}_1(z, w) \leq M$ und daher existiert auch ein $y \in \partial\Omega$, so dass $\text{dist}_1(z, y) = \text{dist}_1(z, w) - 1 \leq M - 1$. D.h. $z \in B_{r \leq M-1}^{(1)}(y)$ und daher $z \in \cup_{y \in \partial\Omega} B_{r \leq M-1}^{(1)}(y)$. Dies beweist (3.87).

Der Beweis von (3.91) ist trivial und der Beweis von (3.90) beruht auf folgender Tatsache:

$$|B_{r \leq N, d}^{(1)}(0)| = 1 + \sum_{n=1}^N |B_{r=n, d}^{(1)}(0)| \quad (3.94)$$

und

$$|B_{r=n, d}^{(1)}(0)| = \begin{cases} 2 & \text{falls } d = 1; \\ 2 \sum_{m=0}^{n-1} |B_{r=m, d-1}^{(1)}(0)| + |B_{r=n, d-1}^{(1)}(0)| & \text{falls } d \geq 2; \end{cases} \quad (3.95)$$

mit $|B_{r=0, d}^{(1)}(0)| = 1$ für alle $d \in \mathbb{N}$. Damit beenden wir den Beweis der Behauptung 3.3.

△

Und damit beenden wir auch den Beweis des Lemmas 3.2.

□

Beweis des Lemmas 3.4:

Seien $0 < \delta < 1$, $0 \leq \xi \leq 1$, $\mu > 0$, und $u > \mu/\delta$.

Ist $x \in \Omega_{\delta,\xi}$, dann treten nach Definition von $\tilde{D}(\xi, \mu, u)(x) := \min \{ D(\xi)(x), \frac{\mu}{2u} \}$ die folgenden zwei Fälle auf:

1. Fall: $\tilde{D}(\xi, \mu, u)(x) = D(\xi)(x)$

In diesem Fall folgt, dass

$$\begin{aligned} u \tilde{D}(\xi, \mu, u)(x) &= u D(\xi)(x) \\ &\geq \frac{\mu}{\delta} D(\xi)(x) \quad (\text{nach Voraussetzung}) \quad u > \mu/\delta \\ &\geq \frac{\mu}{2\delta} D(\xi)(x) \end{aligned}$$

2. Fall: $\tilde{D}(\xi, \mu, u)(x) = \frac{\mu}{2u}$

Wiederum treten zwei Fälle auf:

2.1. Unterfall: $D(\xi)(x) \neq 0$, dann folgt

$$\begin{aligned} \tilde{D}(\xi, \mu, u)(x) &= \tilde{D}(\xi, \mu, u)(x) \frac{D(\xi)(x)}{D(\xi)(x)} \\ &\geq \tilde{D}(\xi, \mu, u)(x) \frac{D(\xi)(x)}{\delta} \quad (\text{nach Voraussetzung}) \quad x \in \Omega_{\delta,\xi} \Rightarrow D(\xi)(x) < \delta \\ &= \frac{\mu}{2u} \frac{D(\xi)(x)}{\delta} \quad \text{da } \tilde{D}(\xi, \mu, u)(x) = \frac{\mu}{2u} \text{ (wir befinden uns im 2. Fall)} \\ &= \frac{\mu}{2u\delta} D(\xi)(x) \end{aligned}$$

D. h.

$$u \tilde{D}(\xi, \mu, u)(x) \geq \frac{\mu}{2\delta} D(\xi)(x)$$

2.2. Unterfall: $D(\xi)(x) = 0$, dann folgt unmittelbar $u \tilde{D}(\xi, \mu, u)(x) \geq 0 = \frac{\mu}{2\delta} D(\xi)(x)$

Also gilt in allen Fällen $u \tilde{D}(\xi, \mu, u)(x) \geq \frac{\mu}{2\delta} D(\xi)(x)$ und damit beenden wir auch den Beweis des Lemmas 3.4. \square

Beweis des Lemmas 3.6:

Sei $u > \mu/\delta$. Nun ist jedoch

$$\begin{aligned} \text{Tr}_\Lambda \{ [P_{\Omega_{\delta,\xi}} (-\Delta - \mu \mathbf{1} + u \tilde{D}(\xi, \mu, u)) P_{\Omega_{\delta,\xi}}]_- \} &= \\ \text{Tr}_\Lambda \{ P_{\Omega_{\delta,\xi}} (-\Delta - \mu \mathbf{1} + u \tilde{D}(\xi, \mu, u)) P_{\Omega_{\delta,\xi}} \mathbf{1}_{[P_{\Omega_{\delta,\xi}} (-\Delta - \mu \mathbf{1} + u \tilde{D}(\xi, \mu, u)) P_{\Omega_{\delta,\xi}} < 0]} \} &\geq \\ \text{Tr}_\Lambda \{ [P_{\Omega_{\delta,\xi}} (-\Delta - \mu \mathbf{1}) P_{\Omega_{\delta,\xi}}]_- \} + u \text{Tr}_\Lambda \{ P_{\Omega_{\delta,\xi}} \tilde{D}(\xi, \mu, u) P_{\Omega_{\delta,\xi}} \mathbf{1}_{[P_{\Omega_{\delta,\xi}} (-\Delta - \mu \mathbf{1} + u \tilde{D}(\xi, \mu, u)) P_{\Omega_{\delta,\xi}} < 0]} \} &= \\ \text{Tr} \{ [P_{\Omega_{\delta,\xi}} (-\Delta - \mu \mathbf{1}) P_{\Omega_{\delta,\xi}}]_- \} + u \cdot \sum_{x \in \Omega_{\delta,\xi}} \tilde{D}(\xi, \mu, u)(x) \langle \delta_x | \mathbf{1}_{[P_{\Omega_{\delta,\xi}} (-\Delta - \mu \mathbf{1} + u \tilde{D}(\xi, \mu, u)) P_{\Omega_{\delta,\xi}} < 0]} \delta_x \rangle &\geq \\ \text{Tr} \{ [P_{\Omega_{\delta,\xi}} (-\Delta - \mu \mathbf{1}) P_{\Omega_{\delta,\xi}}]_- \} + u \cdot \sum_{x \in \Omega_{\delta,\xi,M}} \tilde{D}(\xi, \mu, u)(x) \langle \delta_x | \mathbf{1}_{[P_{\Omega_{\delta,\xi}} (-\Delta - \mu \mathbf{1} + u \tilde{D}(\xi, \mu, u)) P_{\Omega_{\delta,\xi}} < 0]} \delta_x \rangle & \end{aligned}$$

D. h.

$$\begin{aligned}
& \text{Tr}_\Lambda \{ [P_{\Omega_{\delta,\xi}} (-\Delta - \mu \mathbf{1} + u \tilde{D}(\xi, \mu, u)) P_{\Omega_{\delta,\xi}}]_- \} \geq \\
& \text{Tr} \{ [P_{\Omega_{\delta,\xi}} (-\Delta - \mu \mathbf{1}) P_{\Omega_{\delta,\xi}}]_- \} + u \cdot \sum_{x \in \Omega_{\delta,\xi,M}} \tilde{D}(\xi, \mu, u)(x) \langle \delta_x | \mathbf{1}_{[P_{\Omega_{\delta,\xi}}(-\Delta - \mu \mathbf{1} + u \tilde{D}(\xi, \mu, u)) P_{\Omega_{\delta,\xi}} < 0]} \delta_x \rangle
\end{aligned} \tag{3.96}$$

Wegen $x \in \Omega_{\delta,\xi,M} \subset \Omega_{\delta,\xi}$ und $u > \mu/\delta$ erhalt man nach (3.25) $u \tilde{D}(\xi, \mu, u)(x) \geq \frac{\mu}{2\delta} D(\xi)(x)$ und daher gilt nach (3.96) Folgendes:

$$\begin{aligned}
& \text{Tr}_\Lambda \{ [P_{\Omega_{\delta,\xi}} (-\Delta - \mu \mathbf{1} + u \tilde{D}(\xi, \mu, u)) P_{\Omega_{\delta,\xi}}]_- \} \geq \\
& \text{Tr} \{ [P_{\Omega_{\delta,\xi}} (-\Delta - \mu \mathbf{1}) P_{\Omega_{\delta,\xi}}]_- \} + \frac{\mu}{2\delta} \sum_{x \in \Omega_{\delta,\xi,M}} D(\xi)(x) \langle \delta_x | \mathbf{1}_{[P_{\Omega_{\delta,\xi}}(-\Delta - \mu \mathbf{1} + u \tilde{D}(\xi, \mu, u)) P_{\Omega_{\delta,\xi}} < 0]} \delta_x \rangle,
\end{aligned} \tag{3.97}$$

was das Lemma 3.6 beweist. □

Beweis des Lemmas 3.10 :

Ist $x \in \Omega_{\delta,\xi,M=dM_o}$, dann folgt nach Definition von $\Omega_{\delta,\xi,M}$, dass

$$B_{r \leq dM_o}^{(1)}(x) \subset \Omega_{\delta,\xi,M=dM_o} \tag{3.98}$$

Andererseits gilt

$$B_{r \leq M_o}^{(\infty)}(x) \subset B_{r \leq dM_o}^{(1)}(x) \tag{3.99}$$

Nach (3.99) und (3.98) folgt unmittelbar $\text{Box}(x) \equiv B_{r \leq M_o}^{(\infty)} \subset \Omega_{\delta,\xi}$, was das Lemma 3.10 beweist. □

Beweis des Lemmas 3.11:

Da $D(\xi)(x) \geq 0$ ist, reicht es zu zeigen, dass $\mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu, d](x) - 2\delta > 0$, wenn $x \in \Omega_{\delta,\xi,M=dM_o}$ und $0 < \delta < \delta_{cr1}(\mu, d)$ mit $\delta_{cr1}(\mu, d) := \frac{1}{3} \mathcal{A}(\mu, d)$ gelten.

Tatsachlich:

$$x \in \Omega_{\delta,\xi,M=dM_o} \xrightarrow{\text{Nach Lemma 3.10}} \text{Box}(x) \equiv B_{r \leq M_o}^{(\infty)} \subset \Omega_{\delta,\xi} \xrightarrow{\text{Nach Lemma 3.9}} \mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu, d](x) \geq \mathcal{A}(\mu, d) \tag{3.100}$$

und daher

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu, d](x) - 2\delta &> \mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu, d](x) - 2\delta_{cr1}(\mu, d) \quad (\text{da } 0 < \delta < \delta_{cr1}(\mu, d)) \\
&= \mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu, d](x) - \frac{2}{3} \mathcal{A}(\mu, d) \quad (\text{nach Definition von } \delta_{cr1}(\mu, d)) \\
&\geq \mathcal{D}_-[\delta, \xi, u, \mu, d](x) - \mathcal{A}(\mu, d) \\
&\geq 0 \quad (\text{nach (3.100)}),
\end{aligned}$$

was das Lemma 3.11 beweist. □

Beweis des Lemmas 3.12:

Um die Notation zu vereinfachen, setzen wir $A := \mathcal{M}_o(\mu, d) > 0$, $B := 4d > 0$ und $C := \tilde{\alpha}_1(\mu, d) > 0$. Somit ist nun die in (3.44) definierte Funktion $F(\mu, d, \delta)$ gegeben durch:

$$F(\mu, d, \delta) := C - B\sqrt{\delta} - A\delta \quad (3.101)$$

und das in (3.45) definierte $\delta_{\text{cr2}}(\mu, d)$ in dieser Notation lautet:

$$\delta_{\text{cr2}}(\mu, d) = \frac{C^2}{4(B^2 + 2AC)} \quad (3.102)$$

Nun ist es zu zeigen, dass $F(\mu, d, \delta) > \frac{1}{2}C$ gilt, falls $0 < \delta < \delta_{\text{cr2}}(\mu, d)$ ist.

Tatsächlich:

$$\begin{aligned} F(0 < \delta < \delta_{\text{cr2}}) &= C - B\sqrt{\delta} - A\delta \\ &\geq C - \frac{BC}{2\sqrt{B^2 + 2AC}} - \frac{AC^2}{4(B^2 + 2AC)} \\ &= \frac{4C(B^2 + 2AC) - 2BC\sqrt{B^2 + 2AC} - AC^2}{4(B^2 + 2AC)} \\ &\stackrel{(\bullet)}{\geq} \frac{4C(B^2 + 2AC) - 2BC(B^{-1}(B^2 + AC)) - AC^2}{4(B^2 + 2AC)} \\ &= \frac{4CB^2 + 8AC^2 - 2CB^2 - 2AC^2 - AC^2}{4(B^2 + 2AC)} \\ &= \frac{2CB^2 + 5AC^2}{4(B^2 + 2AC)} = C \left[\frac{2B^2 + 5AC}{4B^2 + 8AC} \right] \\ &> C \left[\frac{2B^2 + 4AC}{4B^2 + 8AC} \right] = \frac{1}{2}C \end{aligned}$$

In (\bullet) haben wir benutzt, dass $-\sqrt{B^2 + 2AC} \geq -B^{-1}(AC + B^2)$, da

$$\begin{aligned} -\sqrt{B^2 + 2AC} &= -\sqrt{B^2 + 2AC} + \sqrt{B^2} - \sqrt{B^2} \\ &= -\frac{1}{2\sqrt{\xi}}2AC - \sqrt{B^2} \quad \text{mit } B^2 \leq \xi \leq B^2 + 2AC \quad \left(\begin{array}{l} \text{nach Mittelwertsatz der} \\ \text{Differentialrechnung} \\ \text{für die Funktion} \\ f(\lambda) = -\sqrt{\lambda} \end{array} \right) \\ &\geq -\frac{1}{2\sqrt{B^2}}2AC - \sqrt{B^2} \\ &= -\frac{AC}{B} - B = -B^{-1}(AC + B^2) \end{aligned}$$

Damit beenden wir den Beweis des Lemmas 3.12. □

3.9 Beweis der Proposition 3.1 (Quantitatives Stoner-Kriterium)

Der Beweis der Proposition 3.1 beruht auf den folgenden drei Lemmata:

Lemma 3.13. (obere Schranke an der Elektronenanzahl pro Gitterplatz $n_\Lambda(\mu, d)$ auf dem Gitter $\Lambda_{L,d} := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$)
Folgende obere Schranke gilt:

$$n_\Lambda(\mu, d) := \frac{1}{|\Lambda|} \text{Tr}_\Lambda \{ \mathbf{1}_{[-\Delta - \mu < 0]} \} \leq C_d^{(n)} \mu^{\frac{d}{2}} \quad (3.103)$$

mit

$$C_d^{(n)} := 2 \frac{|S_d|}{|\mathbb{T}_d|} \left(\frac{\pi}{2} \right)^d \quad (3.104)$$

vorausgesetzt,

$$L > L_o^{(n)}(\mu, d) := 2d \left(\frac{4}{\mu} \right)^{\frac{d}{2}} \quad (3.105)$$

Lemma 3.14. (obere Schranke an der Energie pro Gitterplatz $e_\Lambda(\mu, d)$ auf dem Gitter $\Lambda_{L,d} := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$)
Folgende untere Schranke gilt:

$$-e_\Lambda(\mu, d) := -\frac{1}{|\Lambda|} \text{Tr}_\Lambda \{ [-\Delta - \mu]_- \} \geq C_d^{(e)} \mu^{\frac{2+d}{2}} \quad (3.106)$$

mit

$$C_d^{(e)} := \frac{1}{2} \frac{|S_d|}{|\mathbb{T}_d|} \left(\frac{\mu}{2} \right)^{\frac{2+d}{2}} \quad (3.107)$$

vorausgesetzt,

$$L > L_o^{(e)}(\mu, d) := 4\pi d \frac{|\mathbb{T}_d|}{|S_d|} \left(2/\mu \right)^{\frac{2+d}{2}} \quad (3.108)$$

Lemma 3.15. ($\gamma_{\text{ferro}} := \mathbf{1}_{[-\Delta - \mu < 0]}$ hat konstante Elektronendichte bezüglich des Gitterplatzes)
Für jeden Gitterplatz $x \in \Lambda$ gilt:

$$\langle x | \gamma_{\text{ferro}} x \rangle = n_\Lambda(\mu, d) := \frac{1}{|\Lambda|} \text{Tr}_\Lambda \{ \mathbf{1}_{[-\Delta - \mu < 0]} \} \quad (3.109)$$

Beweis der Proposition 3.1:

Sei

$$L_o^{en}(\mu, d) := \max\{ L_o^{(e)}(\mu, d), L_o^{(n)}(\mu, d) \}$$

Weiterhin sei

$$\text{Differenz}(u, \mu, d, L) := E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) - E_{L,d}^u(\mu)$$

Folgendes gilt für Differenz \equiv Differenz(u, μ, d, L) :

$$\begin{aligned}
\text{Differenz} &:= E_{\text{ferro}}(\mu, d, L) - E_{L,d}^u(\mu) \\
&\geq E_{\text{ferro}}(\mu, d) - \mathcal{E}^{u,\mu}(\gamma_{\text{para}}) \quad (\text{da } \gamma_{\text{para}} = \gamma_{\text{ferro}} \oplus \gamma_{\text{ferro}} \text{ ein Probezustand ist}) \\
&= E_{\text{ferro}}(\mu, d) - \mathcal{E}^{u,\mu}(\gamma_{\text{ferro}}, \gamma_{\text{ferro}}) \\
&= \text{Tr}\{(-\Delta - \mu)\gamma_{\text{ferro}}\} - \left(\text{Tr}\{(-\Delta - \mu)\gamma_{\text{ferro}}\} + \text{Tr}\{(-\Delta - \mu)\gamma_{\text{ferro}}\} + u \sum_{x \in \Lambda} \langle x | \gamma_{\text{ferro}} x \rangle \langle x | \gamma_{\text{ferro}} x \rangle \right) \\
&= -\text{Tr}\{(-\Delta - \mu)\gamma_{\text{ferro}}\} - u \sum_{x \in \Lambda} n_{\Lambda}(\mu, d) n_{\Lambda}(\mu, d) \quad (\text{nach Lemma 3.15}) \\
&= -\text{Tr}\{[-\Delta - \mu]_{-}\} - u \sum_{x \in \Lambda} n_{\Lambda}(\mu, d) n_{\Lambda}(\mu, d) \\
&= |\Lambda| (-e_{\Lambda}(\mu, d)) - u |\Lambda| n_{\Lambda}^2(\mu, d) \\
&\geq |\Lambda| C_d^{(e)} \mu^{\frac{2+d}{2}} - u |\Lambda| \left(C_d^{(n)} \mu^{d/2} \right)^2 \quad (\text{nach Lemma 3.14 und Lemma 3.13, da die Voraussetzung dieser Lemmata für } |\Lambda|^{1/d} = L \geq L_o^{(en)}(\mu, d) \text{ erfüllt werden}) \\
&= |\Lambda| \mu^{\frac{2+d}{2}} \left\{ C_d^{(e)} - u \left(C_d^{(n)} \right)^2 \mu^{\frac{d-2}{2}} \right\} \stackrel{!}{>} 0
\end{aligned}$$

Also ist $E_{\text{ferro}} - E^u(\mu, d) > 0$ (d.h. der Ferromagnetismus liegt nicht vor), wenn

$$u \mu^{\frac{d-2}{2}} < \frac{C_d^{(e)}}{\left(C_d^{(n)} \right)^2} := C_d^{(\text{Stoner})}$$

Hiebei wurde $C_d^{(\text{Stoner})}$ als $\frac{C_d^{(e)}}{\left(C_d^{(n)} \right)^2}$ gesetzt, was man nach (3.104) und (3.107) Folgendes erhält:

$$C_d^{(\text{Stoner})} = \frac{2^{-4}}{|S_d|} \left(\frac{2\sqrt{2}}{\pi} \right)^d > 0$$

Damit beenden wir (bis auf die Lemmata 3.13, 3.14 und 3.15) den Beweis der Proposition 3.1.

Bem.: Der obige Probezustand $\gamma_{\text{para}} = \gamma_{\text{ferro}} \oplus \gamma_{\text{ferro}}$ erfüllt Folgendes bezüglich des Wechselwirkungsanteils des HF- bzw. HFz-Energiefunktionals (siehe (2.42) und (2.50)):

$$\begin{aligned}
W_{\text{HF}}(\gamma_{\text{para}})(x) &:= \langle x \uparrow | \gamma_{\text{para}} x \uparrow \rangle \langle x \downarrow | \gamma_{\text{para}} x \downarrow \rangle - \langle x \uparrow | \gamma_{\text{para}} x \downarrow \rangle \langle x \downarrow | \gamma_{\text{para}} x \uparrow \rangle \\
&= \langle x | \gamma_{\text{ferro}} x \rangle \langle x | \gamma_{\text{ferro}} x \rangle - 0 =: W_{\text{HFz}}(\gamma_{\text{para}})(x)
\end{aligned}$$

Für den Kinetische-Energie-Anteil haben wir auch

$$\begin{aligned}
T_{\text{HF}}(\gamma_{\text{para}}) &:= \text{Tr}_{2\Lambda} \{ (-\Delta - \mu) \oplus (-\Delta - \mu) \gamma_{\text{para}} \} \\
&= \text{Tr}_{\Lambda} \{ (-\Delta - \mu) \gamma_{\text{ferro}} \} + \text{Tr}_{\Lambda} \{ (-\Delta - \mu) \gamma_{\text{ferro}} \} \\
&=: T_{\text{HFz}}(\gamma_{\text{para}})
\end{aligned}$$

Daher gilt der Beweis der Proposition 3.1 nicht nur für das HFz-, sondern auch für das HF-Hubbardmodell.

Beweis der Lemmata 3.13 und 3.14 :

Der Beweis dieser Lemmata wird ähnlich wie im Unterkapitel 5.3 geführt.

Beweis des Lemmas 3.15:

Der Beweis dieses Lemmas beruht auf folgender Tatsache:

$$\gamma_{\text{ferro}} = \sum_{\substack{k \in BZ: \\ \varepsilon(k) < \mu}} |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k| \quad \text{mit} \quad BZ := \left([-\pi, \pi) \cap \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z} \right)^d$$

und

$$\varphi_k(x) := \frac{1}{\sqrt{|\Lambda|}} e^{i k \cdot x} \quad \text{und} \quad \varepsilon(k) := \sum_{\nu=1}^d (2 - 2 \cos(k_\nu)).$$

Daher folgt

$$\begin{aligned} \langle x | \gamma_{\text{ferro}} x \rangle &= \sum_{\substack{k \in BZ: \\ \varepsilon(k) < \mu}} |\varphi_k(x)|^2 = \sum_{\substack{k \in BZ: \\ \varepsilon(k) < \mu}} \frac{|e^{i k \cdot x}|^2}{|\Lambda|} = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{k \in BZ: \\ \varepsilon(k) < \mu}} 1 \\ &= \frac{1}{|\Lambda|} \text{Tr}_\Lambda \{ \mathbf{1}_{[-\Delta - \mu < 0]} \} = n_\Lambda(\mu, d) \end{aligned}$$

für alle $x \in \Lambda$.

Damit schließen wir den Beweis des Lemmas 3.15. □

Und damit beenden wir den Beweis der Proposition 3.1. □

4 Fehlerabschätzung mit Randterm für die Summe der negativen Eigenwerte eines lokalisierten diskreten Schrödinger-Operators mit Hilfe der Feshbach-Projektion-Methode

In diesem Kapitel wird der durch die Lokalisierung entstehende Fehler für die Summe der negativen Eigenwerte eines diskreten Schrödinger-Operators H abgeschätzt, nämlich:

Theorem 4.1. (*V. Bach*) Für alle $0 < \mu < 1$, $0 < \delta \leq 1$ und $\xi \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|})$ mit $\mathbf{0} \leq \xi \leq \mathbf{1}$ gilt Folgendes:

$$\mathrm{Tr}\{[-\Delta + \mu\mathbf{1} + u \cdot D(\xi)]_-\} \geq \mathrm{Tr}\{[P_{\Omega_{\delta,\xi}}(-\Delta + \mu\mathbf{1} + u \cdot D(\xi))P_{\Omega_{\delta,\xi}}]_-\} - \frac{C_d^{(\mathrm{FB})}}{u\delta - \mu} |\partial\Omega_{\delta,\xi}|,$$

vorausgesetzt, $u > \mu/\delta$.

oder kürzer durch Vereinfachung der Notation:

$$\mathrm{Tr}\{[H]_-\} \geq \mathrm{Tr}\{[P_{\Omega}HP_{\Omega}]_-\} - \frac{C_d^{(\mathrm{FB})}}{u\delta - \mu} |\partial\Omega| \quad (4.1)$$

Hierbei sind

Definition 4.1. (*Einteilchen-Hamiltonoperator*)

Auf dem Gitter $\Lambda := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$, $L \in \mathbb{N}$ (Kantenlänge), $d \in \mathbb{N}$ (Dimension des Gitters) sei folgender Schrödinger-Operator definiert:

$$H = H^{u,\mu,\xi} := -\Delta - \mu\mathbf{1} + u \cdot D(\xi) \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|}) \quad u \geq 0, \quad \mu \geq 0, \quad \xi \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|}) \quad \text{mit } \mathbf{0} \leq \xi \leq \mathbf{1}$$

wobei

$$-\Delta := -t + 2d\mathbf{1} \quad \text{mit} \quad t := \sum_{\substack{x,y \in \Lambda: \\ |x-y|=1}} |x\rangle\langle y|$$

und

$$D(\xi) := \sum_{x \in \Lambda} \langle x|\xi x\rangle |x\rangle\langle x| \quad (\text{Diagonaloperator})$$

Definition 4.2. (*Bulkterm, Randterm und ihre entsprechenden Projektionen*)

Für $\delta \in (0, 1]$ und $\mathbf{0} \leq \xi \leq \mathbf{1}$ definiert man

$$\Omega = \Omega_{\delta,\xi} := \{x \in \Lambda \mid 0 \leq \langle x|\xi x\rangle \leq \delta\} \quad (\text{Bulkterm})$$

$$\partial\Omega = \partial\Omega_{\delta,\xi} := \{x \in \Omega \mid \exists z \in \Omega^c : |z - x| = 1\} \quad (\text{Randterm})$$

Die entsprechenden Projektionen auf den obigen Mengen sind üblicherweise definiert durch:

$$P_{\Omega} := \sum_{x \in \Omega} \mathbf{1}_x \quad \text{und} \quad P_{\partial\Omega} := \sum_{x \in \partial\Omega} \mathbf{1}_x$$

Um die Notation zu vereinfachen, werden wir in diesem Kapitel P_{Ω} einfach mit P bezeichnen.

Schließlich ist $C_d^{(\text{FB})}$ eine Konstante, die nur von der Dimension des Gitters abhängig ist. Je nach d ist $C_d^{(\text{FB})}$ gegeben durch:

$$C_d^{(\text{FB})} := \begin{cases} 3, & \text{falls } d = 1 \\ 2 + 2d, & \text{falls } d = 2, 3, 4, 5, \dots \end{cases}$$

Bemerkung 4.1. (Lokalisierung) Unter dem auf Ω lokalisierten Hamiltonoperator versteht man $H_{\text{lok}} := P_\Omega H P_\Omega$.

Offensichtlich gilt $\text{Tr}\{[H_{\text{lok}}]_-\} \geq \text{Tr}\{[H]_-\}$. D. h. die Summe der negativen Eigenwerte nimmt zu, wenn man H lokalisiert²¹. Die Aussage des Theorems 4.1 besteht darin, dass $\text{Tr}\{[H_{\text{lok}}]_-\}$ nicht größer als $\text{Tr}\{[H]_-\} + \frac{C_d^{(\text{FB})}}{u\delta - \mu} |\partial\Omega|$ sein darf.

Bemerkung 4.2.

1. Ist $\Omega = \Omega_{\text{sb}}$ eine Schachbrettkonfiguration (siehe Abbildung unten), dann gilt

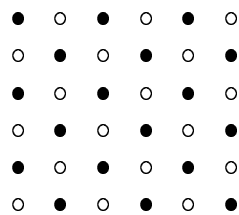
$$\partial\Omega = \Omega \quad (\partial\Omega \text{ hat die größte Anzahl der Elemente})$$

2. Ist $\Omega = \Omega_{\text{seg}}$ eine Segregierte Konfiguration (siehe Abbildung unten), dann gilt

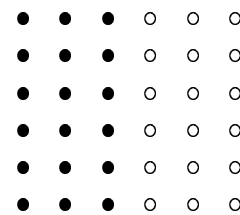
$$\dim \partial\Omega = d - 1 \quad (\partial\Omega \text{ hat die kleinste Anzahl der Elemente})$$

Wie man aus 1. und 2. ersehen kann, sind die Konfigurationen Ω_{sb} und Ω_{seg} gegensätzlich. Weiterhin entspricht die Konfiguration Ω_{sb} dem Fall halber Füllung²² für alle Kopplung $u > 0$ und die Konfiguration Ω_{seg} sollte dem Fall kleiner als halbe Füllung (μ hinreichend klein) mit hinreichend großer Kopplung u entsprechen.

Schachbrettkonfiguration versus Segregierte Konfiguration



Schachbrettkonfiguration



Segregierte Konfiguration

Abb.: Beispiel einer Schachbrettkonfiguration und einer Segregierten Konfiguration. Hierbei ist $L = 6$, $d = 2$ und $|\Omega| = 18$.

²¹In der Tat

$$\text{Tr}\{[PHP]_-\} = \min_{0 \leq \xi \leq 1} \text{Tr}\{P H P \xi\} = \min_{0 \leq \xi \leq 1} \text{Tr}\{H(P \xi P)\} \stackrel{(\bullet)}{\geq} \min_{0 \leq \eta \leq 1} \text{Tr}\{H \eta\} = \text{Tr}\{[H]_-\}.$$

Im (\bullet) haben wir $0 \leq \xi \leq 1 \Rightarrow 0 \leq P \xi P \leq 1$ benutzt.

²²Über die Tatsache, dass die Schachbrettkonfiguration im Fall halber Füllung und beliebiger Kopplung $u > 0$ energie günstiger als andere Konfigurationen ist, siehe [KL 86] für das Falicov-Kimball-Modell und [BLS 94] – [BP 96] für das Analogon im HF-Hubbardmodell. Unter diesem Analogon im HF-Hubbardmodell versteht man den Antiferromagnetismus.

4.1 Beweis des Theorems 4.1

Der Beweis des Theorems 4.1 wird in Lemmata aufgespalten und diese Lemmata werden in dem nächsten Unterkapitel bewiesen.

Wesentlich beruht der Beweis dieses Theorems auf der Isospektralität der Feshbach-Abbildung, nämlich:

Lemma 4.1. *(Isospektralität der Feshbach-Abbildung wie in [BFS 98])*

Seien \mathcal{H} ein endlich dimensionaler Hilbertraum, $H \in B(\mathcal{H})$, $P \in B(\mathcal{H})$ eine Projektion ($P^2 = P$) und $\lambda \in \mathbb{C}$. Sei weiterhin $\bar{P} := \mathbf{1} - P$ die Komplemente zu P .

Unter der Voraussetzung, dass

$$\bar{P}(H + \lambda\mathbf{1})\bar{P} \quad \text{auf} \quad \bar{P}\mathcal{H}$$

invertierbar ist, gilt für die hier definierte

$$\mathcal{F}_P(H + \lambda\mathbf{1}) := P(H + \lambda\mathbf{1})P - [P(H + \lambda\mathbf{1})\bar{P}][(\bar{P}(H + \lambda\mathbf{1})\bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}|_{P\mathcal{H}}][\bar{P}(H + \lambda\mathbf{1})P]$$

Feshbach-Abbildung zu $H + \lambda\mathbf{1}$ Folgendes:

- (a) Der Operator $\mathcal{F}_P(H + \lambda\mathbf{1})$ ist invertierbar auf $P\mathcal{H} = \text{Bild } P$ genau dann, wenn $H + \lambda\mathbf{1}$ invertierbar auf \mathcal{H} ist. In diesem Fall gilt:

$$\left(\mathcal{F}_P(H + \lambda\mathbf{1})|_{P\mathcal{H}} \right)^{-1} = P(H + \lambda\mathbf{1})P|_{P\mathcal{H}}$$

- (b) Falls $H\psi = (-\lambda)\psi$ für einen Vektor $0 \neq \psi \in \mathcal{H}$, dann ist der projizierte Vektor $P\psi$ nicht der Nullvektor und erfüllt:

$$\mathcal{F}_P(H + \lambda\mathbf{1})P\psi = 0$$

- (c) Falls $\mathcal{F}_P(H + \lambda\mathbf{1})\varphi = 0$ für einen Vektor $0 \neq \varphi = P\varphi \in P\mathcal{H}$, dann ist der folgende Vektor $\psi := P\varphi - [(\bar{P}(H + \lambda\mathbf{1})\bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\bar{P}(H + \lambda\mathbf{1})P\varphi \in \bar{P}\mathcal{H}$ nicht der Nullvektor und erfüllt die Gleichung $H\psi = (-\lambda)\psi$.

- (d)

$$\boxed{\dim \text{Ker}[H + \lambda\mathbf{1}] = \dim \text{Ker}[\mathcal{F}_P(H + \lambda\mathbf{1})|_{P\mathcal{H}}]} \quad (4.2)$$

Bem.: Ist $P \in B(\mathcal{H})$ zusätzlich eine orthogonale ($P = P^\dagger$) Projektion, dann gilt $\text{Bild } \bar{P} \perp \text{Bild } P$. Daher bezeichnet man in diesem Fall \bar{P} mit P^\perp . In unserem Fall ist $P \equiv P_\Omega := \sum_{x \in \Omega} \mathbf{1}_x$ tatsächlich eine orthogonale Projektion.

Lemma 4.2. (Erfüllung der Voraussetzung für die Feshbach-Abbildung-Methode)

Der Operator $P_\Omega^\perp(H + \lambda\mathbf{1})P_\Omega^\perp$ mit $\lambda > 0$ ist invertierbar auf $P_\Omega^\perp\mathcal{H}$, wenn

$$u > \frac{\mu}{\delta}$$

Genauer gilt im Fall $u > \frac{\mu}{\delta}$ Folgendes auf $P_\Omega^\perp\mathcal{H}$:

$$P_\Omega^\perp(H + \lambda\mathbf{1})P_\Omega^\perp \geq (u\delta - \mu)P_\Omega^\perp > \mathbf{0}_{P_\Omega^\perp\mathcal{H}}$$

Hierbei versteht man unter $(u\delta - \mu)P_\Omega^\perp > \mathbf{0}_{P_\Omega^\perp\mathcal{H}}$, dass alle Eigenwerte von $(u\delta - \mu)P_\Omega^\perp$ strikt positiv sind.

Nach Lemma 4.1 ist also $\mathcal{F}_P(H + \lambda\mathbf{1})$ auf Bild P für alle $\lambda > 0$ und $u > \frac{\mu}{\delta}$ invertierbar und damit ist die Isospektralität von $\mathcal{F}_P(H + \lambda\mathbf{1})$ bezüglich $H + \lambda\mathbf{1}$ gesichert. Weiterhin gilt folgende Abschätzung nach unten für $\mathcal{F}_P(H + \lambda\mathbf{1})$:

Lemma 4.3. (Untere Schranke an $\mathcal{F}_P(H + \lambda\mathbf{1})$ ohne Randterm)

Für $u > \frac{\mu}{\delta}$ und alle $\lambda > 0$ gilt, dass

$$\mathcal{F}_P(H + \lambda\mathbf{1}) \geq P(H + \lambda\mathbf{1})P - \frac{1}{(\delta u - \mu)}(P(-\Delta)P^\perp)(P^\perp(-\Delta)P)$$

Lemma 4.4. (D. Ueltschi) Für alle beliebigen Teilmengen Ω des Gitters Λ gilt Folgendes:

$$P_\Omega(-\Delta)P_\Omega^\perp P_\Omega^\perp(-\Delta)P_\Omega \leq C_d^{(\text{FB})} P_{\partial\Omega}$$

Hierbei ist $P_{\partial\Omega}$ schon in der Definition 4.2 definiert. Die Matrixelemente von $P_{\partial\Omega}$ sind gegeben durch:

$$\langle x | P_{\partial\Omega} y \rangle := \begin{cases} 1 & , \text{ falls } x, y \in \Omega, x = y \text{ und existiert } z \in \Omega^c, \text{ so dass } |z - x| = 1 \\ 0 & , \text{ sonst} \end{cases}$$

Und $C_d^{(\text{FB})}$ ist eine Konstante, die nur von der Dimension d des Gitters abhängig ist, nämlich:

$$C_d^{(\text{FB})} = 4d^2$$

Nach Lemma 4.3 und Lemma 4.4 folgt unmittelbar folgendes Lemma:

Lemma 4.5. (Untere Schranke an $\mathcal{F}_P(H + \lambda\mathbf{1})$ mit Randterm) Für alle $\lambda > 0$ gilt

$$\underbrace{\mathcal{F}_P(H + \lambda\mathbf{1})}_{\text{nicht linear in } \lambda} \geq \underbrace{P \left(H + \lambda\mathbf{1} - \frac{C_d^{(\text{FB})}}{\delta u - \mu} P_{\partial\Omega} \right) P}_{\text{linear in } \lambda} .$$

Lemma 4.6. *(Anwendung der Isospektralität der Feshbach-Abbildung)*

Sei definiert

$$\tilde{H} := H - \frac{C_d^{(\text{FB})}}{\delta u - \mu} P_{\partial\Omega} \in B(\mathbb{C}^{|\Lambda|}), \quad (4.3)$$

dann gilt Folgendes:

$$\text{Tr}_{\mathcal{H}}\{[H]_{-}\} \geq \text{Tr}_{\mathcal{H}}\{[P\tilde{H}P]_{-}\} \quad (4.4)$$

Lemma 4.7. *Die rechte Seite der Ungleichung (4.4) lässt sich nach unten folgendermaßen abschätzen:*

$$\text{Tr}_{\mathcal{H}}\{[P\tilde{H}P]_{-}\} \geq \text{Tr}_{\mathcal{H}}\{[PHP]_{-}\} - \frac{C_d^{(\text{FB})}}{u\delta - \mu} |\partial\Omega|$$

Der Beweis des Theorems 4.1 folgt unmittelbar aus dem Lemma 4.6 und aus dem Lemma 4.7.

□

4.2 Beweise der Lemmata für das Theorem 4.1

Beweis des Lemmas 4.1:

Der Beweis dieses Lemmas befindet in dem Unterkapitel 4.3.

Beweis des Lemmas 4.2:

$$\begin{aligned}
P_{\Omega}^{\perp}(H + \lambda \mathbf{1})P_{\Omega}^{\perp} &= P_{\Omega}^{\perp}(-\Delta + (\lambda - \mu)\mathbf{1} + u \cdot D(\xi))P_{\Omega}^{\perp} & (\lambda > 0) \\
&\geq P_{\Omega}^{\perp}((\lambda - \mu)\mathbf{1})P_{\Omega}^{\perp} + u \cdot P_{\Omega}^{\perp}(D(\xi))P_{\Omega}^{\perp} & \text{da } -\Delta \geq 0 \text{ ist} \\
&\stackrel{(\bullet)}{\geq} (\lambda - \mu)P_{\Omega}^{\perp} + u\delta P_{\Omega}^{\perp} \\
&\geq (u\delta - \mu)P_{\Omega}^{\perp} & \text{da } \lambda > 0 \\
&= \underbrace{(u\delta - \mu)}_{>0} \mathbf{1}_{P^{\perp}\mathcal{H}}
\end{aligned}$$

Also ist $P_{\Omega}^{\perp}(H + \lambda \mathbf{1})P_{\Omega}^{\perp}$ auf $P_{\Omega}^{\perp}\mathcal{H} = P_{\Omega^c}\mathcal{H}$ invertierbar, wenn $u > \frac{\mu}{\delta}$.

In (\bullet) haben wir benutzt, dass

$$P_{\Omega}^{\perp}(D(\xi))P_{\Omega}^{\perp} = P_{\Omega^c}(D(\xi))P_{\Omega^c} = \sum_{x \in \Omega^c} \langle x | \xi x \rangle \mathbf{1}_x \geq \delta \sum_{x \in \Omega^c} \mathbf{1}_x = \delta P_{\Omega^c} = \delta P_{\Omega}^{\perp} \quad (x \in \Omega = \Omega_{\delta, \xi} \stackrel{\text{Def}}{\Rightarrow} \langle x | \xi x \rangle < \delta)$$

□

Beweis des Lemmas 4.3:

Seien $A|_{P^{\perp}\mathcal{H}} := P^{\perp}(H + \lambda \mathbf{1})P^{\perp}$, $B|_{P^{\perp}\mathcal{H}} := P^{\perp}((\delta u - \mu)\mathbf{1})P^{\perp}$ und $C := P(H + \lambda \mathbf{1})P^{\perp}$. Dann lässt $F_P(H + \lambda \mathbf{1})$ folgendermaßen durch A , B und C darstellen:

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1}) &:= P(H + \lambda \mathbf{1})P - [P(H + \lambda \mathbf{1})P^{\perp}] [(P^{\perp}(H + \lambda \mathbf{1})P^{\perp})^{-1} \oplus \mathbf{0}|_{P\mathcal{H}}] [P^{\perp}(H + \lambda \mathbf{1})P] \\
&= P(H + \lambda \mathbf{1})P - C [(A|_{P^{\perp}\mathcal{H}})^{-1} \oplus \mathbf{0}|_{P\mathcal{H}}] C^{\dagger} \\
&\stackrel{(\bullet)}{\geq} P(H + \lambda \mathbf{1})P - C [(B|_{P^{\perp}\mathcal{H}})^{-1} \oplus \mathbf{0}|_{P\mathcal{H}}] C^{\dagger} \\
&= P(H + \lambda \mathbf{1})P - [P(H + \lambda \mathbf{1})P^{\perp}] \left[\frac{1}{u\delta - \mu} P^{\perp} \right] [P^{\perp}(H + \lambda \mathbf{1})P] \\
&= P(H + \lambda \mathbf{1})P - \frac{1}{u\delta - \mu} [P(H + \lambda \mathbf{1})P^{\perp}] [P^{\perp}(H + \lambda \mathbf{1})P],
\end{aligned}$$

wobei wir in (\bullet) Folgendes benutzt haben:

Nach Lemma 4.2 sind sowohl $A|_{P^{\perp}\mathcal{H}}$ als auch $B|_{P^{\perp}\mathcal{H}}$ invertierbar und gilt $A|_{P^{\perp}\mathcal{H}} \geq B|_{P^{\perp}\mathcal{H}} > \mathbf{0}|_{P^{\perp}\mathcal{H}}$, wenn $u > \frac{\mu}{\delta}$. In diesem Fall gilt weiterhin, dass

$$\begin{aligned}
A|_{P^{\perp}\mathcal{H}} \geq B|_{P^{\perp}\mathcal{H}} > \mathbf{0}|_{P^{\perp}\mathcal{H}} &\stackrel{(\circ)}{\Rightarrow} (B|_{P^{\perp}\mathcal{H}})^{-1} \geq (A|_{P^{\perp}\mathcal{H}})^{-1} > \mathbf{0}|_{P^{\perp}\mathcal{H}} \\
&\Rightarrow -(B|_{P^{\perp}\mathcal{H}})^{-1} \leq -(A|_{P^{\perp}\mathcal{H}})^{-1} < \mathbf{0}|_{P^{\perp}\mathcal{H}} \\
&\Rightarrow [-(B|_{P^{\perp}\mathcal{H}})^{-1}] \oplus \mathbf{0}|_{P\mathcal{H}} \leq [-(A|_{P^{\perp}\mathcal{H}})^{-1}] \oplus \mathbf{0}|_{P\mathcal{H}} < \mathbf{0}|_{P^{\perp}\mathcal{H}} \oplus \mathbf{0}|_{P\mathcal{H}} \\
&\Rightarrow -C[(B|_{P^{\perp}\mathcal{H}})^{-1} \oplus \mathbf{0}|_{P\mathcal{H}}]C^{\dagger} \leq -C[(A|_{P^{\perp}\mathcal{H}})^{-1} \oplus \mathbf{0}|_{P\mathcal{H}}]C^{\dagger} < \mathbf{0}
\end{aligned}$$

In (\circ) haben wir die Tatasche benutzt, dass $f(x) = 1/x$, $x > 0$ eine *operator antimotone* Funktion ist. Man sagt, dass eine Funktion $f : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ *operator antimotone* ist, wenn $0 \leq B \leq A \Rightarrow f(B) \geq f(A)$ (siehe z.B. [Bathia 97]).

□

Beweis des Lemmas 4.4:

Für $y \in \Omega^c$ und $f \in \mathbb{C}^{|\Lambda|}$ folgt nach der Cauchy-Schwarz-Ungleichungen, dass

$$\begin{aligned} \langle f | P_{\partial\Omega} \Delta \mathbf{1}_y \Delta P_{\partial\Omega} f \rangle &= \left| \sum_{x \in \partial\Omega, |x-y|=1} f(x) \right|^2 \\ &\leq \left(\sum_{x \in \partial\Omega, |x-y|=1} |f(x)|^2 \right) \left(\sum_{x \in \Lambda, |x-y|=1} 1 \right) = 2d \sum_{x \in \partial\Omega, |x-y|=1} |f(x)|^2 \end{aligned} \quad (4.5)$$

Nun summiert man über alle $y \in \Omega^c$, erhält man

$$\begin{aligned} \langle f | P_{\partial\Omega} \Delta P_{\Omega^\perp} \Delta P_{\partial\Omega} f \rangle &= \sum_{y \in \Omega^c} \langle f | P_{\partial\Omega} \Delta \mathbf{1}_y \Delta P_{\partial\Omega} f \rangle \\ &\leq 2d \sum_{x \in \partial\Omega} \left\{ |f(x)|^2 \cdot \left(\sum_{y \in \Lambda, |x-y|=1} 1 \right) \right\} \\ &\leq 4d^2 \sum_{x \in \partial\Omega} |f(x)|^2 = 4d^2 \langle f | P_{\partial\Omega} f \rangle \end{aligned} \quad (4.6)$$

D. h. nach (4.6):

$$P_{\partial\Omega} (-\Delta) P_{\Omega^\perp} P_{\Omega^\perp} (-\Delta) P_{\partial\Omega} \leq 4d^2 P_{\partial\Omega}$$

Damit ist das Lemma 4.4 bewiesen. □

Beweis des Lemmas 4.5:

Der Beweis des Lemmas 4.5 folgt unmittelbar nach Lemma 4.3 und Lemma 4.4. □

Beweis des Lemmas 4.6:

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}} \{ [H]_- \} &= \sum_{\lambda \geq 0} (-\lambda) \cdot \dim \mathrm{Ker}(H + \lambda \mathbf{1}) \\ &= \sum_{\lambda \geq 0} (-\lambda) \cdot \dim \mathrm{Ker}(\mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})|_{P\mathcal{H}}) \quad \left(\begin{array}{l} \text{nach Feshbach-Satz} \\ \text{Lemma 4.1} \end{array} \right) \\ &= \sum_{\lambda \geq 0} (-\lambda) \cdot \dim \mathrm{Ker}(\mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})|_{P\mathcal{H}} + \lambda \mathbf{1}_{P\mathcal{H}} - \lambda \mathbf{1}_{P\mathcal{H}}) \\ &= \mathrm{Tr}_{P\mathcal{H}} \{ [\mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1}) - \lambda \mathbf{1}]_- \} \\ &\geq \mathrm{Tr}_{P\mathcal{H}} \{ [P(H + \lambda \mathbf{1} - \frac{C_d^{(\mathrm{FB})}}{\delta u - \mu} P_{\partial\Omega})P - \lambda P]_- \} \quad \left(\begin{array}{l} \text{nach Lemma 4.5 und} \\ A \geq B \Rightarrow \mathrm{Tr}\{[A]_-\} \geq \mathrm{Tr}\{[B]_-\} \end{array} \right) \\ &\geq \mathrm{Tr}_{P\mathcal{H}} \{ [P(H - \frac{C_d^{(\mathrm{FB})}}{\delta u - \mu} P_{\partial\Omega})P]_- \} \\ &= \mathrm{Tr}_{P\mathcal{H}} \{ [P\tilde{H}P]_- \} \quad \left(\text{hier ist } \tilde{H} := H - \frac{C_d^{(\mathrm{FB})}}{\delta u - \mu} P_{\partial\Omega} \right) \\ &= \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}} \{ [P\tilde{H}P]_- \} \quad (\text{da } \mathrm{Tr}_{P^\perp\mathcal{H}} \{ [P\tilde{H}P]_- \} = 0) \end{aligned}$$

□

Beweis des Lemmas 4.7:

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\{[P\tilde{H}P]_{-}\} &= \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\{[P(H - \frac{C_d^{(\mathrm{FB})}}{\delta u - \mu} P_{\partial\Omega})P]_{-}\} \\
&= \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\{[PHP - \frac{C_d^{(\mathrm{FB})}}{\delta u - \mu} PP_{\partial\Omega}P]_{-}\} \\
&\stackrel{(\bullet)}{=} \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\{[PHP - \frac{C_d^{(\mathrm{FB})}}{\delta u - \mu} P_{\partial\Omega}]_{-}\}
\end{aligned} \tag{4.7}$$

wobei wir in (\bullet) benutzt haben, dass $PP_{\partial\Omega}P = P_{\partial\Omega}$ gilt, da $P \equiv P_{\Omega}$ und $\partial\Omega \subset \Omega$.

Weiterhin gilt für die rechte Seite von (4.7) :

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\left\{\left[PHP - \frac{C_d^{(\mathrm{FB})}}{\delta u - \mu} P_{\partial\Omega}\right]_{-}\right\} &= \min_{\mathbf{0} \leq \eta \leq \mathbf{1}} \left\{ \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\left\{\left(PHP - \frac{C_d^{(\mathrm{FB})}}{\delta u - \mu} P_{\partial\Omega}\right)\eta\right\}\right\} \\
&= \min_{\mathbf{0} \leq \eta \leq \mathbf{1}} \left\{ \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\{PHP\eta\} - \frac{C_d^{(\mathrm{FB})}}{\delta u - \mu} \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\{P_{\partial\Omega}\eta\} \right\} \\
&\geq \min_{\mathbf{0} \leq \eta \leq \mathbf{1}} \left\{ \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\{PHP\eta\} \right\} + \min_{\mathbf{0} \leq \eta \leq \mathbf{1}} \left\{ -\frac{C_d^{(\mathrm{FB})}}{\delta u - \mu} \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\{P_{\partial\Omega}\eta\} \right\} \\
&\stackrel{(\star)}{=} \min_{\mathbf{0} \leq \eta \leq \mathbf{1}} \left\{ \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\{PHP\eta\} \right\} - \frac{C_d^{(\mathrm{FB})}}{\delta u - \mu} \max_{\mathbf{0} \leq \eta \leq \mathbf{1}} \left\{ \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\{P_{\partial\Omega}\eta\} \right\} \\
&\stackrel{(\circ)}{=} \min_{\mathbf{0} \leq \eta \leq \mathbf{1}} \left\{ \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\{PHP\eta\} \right\} - \frac{C_d^{(\mathrm{FB})}}{\delta u - \mu} |\partial\Omega| \\
&= \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\{[PHP]_{-}\} - \frac{C_d^{(\mathrm{FB})}}{\delta u - \mu} |\partial\Omega|
\end{aligned}$$

In (\star) haben wir $\frac{C_d^{(\mathrm{FB})}}{\delta u - \mu} > 0$ benutzt, da nach Voraussetzung $u > \frac{\mu}{\delta}$ ist. In (\circ) haben wir benutzt, dass

$$\max_{\mathbf{0} \leq \eta \leq \mathbf{1}} \left\{ \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\{P_{\partial\Omega}\eta\} \right\} = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\{P_{\partial\Omega}\chi(P_{\partial\Omega} > 0)\} = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\{P_{\partial\Omega}P_{\partial\Omega}\} = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\{P_{\partial\Omega}\} = |\partial\Omega|$$

Damit ist das Lemma 4.7 bewiesen \square . Und damit ist das Theorem 4.1 bewiesen \square .

4.3 Anhang zum Kapitel 4 (Detaillierter Beweis der Isospektralität der Feshbach-Abbildung)

Beweis des Lemmas 4.1 (Isospektralität der Feshbach-Abbildung wie in [BFS 98]):

Zu (a) „ \Leftarrow “

Angenommen, der Operator $H + \lambda \mathbf{1}$ ist invertierbar auf \mathcal{H} , dann folgt

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1}) P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P &= P(H + \lambda \mathbf{1}) P P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \\
&\quad - [P(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P}] [(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}_{|_{P\mathcal{H}}}] [\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) P] P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \\
&= P(H + \lambda \mathbf{1}) (\mathbf{1} - \bar{P}) (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \\
&\quad - [P(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P}] [(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}_{|_{P\mathcal{H}}}] [\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})] (\mathbf{1} - \bar{P}) (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \\
&= P(H + \lambda \mathbf{1}) (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P - P(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P} (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \\
&\quad - [P(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P}] [(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}_{|_{P\mathcal{H}}}] \bar{P} (H + \lambda \mathbf{1}) (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \\
&\quad + [P(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P}] [(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}_{|_{P\mathcal{H}}}] \bar{P} (H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P} (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \\
&= P - P(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P} (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \\
&\quad - [P(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P}] [(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}_{|_{P\mathcal{H}}}] \bar{P} P \\
&\quad + [P(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P}] [(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}_{|_{P\mathcal{H}}}] \bar{P} (H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P} \bar{P} (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \\
&= P - P(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P} (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \\
&\quad + [P(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P}] [\mathbf{1} \oplus \mathbf{0}_{|_{P\mathcal{H}}}] \bar{P} (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \\
&= P - P(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P} (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P + P(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P} (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \\
&= P = \mathbf{1}_{P\mathcal{H}}
\end{aligned}$$

D. h. $\mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})$ besitzt eine rechte Inverse auf $P\mathcal{H}$. Ähnlicherweise gilt

$$\begin{aligned}
P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1}) &= P(H + \lambda \mathbf{1}) P P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \\
&\quad - P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P [P(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P}] [(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}_{|_{P\mathcal{H}}}] [\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) P] \\
&= P(H + \lambda \mathbf{1}) (\mathbf{1} - \bar{P}) (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \\
&\quad - P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1} (\mathbf{1} - \bar{P}) [(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P}] [(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}_{|_{P\mathcal{H}}}] [\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) P] \\
&= P(H + \lambda \mathbf{1}) (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P - P(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P} (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \\
&\quad - P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1} [(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P}] [(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}_{|_{P\mathcal{H}}}] [\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) P] \\
&\quad + P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1} \bar{P} [(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P}] [(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}_{|_{P\mathcal{H}}}] [\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) P] \\
&= P - P(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P} (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \\
&\quad - P \bar{P} [\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}_{|_{P\mathcal{H}}}] [\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) P] \\
&\quad + [P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1} \bar{P}] [\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P}] [(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}_{|_{P\mathcal{H}}}] [\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) P] \\
&= P - P(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P} (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P \\
&\quad + [P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1} \bar{P}] [\mathbf{1} \oplus \mathbf{0}_{|_{P\mathcal{H}}}] [\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1}) P] \\
&= P - P(H + \lambda \mathbf{1}) \bar{P} (H + \lambda \mathbf{1})^{-1} P + [P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1} \bar{P} (H + \lambda \mathbf{1}) P] \\
&= P = \mathbf{1}_{P\mathcal{H}}
\end{aligned}$$

D. h. $\mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})$ besitzt eine linke Inverse auf $P\mathcal{H}$.

Zu (a) „ \Rightarrow “

Angenommen, der Operator $\mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})$ ist invertierbar auf $P\mathcal{H}$. Da $\text{Bild} P \cap \text{Bild} \bar{P} = \{0\}$ (d. h. $\mathcal{H} = P\mathcal{H} \oplus \bar{P}\mathcal{H}$) gilt, ist ein Operator R auf \mathcal{H} wohldefiniert, wenn man R auf den folgenden Sektoren definiert.

Sei R auf \mathcal{H} definiert durch

$$R = \begin{pmatrix} \bar{P} R \bar{P} & \bar{P} R P \\ P R \bar{P} & P R P \end{pmatrix}$$

mit

$$\begin{aligned}
\overline{PRP} &:= [(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}] \\
&\quad + [(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}] [\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P] [\mathbf{0} \oplus \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1}] [P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}] [(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}] \\
\overline{PRP} &:= - [(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}] [\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P] [\mathbf{0} \oplus \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1}] \\
PRP &:= - [\mathbf{0} \oplus \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1}] [P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}] [(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}] \\
PRP &:= [\mathbf{0} \oplus \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1}]
\end{aligned}$$

Es bleibt nun zu zeigen, dass $(H + \lambda \mathbf{1})R = \mathbf{1}$ und $R(H + \lambda \mathbf{1}) = \mathbf{1}$ gilt.

Tatsächlich

$$\begin{aligned}
(H + \lambda \mathbf{1})R &= [\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P} + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P + P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P} + P(H + \lambda \mathbf{1})P] [\overline{PRP} + \overline{PRP} + PRP + PRP] \\
&= \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{PRP}) + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{PRP}) + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(PRP) + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(PRP) + \\
&\quad \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P(\overline{PRP}) + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P(\overline{PRP}) + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P}) + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P}) + \\
&\quad P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{PRP}) + P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{PRP}) + P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(PR\overline{P}) + P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(PR\overline{P}) + \\
&\quad P(H + \lambda \mathbf{1})P(\overline{PRP}) + P(H + \lambda \mathbf{1})P(\overline{PRP}) + P(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P}) + P(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P}) \\
&\stackrel{(\bullet)}{=} \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{PRP}) + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{PRP}) + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P}) + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P}) + \\
&\quad P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{PRP}) + P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{PRP}) + P(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P}) + P(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P}) \\
&= \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{PRP}) + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P}) + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{PRP}) + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P}) + \\
&\quad P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{PRP}) + P(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P}) + P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{PRP}) + P(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P})
\end{aligned} \tag{4.8}$$

wobei wir in (\bullet) benutzt haben, dass $P\overline{P} = \overline{P}P = \mathbf{0}$.

Behauptung 4.1. *Folgendes gilt*

$$\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{PRP}) + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P}) = \overline{P} \tag{4.9}$$

$$\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{PRP}) + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P}) = \mathbf{0} \tag{4.10}$$

$$P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{PRP}) + P(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P}) = \mathbf{0} \tag{4.11}$$

$$P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{PRP}) + P(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P}) = P \tag{4.12}$$

Nach (4.8) und Behauptung 4.1 folgt, dass $(H + \lambda \mathbf{1})R = \overline{P} + P = \mathbf{1}$. Ähnlicherweise zeigt man $R(H + \lambda \mathbf{1}) = \overline{P} + P = \mathbf{1}$. Es bleibt nun nur die Behauptung 4.1 zu beweisen damit wir den Beweis von (a) schließen. Der Beweis der Behauptung 4.1 befindet sich am Ende dieses Anhangs.

Zu (b)

Angenommen, es gilt $(H + \lambda \mathbf{1})\psi = 0$, dann folgt:

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})P\psi &= P(H + \lambda \mathbf{1})P\psi - P(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P}[(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\psi \\
&= P(H + \lambda \mathbf{1})(1 - \bar{P})\psi - P(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P}[(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})(1 - \bar{P})\psi \\
&= P(H + \lambda \mathbf{1})\psi - P(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P}\psi + \\
&\quad - P(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P}[(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\psi \\
&\quad + P(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P}[(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P}\psi \\
&= \mathbf{0} - P(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P}\psi - \mathbf{0} + P(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P}[(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P}\psi \\
&= -P(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P}\psi + P(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P}\bar{P}\psi = \mathbf{0}
\end{aligned}$$

Es bleibt zu zeigen, dass $P\psi \neq 0$ wenn $\psi \neq 0$.

Tatsächlich: Angenommen, $\psi \neq 0$ aber $P\psi = 0$, dann ist

$$\bar{P}\psi = \psi - P\psi = \psi \neq 0 \quad (4.13)$$

Andererseits ist ψ ein Eigenvektor von H zu dem Eigenwert $-\lambda$ und daher folgt

$$0 = (H + \lambda \mathbf{1})\psi \Rightarrow 0 = \bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\psi \quad (4.14)$$

Nach (4.14) und (4.13) folgt

$$0 = \bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\psi = \bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P}\psi = [\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P}]\bar{P}\psi \quad \text{mit } \bar{P}\psi \neq 0,$$

was zum Widerspruch bzgl. der Invertierbarkeit von $\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P}$ auf $\bar{P}\mathcal{H}$ führt.

Zu (c)

Angenommen, es gibt $0 \neq \varphi = P\varphi \in P\mathcal{H}$, der $\mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})\varphi = 0$ erfüllt, dann setze $\psi := P\varphi - [(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi$. Mit dieser Wahl von ψ folgt:

$$\begin{aligned}
\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\psi &= \bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi - \bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})[(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi \\
&= \bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi - \bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P}[(\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})\bar{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi \\
&= \bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi - \bar{P}\bar{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi = \mathbf{0}
\end{aligned} \quad (4.15)$$

und

$$\begin{aligned}
P(H + \lambda \mathbf{1})\psi &= P(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi - P(H + \lambda \mathbf{1})[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi \\
&= P(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi - P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi \\
&= \{ \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1}) + P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P \} \varphi + \\
&\quad - P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi \\
&\stackrel{(\bullet)}{=} \mathbf{0} + P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi \\
&\quad - P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi \\
&= \mathbf{0}
\end{aligned} \tag{4.16}$$

Wobei wir in (\bullet) die Voraussetzung $\mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})\varphi = 0$ benutzt haben.

Nach (4.15) und (4.16) folgt das gewünschte $(H + \lambda \mathbf{1})\psi = \mathbf{0}$, da nämlich $\mathbf{0} = \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\psi + P(H + \lambda \mathbf{1})\psi = (\overline{P} + P)(H + \lambda \mathbf{1})\psi = (H + \lambda \mathbf{1})\psi$

Es bleibt zu zeigen, dass $\psi \neq 0$, wenn $\varphi = P\varphi \neq 0$.

Tatsächlich: Angenommen, $\varphi = P\varphi \neq 0$ aber $0 = \psi := P\varphi - [(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi$, dann ist

$$P\varphi = [(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi \tag{4.17}$$

Multipliziere man beiden Seiten von (4.17) mit $[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}) \oplus \mathbf{0}]$, erhalte man

$$\begin{aligned}
0 = [(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}) \oplus \mathbf{0}]P\varphi &= [(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}) \oplus \mathbf{0}][(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi \\
&= \overline{P}\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi = \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi
\end{aligned}$$

Also gilt

$$\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P\varphi = 0 \tag{4.18}$$

Setze man (4.18) in (4.17) ein, erhalte man $P\varphi = 0$ aber $P\varphi = \varphi$ und daher ist auch $\varphi = 0$, was ein Widerspruch ist.

Zu (d)

Dies folgt unmittelbar nach (b) und (c).

Beweis der Behauptung 4.1:

Zu (4.9)

$$\begin{aligned}
&\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{P}R\overline{P}) + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P}) = \\
&\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}\{ [(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}] \\
&\quad + [(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}][\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P][\mathbf{0} \oplus \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1}][P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}][(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}] \} \\
&- \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P[\mathbf{0} \oplus \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1}][P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}][(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}] \\
&= \overline{P} + \overline{P}\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P[\mathbf{0} \oplus \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1}][P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}][(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}] \\
&- \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P[\mathbf{0} \oplus \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1}][P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}][(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}] = \overline{P}
\end{aligned}$$

Zu (4.10)

$$\begin{aligned}
& \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{P}RP) + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P(PRP) = \\
& -\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}][(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P)[\mathbf{0} \oplus \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1}] + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P[\mathbf{0} \oplus \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1}]] = \\
& -\overline{P}(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P)[\mathbf{0} \oplus \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1}] + \overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P[\mathbf{0} \oplus \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1}] \\
& = \mathbf{0}
\end{aligned}$$

Zu (4.11)

$$\begin{aligned}
& P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{P}R\overline{P}) + P(H + \lambda \mathbf{1})P(PR\overline{P}) = \\
& P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{P}R\overline{P}) + \{ \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1}) + P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P \} (PR\overline{P}) \quad \left(\begin{array}{l} \text{nach Def. von} \\ \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1}) \end{array} \right) \\
& = P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{P}R\overline{P}) - \\
& \{ \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1}) + P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P \} \\
& \times \{ [\mathbf{0} \oplus \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1}]P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}] \} \\
& = P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{P}R\overline{P}) - PP(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}] - \\
& P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P[\mathbf{0} \oplus \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1}]P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}] \\
& = P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P} \left\{ (\overline{P}R\overline{P}) - \left[[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}] \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + [(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P[\mathbf{0} \oplus \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1}]P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}] \right] \right\} \\
& = P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P} \{ (\overline{P}R\overline{P}) - (\overline{P}R\overline{P}) \} = \mathbf{0}
\end{aligned}$$

Zu (4.12)

$$\begin{aligned}
& P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{P}RP) + P(H + \lambda \mathbf{1})P(PRP) = \\
& P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{P}RP) + \{ \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1}) + P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P \} (PRP) \\
& = P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{P}RP) + \{ \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1}) + P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P \} [\mathbf{0} \oplus \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1}] \\
& = P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{P}RP) + P + P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}[(\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P})^{-1} \oplus \mathbf{0}]\overline{P}(H + \lambda \mathbf{1})P[\mathbf{0} \oplus \mathcal{F}_P(H + \lambda \mathbf{1})^{-1}] \\
& = P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(\overline{P}RP) + P + P(H + \lambda \mathbf{1})\overline{P}(-\overline{P}RP) = P
\end{aligned}$$

Damit ist die Behauptung 4.1 bewiesen und daher haben wir den Beweis des Lemmas 4.1 beendet.

□

5 FLU Großkanonisches Ensemble-Version

In diesem Kapitel wird ein wichtiges Resultat im Kanonischen Ensemble aus [FLU 02] (siehe (1.12)) auf den Fall des Großkanonischen Ensembles übertragen. Das Hauptresultat dieses Kapitel zeigt sich folgendermaßen:

Hauptresultat dieses Kapitels (siehe Korollar 5.2) Für alle Teilmengen Ω des Gitters $\Lambda_{L,d} := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ gilt folgende Abschätzung (Lokalisationsfehler):

$$E_{\Omega,\mu} + E_{\Omega^c,\mu} - E_{\Lambda,\mu} \geq \tilde{\alpha}_1(\mu, d) |\partial\Omega|$$

wobei

$$E_{\Omega,\mu} := \text{Tr}_{\Lambda} \{ [P_{\Omega}(-\Delta - \mu)P_{\Omega}]_- \} = \text{Summe der negativen Eigenwerte von } P_{\Omega}(-\Delta - \mu)P_{\Omega}$$

mit

$$\tilde{\alpha}_1(\mu, d) > 0 \quad \text{positiv! und unabhängig von } \Omega$$

vorausgesetzt, dass

$$0 < \mu < 1 \quad \text{und} \quad L > L_o^{(\text{FLU})}(\mu, d)$$

wobei

$$\tilde{\alpha}_1(\mu, d) := \left(1 + \frac{1}{4d}\right) \frac{1}{(4d)^2} \frac{(1-\mu)}{(4d-\mu)} \frac{1}{8} \frac{|S_d|}{(2\pi)^d} \left(\mu/2\right)^{\frac{2+d}{2}}$$

und

$$L_o^{(\text{FLU})}(\mu, d) := 4\pi d \frac{(2\pi)^d}{|S_d|} \left(2/\mu\right)^{\frac{2+d}{2}}$$

Hierbei ist $|S_d|$ das Volumen der d -dimensionalen Einheitskugel.

Im Folgenden wird das obige Hauptresultat bewiesen.

5.1 Beweis des Hauptresultats dieses Kapitels (Korollar 5.2)

Im Folgenden betrachten wir das Gitter $\Lambda := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ und Ω eine beliebige Teilmenge von Λ .

Definition 5.1. (*Energie einer Konfiguration Ω*)

Für ein gegebenes chemisches Potential $\mu \geq 0$ und eine Konfiguration $\Omega \subset \Lambda$ definierte man die Energie von dieser Konfiguration durch

$$E_{\Omega, \mu} := \text{Tr}_{\Lambda} \{ [P_{\Omega}(-\Delta - \mu \mathbf{1})P_{\Omega}]_{-} \}$$

Hierbei ist $P_{\Omega} := \sum_{x \in \Omega} \mathbf{1}_x$.

Das heißt

$$E_{\Omega, \mu} = \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} e_j$$

, wobei die e_j das Eigenwertproblem

$$e_j \varphi_j = P_{\Omega}(-\Delta - \mu \mathbf{1})P_{\Omega} \varphi_j \quad \text{mit} \quad \varphi_j \in \ell^2(\Lambda) \quad \text{und} \quad \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle_{\ell^2(\Lambda)} = \delta_{ij} \quad (5.1)$$

erfüllen. Dieses Eigenwertproblem auf Λ lässt sich komponentenweise folgendermaßen umschreiben:

$$e_j \varphi_j(x) = (2d - \mu) \delta_{x \in \Omega} \varphi_j(x) - \sum_{y \in \Lambda} \delta_{x \in \Omega} \delta_{|y-x|=1} \delta_{y \in \Omega} \varphi_j(y), \quad x \in \Lambda \quad (5.2)$$

Da der Kommutator $[P_{\Omega}(-\Delta - \mu \mathbf{1})P_{\Omega}, P_{\Omega}] = 0$ und die Eigenwerte von P_{Ω} entweder 0 oder 1 sind, können wir die Eigenvektoren φ_j zu $P_{\Omega}(-\Delta - \mu \mathbf{1})P_{\Omega}$ wählen, so dass für alle $j = 1, 2, \dots, |\Lambda|$ entweder

$$\text{Erster Fall:} \quad P_{\Omega} \varphi_j = \varphi_j \quad \text{oder}$$

$$\text{Zweiter Fall:} \quad P_{\Omega} \varphi_j = 0 \quad \text{gilt.}$$

Im ersten Fall lässt sich (5.2) für alle $j = 1, 2, \dots, |\Lambda|$ mit $P_{\Omega} \varphi_j = \varphi_j$ folgendermaßen umschreiben:

$$\begin{aligned} (P_{\Omega} \varphi_j)(x) e_j &= (2d - \mu) \delta_{x \in \Omega} \varphi_j(x) - \sum_{y \in \Lambda} \delta_{x \in \Omega} \delta_{|y-x|=1} \delta_{y \in \Omega} \varphi_j(y) \\ &= (2d - \mu) (P_{\Omega} \varphi_j)(x) - \sum_{y \in \Lambda} \delta_{x \in \Omega} \delta_{|y-x|=1} (P_{\Omega} \varphi_j)(y) \\ &= (2d - \mu) (P_{\Omega} \varphi_j)(x) - \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} \delta_{x \in \Omega} \delta_{|e|=1} (P_{\Omega} \varphi_j)(x + e) \quad \text{Setze } y = x + e \\ &= (2d - \mu) (P_{\Omega} \varphi_j)(x) - \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} (1 - \delta_{x \in \Omega^c}) (P_{\Omega} \varphi_j)(x + e) \\ &= (2d - \mu) (P_{\Omega} \varphi_j)(x) - \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} (P_{\Omega} \varphi_j)(x + e) + \delta_{x \in \Omega^c} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} (P_{\Omega} \varphi_j)(x + e) \end{aligned}$$

D. h. im ersten Fall gilt

$$(P_\Omega \varphi_j)(x)e_j = (2d - \mu)(P_\Omega \varphi_j)(x) - \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} (P_\Omega \varphi_j)(x+e) + \delta_{x \in \Omega^c} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} (P_\Omega \varphi_j)(x+e), \quad x \in \Lambda, \quad j : P_\Omega \varphi_j = \varphi_j \quad (5.3)$$

Im zweiten Fall ($P_\Omega \varphi_j = 0$) folgt nach (5.1), dass $e_j \varphi_j = 0$, und da $\varphi_j \neq 0$ folgt wiederum, dass $e_j = 0$ und daher ist in diesem Fall die linke Seite der Gleichung (5.3) gleich Null. Die rechte Seite der Gleichung (5.3) ist im zweiten Fall auch gleich Null, da $P_\Omega \varphi_j = 0$ ist. Also gilt die Gleichung (5.3) für beide Fälle. Somit schreiben wir

$$(P_\Omega \varphi_j)(x)e_j = (2d - \mu)(P_\Omega \varphi_j)(x) - \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} (P_\Omega \varphi_j)(x+e) + \delta_{x \in \Omega^c} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} (P_\Omega \varphi_j)(x+e), \quad x \in \Lambda, \quad j = 1, 2, \dots, |\Lambda| \quad (5.4)$$

Lemma 5.1. (*Ausdruck für die Energie einer Konfiguration Ω durch eine Dichte auf der Brillouin-Zone BZ*)

Folgender Ausdruck gilt:

$$E_{\Omega, \mu} = \text{Tr}_\Lambda \{ [P_\Omega(-\Delta - \mu \mathbf{1})P_\Omega]_- \} = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{k \in BZ} (\varepsilon(k) - \mu) \rho_{\Omega, \mu}(k), \quad (5.5)$$

wobei

$$\rho_{\Omega, \mu}(k) := \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} |\widehat{P_\Omega \varphi_j}(k)|^2 \quad (5.6)$$

Und unter $\hat{\cdot}$ versteht man die Fouriertransformierte eines Vektors f von $\ell^2(\Lambda)$, die folgendermaßen definiert ist:

$$\widehat{f}(k) := \sum_{x \in \Lambda} f(x) e^{ik \cdot x}, \quad k \in BZ := \left([-\pi, \pi] \cap \frac{2\pi}{L} \mathbb{Z} \right)^d \quad (\text{Brillouin-Zone}) \quad (5.7)$$

Weiterhin gilt die folgende Isometrie (Plancharel-Satz):

$$|\Lambda| \langle f | g \rangle_{\ell^2(\Lambda)} = \langle \widehat{f} | \widehat{g} \rangle_{\ell^2(BZ)} := \sum_{k \in BZ} \overline{\widehat{f}(k)} \widehat{g}(k) \quad (5.8)$$

Lemma 5.2. *Für die in (5.6) definierte Dichte auf der Brillouin-Zone BZ gilt Folgendes:*

$$0 \leq \rho_{\Omega, \mu}(k) = |\Omega| - \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} \left| \widehat{P_\Omega \varphi_j}(k) \right|^2 \leq |\Omega| \quad \text{für alle } k \in BZ.$$

Definition 5.2. (Energie pro Gitterplatz in Λ)

Für ein gegebenes chemisches Potential $\mu \geq 0$ definierte man die Energie pro Gitterplatz in Λ durch

$$e_\Lambda(\mu) := \frac{1}{|\Lambda|} \text{Tr}_\Lambda \{ [-\Delta - \mu \mathbf{1}]_- \} = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{k \in BZ: \\ \varepsilon(k) < \mu}} (\varepsilon(k) - \mu) \quad (5.9)$$

wobei

$$\varepsilon(k) := 2d - 2 \sum_{\nu=1}^d \cos(k_\nu) \quad , \quad k \in BZ \quad (5.10)$$

Bemerke, dass $\varepsilon(k) \in [0, 4d]$ für alle $k \in BZ$, und $e_\Lambda(\mu)$ nicht positiv ist, nämlich:

$$e_\Lambda(\mu) \begin{cases} = 0 & \text{falls } \mu \leq 0, \\ < 0 & \text{falls } 0 < \mu < 4d, \\ = -\mu + 2d \leq -2d < 0 & \text{falls } \mu \geq 4d. \end{cases} \quad (5.11)$$

Als Folgerung einer oberen Schranke an der in (5.6) definierten Dichte $\rho_{\Omega,\mu}$ auf BZ , erhalten wir:

Korollar 5.1. (Abschätzung nach unten für $E_{\Omega,\mu}$ durch einen Bulkterm)

Folgende untere Schranke an $E_{\Omega,\mu}$ gilt:

$$E_{\Omega,\mu} = \text{Tr}_\Lambda \{ [P_\Omega(-\Delta - \mu \mathbf{1})P_\Omega]_- \} \geq e_\Lambda(\mu) |\Omega|$$

Beweis:

$$\begin{aligned} E_{\Omega,\mu} &= \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{k \in BZ} (\varepsilon(k) - \mu) \rho_{\Omega,\mu}(k) \quad (\text{nach Lemma 5.1}) \\ &\geq \inf_{\substack{m \in \ell^2(BZ): \\ 0 \leq m \leq |\Omega|}} \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{k \in BZ} (\varepsilon(k) - \mu) m(k) \quad (\text{nach Lemma 5.2}) \\ &= \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{k \in BZ} (\varepsilon(k) - \mu) m_*(k) \quad (5.12) \\ &= \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{k \in BZ} (\varepsilon(k) - \mu) |\Omega| \chi(\varepsilon(k) - \mu < 0) \\ &= |\Omega| \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{k \in BZ: \\ \varepsilon(k) < \mu}} (\varepsilon(k) - \mu) = e_\Lambda(\mu) |\Omega| \end{aligned}$$

Hierbei ist der Minimierende $m_* \in \ell^2(BZ)$ in (5.12) durch das unten erklärte „Badewannenprinzip“ gegeben, nämlich:

$$m_*(k) = |\Omega| \chi(\varepsilon(k) - \mu < 0) = \begin{cases} |\Omega| & \text{falls } \varepsilon(k) < \mu, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (5.13)$$

□

Lemma 5.3. (Das „Badewannenprinzip“ (siehe auch [LS 01]))

Ist $\tilde{\rho}(k) \geq 0$ eine obere Schranke an $\rho_{\Omega,\mu}$ auf BZ (d. h. $0 \leq \rho_{\Omega,\mu}(k) \leq \tilde{\rho}(k)$ für alle $k \in BZ$), dann gilt für $E_{\Omega,\mu}$ folgende untere Schranke:

$$E_{\Omega,\mu} := \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{k \in BZ} (\varepsilon(k) - \mu) \rho_{\Omega,\mu}(k) \geq \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{k \in BZ} (\varepsilon(k) - \mu) \tilde{\rho}(k) \chi(\varepsilon(k) - \mu < 0)$$

Beweis: Trivial.

5.1.1 Lower Bound Involving the Boundary

„... In the previous we showed that $E_{\Omega,\mu}$ is bounded below by its bulk term. Now we strengthen this inequality and prove that $E_{\Omega,\mu}$ also includes a term proportional to the boundary of Ω “ (Zitat aus [FLU 02]).

Unser Ausgangspunkt ist das folgende Lemma (siehe auch [Gb 02]):

Lemma 5.4. (Ausgangspunkt: obere Schranke an $\rho_{\Omega,\mu}$ auf der Brillouin-Zone BZ)

Es gilt folgende obere Schranke an $\rho_{\Omega,\mu}$ auf BZ:

$$\rho_{\Omega,\mu}(k) \leq |\Omega| - \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} \frac{1}{(4d)^2} |\langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle_{\ell^2(\Lambda)}|^2 \quad \text{für alle } k \in BZ \quad (5.14)$$

Hierbei ist $b_k(\partial\Omega) \in \ell^2(\Lambda)$ der Randvektor, dessen Komponenten durch:

$$b_k(\partial\Omega)(x) := \chi_{\partial\Omega}(x) e^{-ikx} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1 \\ x+e \in \Omega^c}} e^{-ike}, \quad x \in \Lambda \quad (5.15)$$

gegeben sind.

Daher folgt nach dem Lemma 5.1 und nach dem „Badewannenprinzip“ (Lemma 5.3):

$$E_{\Omega,\mu} - |\Omega| e_\Lambda(\mu) \geq \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{k \in BZ: \\ \varepsilon(k) < \mu}} \left\{ (\mu - \varepsilon(k)) \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} \frac{1}{(4d)^2} |\langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle_{\ell^2(\Lambda)}|^2 \right\} \quad (5.16)$$

Lemma 5.5. (Folge von Ungleichungen um eine untere Schranke an den Summanden von (5.16) zu erhalten)

(a) Für alle $\mu \in [0, 4d]$ gilt

$$-\mu \leq e_j \leq 4d - \mu, \quad \text{da } e_j \in \sigma(P_\Omega(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_\Omega) \subset [-\mu, 4d - \mu] \quad (5.17)$$

(b)

$$\sum_{j=1}^{|\Lambda|} |\langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle_{\ell^2(\Lambda)}|^2 e_j = \langle b_k(\partial\Omega) | P_\Omega(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_\Omega b_k(\partial\Omega) \rangle_{\ell^2(\Lambda)}, \quad \text{da } P_\Omega(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_\Omega \varphi_j = e_j \varphi_j \quad (5.18)$$

(c)

$$\langle b_k(\partial\Omega) | P_\Omega(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_\Omega b_k(\partial\Omega) \rangle_{\ell^2(\Lambda)} = \langle b_k(\partial\Omega) | (-\Delta - \mu\mathbf{1}) b_k(\partial\Omega) \rangle_{\ell^2(\Lambda)}, \quad \text{da Träger von } b_k(\partial\Omega) \subset \partial\Omega \subset \Omega \quad (5.19)$$

(d)

$$\langle b_k(\partial\Omega) | (-\Delta) b_k(\partial\Omega) \rangle_{\ell^2(\Lambda)} \geq \|b_k(\partial\Omega)\|_{\ell^2(\Lambda)}^2, \quad \text{obwohl } -\Delta \not\geq \mathbf{1} \quad (5.20)$$

(e)

$$\|b_k(\partial\Omega)\|_{\ell^2(\Lambda)}^2 \geq \frac{1}{4} |\partial\Omega|, \quad \text{wenn } |k|_\infty \leq \pi/3 \quad (5.21)$$

(f) Ist $0 \leq \mu \leq 1$, dann gilt

$$\langle b_k(\partial\Omega) | (-\Delta - \mu\mathbf{1}) b_k(\partial\Omega) \rangle_{\ell^2(\Lambda)} \geq (1 - \mu) \frac{1}{4} |\partial\Omega|, \quad \text{wenn } |k|_\infty \leq \pi/3 \quad (5.22)$$

(g)

$$\{k \in BZ \mid \varepsilon(k) < \mu\} \subset \{k \in BZ \mid |k|_\infty \leq \frac{\pi}{3}\}, \quad \text{falls } 0 \leq \mu \leq \varepsilon((\frac{\pi}{3}, 0, \dots, 0)) = 1 \quad (5.23)$$

Lemma 5.6. (Untere Schranke an den Summenden von (5.16))

Ist

$$0 \leq \mu \leq \min\{1, \varepsilon\left(\frac{\pi}{3}, 0, \dots, 0\right)\} = 1, \quad (5.24)$$

dann gilt

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{k \in BZ: \\ \varepsilon(k) < \mu}} \left\{ (\mu - \varepsilon(k)) \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} \frac{1}{(4d)^2} |b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle_{\ell^2(\mathbb{Z}^d)}|^2 \right\} &\geq \frac{1}{(4d)^2} \frac{(1-\mu)}{(4d-\mu)} \frac{1}{4} |\partial\Omega| \sum_{\substack{k \in BZ: \\ \varepsilon(k) < \mu}} (\mu - \varepsilon(k)) \\ &= \frac{1}{(4d)^2} \frac{(1-\mu)}{(4d-\mu)} \frac{1}{4} |\partial\Omega| (-e(\mu)) \end{aligned} \quad (5.25)$$

Theorem 5.1. (FLU Großkanonisches Ensemble-Version)

Ist $0 \leq \mu \leq 1$, dann gilt

$$E_{\Omega, \mu} \geq e_{\Lambda}(\mu) |\Omega| + \alpha_1(\mu) |\partial\Omega| \quad (5.26)$$

mit

$$\alpha_1(\mu) = \frac{1}{(4d)^2} \frac{(1-\mu)}{(4d-\mu)} \frac{1}{4} (-e_{\Lambda}(\mu)) \quad (5.27)$$

Bemerke, dass $\alpha_1(\mu) > 0$, falls $0 < \mu < 1$.

Beweis: Der Beweis folgt unmittelbar aus dem Lemma 5.4 (Ungleichung (5.16)) und aus dem Lemma 5.6. □

Bemerkung 5.1. Es ist zweckmäßig $\alpha_1(\mu)$ nach unten durch ein Potenzgesetz in μ abzuschätzen. Dazu benutzen wir folgende Abschätzung für $-e_{\Lambda}(\mu)$:

$$-e_{\Lambda}(\mu) \geq \frac{1}{(2\pi)^d} |S_d| \left(\mu/2\right)^{\frac{2+d}{2}} - \frac{2\pi d}{L} \quad \text{für alle } \mu \geq 0 \quad (5.28)$$

Hierbei ist $|S_d|$ das Volumen der d -dimensionalen Einheitskugel. Der Beweis von (5.28) befindet sich im Anhang (siehe Unterkapitel 5.3).

Nach (5.28) können wir

$$\alpha_1(\mu) = \frac{1}{(4d)^2} \frac{(1-\mu)}{(4d-\mu)} \frac{1}{4} \left[\frac{|S_d|}{(2\pi)^d} \left(\mu/2\right)^{\frac{2+d}{2}} - \frac{2\pi d}{L} \right] \quad \text{für alle } 0 \leq \mu \leq 1 \quad (5.29)$$

setzen. Nun bemerke Folgendes: Für alle $L \geq L_o^{(\text{FLU})}(\mu)$ gilt weiter, dass $\alpha_1(\mu) > 0$, falls $0 < \mu < 1$. Hierbei ist $L_o^{(\text{FLU})}(\mu)$ durch die Auflösung der folgenden Gleichung gegeben:

$$\frac{|S_d|}{(2\pi)^d} \left(\mu/2\right)^{\frac{2+d}{2}} - \frac{2\pi d}{L} = \frac{1}{2} \frac{|S_d|}{(2\pi)^d} \left(\mu/2\right)^{\frac{2+d}{2}}$$

D. h.

$$L_o^{(\text{FLU})}(\mu) := 4\pi d \frac{(2\pi)^d}{|S_d|} \left(2/\mu\right)^{\frac{2+d}{2}} \quad \text{für alle } 0 < \mu \leq 1 \quad (5.30)$$

und in diesem Fall können wir nun

$$\alpha_1(\mu) := \frac{1}{(4d)^2} \frac{(1-\mu)}{(4d-\mu)} \frac{1}{8} \frac{|S_d|}{(2\pi)^d} \left(\mu/2\right)^{\frac{2+d}{2}} \quad \text{für alle } 0 < \mu \leq 1 \quad (5.31)$$

setzen.

Als Korollar von Theorem 5.1 erhalten wir eine strikt positive Fehlerabschätzung mit Randtermen für die Summe der negativen Eigenwerte, wenn man $(-\Delta - \mu\mathbf{1})$ in zwei disjunkten Gebieten ($\Omega \neq \emptyset$ und $\Omega^c \neq \emptyset$) lokalisiert.

Korollar 5.2. (Abschätzung für den Lokalisationsfehler)

Sei $L \geq L_o^{(\text{FLU})}(\mu)$ wie in (5.30).

Für alle beliebigen Teilmengen Ω des Gitters Λ gilt

$$\text{Tr}_\Lambda \{ [P_\Omega(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_\Omega]_- \} + \text{Tr}_\Lambda \{ [P_{\Omega^c}(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_{\Omega^c}]_- \} - \text{Tr}_\Lambda \{ [-\Delta - \mu\mathbf{1}]_- \} \geq \alpha_1(\mu) (|\partial\Omega| + |\partial\Omega^c|) \quad (5.32)$$

d. h.

$$E_{\Omega,\mu} + E_{\Omega^c,\mu} - E_{\Lambda,\mu} \geq \alpha_1(\mu) (|\partial\Omega| + |\partial\Omega^c|) \quad (5.33)$$

Es ist zweckmäßig, die untere Schranke für den Lokalisationsfehler in (5.33) allein durch $|\partial\Omega|$ abzuschätzen. Dazu nutzen wir die Tatsache, dass $4d|\partial\Omega^c| \geq |\partial\Omega|$ gilt. Daher folgt

$$\begin{aligned} E_{\Omega,\mu} + E_{\Omega^c,\mu} - E_{\Lambda,\mu} &\geq \alpha_1(\mu) (|\partial\Omega| + |\partial\Omega^c|) \\ &\geq \alpha_1(\mu) \left(|\partial\Omega| + \frac{1}{4d} |\partial\Omega| \right) = \left(1 + \frac{1}{4d}\right) \alpha_1(\mu) |\partial\Omega| = \tilde{\alpha}_1(\mu) |\partial\Omega| \end{aligned}$$

D. h.

$$E_{\Omega,\mu} + E_{\Omega^c,\mu} - E_{\Lambda,\mu} \geq \tilde{\alpha}_1(\mu) |\partial\Omega| \quad (5.34)$$

wobei $\tilde{\alpha}_1(\mu) := \left(1 + \frac{1}{4d}\right) \alpha_1(\mu)$. D. h. $\tilde{\alpha}_1(\mu)$ ist gegeben durch:

$$\tilde{\alpha}_1(\mu) := \left(1 + \frac{1}{4d}\right) \frac{1}{(4d)^2} \frac{(1-\mu)}{(4d-\mu)} \frac{1}{8} \frac{|S_d|}{(2\pi)^d} \left(\mu/2\right)^{\frac{2+d}{2}} \quad \text{für alle } 0 < \mu < 1 \quad (5.35)$$

Beweis des Korollars 5.2: Bemerke, dass $E_{\Lambda, \mu} = \text{Tr}_{\Lambda}\{[-\Delta - \mu \mathbf{1}]_{-}\} = e_{\Lambda}(\mu)|\Lambda|$, daher folgt nach Theorem 5.1, dass

$$\begin{aligned}
E_{\Omega, \mu} + E_{\Omega^c, \mu} - E_{\Lambda, \mu} &\geq e_{\Lambda}(\mu)|\Omega| + \alpha_1(\mu)|\partial\Omega| + e_{\Lambda}(\mu)|\Omega^c| + \alpha_1(\mu)|\partial\Omega^c| - e_{\Lambda}(\mu)|\Lambda| \\
&= e_{\Lambda}(\mu)(|\Omega| + |\Omega^c|) + \alpha_1(\mu)(|\partial\Omega| + |\partial\Omega^c|) - e_{\Lambda}(\mu)|\Lambda| \\
&= e_{\Lambda}(\mu)|\Lambda| + \alpha_1(\mu)(|\partial\Omega| + |\partial\Omega^c|) - e_{\Lambda}(\mu)|\Lambda| \\
&= \alpha_1(\mu)(|\partial\Omega| + |\partial\Omega^c|)
\end{aligned}$$

□

Bemerkung 5.2. Man kann ohne große Mühe zeigen, dass

$$\text{Tr}_{\Lambda}\{[P_{\Omega}(-\Delta - \mu \mathbf{1})P_{\Omega}]_{-}\} + \text{Tr}_{\Lambda}\{[P_{\Omega^c}(-\Delta - \mu \mathbf{1})P_{\Omega^c}]_{-}\} - \text{Tr}_{\Lambda}\{[-\Delta - \mu \mathbf{1}]_{-}\} \geq 0 \quad (5.36)$$

gilt.

Der Clou an dem Korollar 5.2 ist jedoch, dass diese leichtere Abschätzung in (5.36) durch einen Randterm verbessert wird. Weiterhin ist dieser Randterm durch $\tilde{\alpha}_1(\mu)|\partial\Omega|$ gegeben, wobei $\tilde{\alpha}_1(\mu)$ **postiv und unabhängig von Ω** ist.

Zum Beweis dieser leichteren Abschätzung in (5.36) bemerken wir, dass $\ell^2(\Lambda) \simeq \ell^2(\Omega) \oplus \ell^2(\Omega^c)$, da $\Lambda = \Omega \cup \Omega^c$ ist. Um die Notation zu vereinfachen, betrachten wir im Folgenden $H := -\Delta - \mu \mathbf{1}$, $P := P_{\Omega}$, $Q := P_{\Omega^c}$, $\gamma_{PHP} := \mathbf{1}[P_{\Omega}HP_{\Omega} < 0]$ und $\gamma_{QHQ} := \mathbf{1}[P_{\Omega^c}HP_{\Omega^c} < 0]$. Somit folgt:

$$\begin{aligned}
\text{Tr}\{[P_{\Omega}HP_{\Omega}]_{-}\} + \text{Tr}\{[P_{\Omega^c}HP_{\Omega^c}]_{-}\} - \text{Tr}\{[H]_{-}\} &= \text{Tr}\{PHP\gamma_{PHP}\} + \text{Tr}\{QHQ\gamma_{QHQ}\} - \text{Tr}\{[H]_{-}\} \\
&= \text{Tr}\left\{\begin{pmatrix} PHP & PHQ \\ QHP & QHQ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{PHP} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \gamma_{QHQ} \end{pmatrix}\right\} - \text{Tr}\{[H]_{-}\} \\
&= \text{Tr}\{H(\gamma_{PHP} \oplus \gamma_{QHQ})\} - \text{Tr}\{[H]_{-}\} \\
&= \text{Tr}\{H(\gamma_{PHP} \oplus \gamma_{QHQ})\} - \inf_{\mathbf{0} \leq \xi \leq \mathbf{1}} \text{Tr}\{H\xi\} \\
&\stackrel{(\bullet)}{=} \geq 0
\end{aligned}$$

wobei wir in (\bullet) benutzt haben, dass $\mathbf{0} \leq (\gamma_{PHP} \oplus \gamma_{QHQ}) \leq \mathbf{1}$ gilt.

5.2 Beweise der Lemmata für das Theorem 5.1

Beweis des Lemmas 5.1: Sei $H := -\Delta - \mu \mathbf{1} \in B(\ell^2(\Lambda))$ definiert.

$$\begin{aligned}
E_{\Omega, \mu} &= \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} e_j (P_{\Omega} H P_{\Omega}) = \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} \langle \varphi_j | P_{\Omega} H P_{\Omega} \varphi_j \rangle_{\ell^2(\Lambda)} = \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} \langle \varphi_j P_{\Omega} | H P_{\Omega} \varphi_j \rangle_{\ell^2(\Lambda)} \\
&\stackrel{(\bullet)}{=} \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} \langle \widehat{\varphi_j P_{\Omega}} | \widehat{H P_{\Omega} \varphi_j} \rangle_{\ell^2(BZ)} = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} \langle \widehat{\varphi_j P_{\Omega}} | \mathcal{M}_{(\varepsilon(\cdot) - \mu)} \widehat{P_{\Omega} \varphi_j} \rangle_{\ell^2(BZ)} \\
&= \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} \sum_{k \in BZ} \overline{\widehat{P_{\Omega} \varphi_j}(k)} (\varepsilon(k) - \mu) \widehat{P_{\Omega} \varphi_j}(k) = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} \sum_{k \in BZ} (\varepsilon(k) - \mu) |\widehat{P_{\Omega} \varphi_j}(k)|^2 \\
&= \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{k \in BZ} (\varepsilon(k) - \mu) \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} |\widehat{P_{\Omega} \varphi_j}(k)|^2 = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{k \in BZ} (\varepsilon(k) - \mu) \rho_{\Omega, \mu}(k)
\end{aligned}$$

In (\bullet) haben wir benutzt, dass die Fouriertransformation $\widehat{}$ eine Isometrie zwischen $\ell^2(\Lambda)$ und $\ell^2(BZ)$ ist. Siehe Gleichung (5.8). Und unter $\mathcal{M}_{\varepsilon - \mu}$ versteht man den Multiplikationsoperator mit $\varepsilon - \mu$, der auf einen Vektor von $\ell^2(BZ)$ wirkt.

□

Beweis des Lemmas 5.2:

Behauptung 5.1. Für alle $k \in BZ$ gilt:

$$\rho_{\Omega, \mu}(k) = \langle f_{(k)} | P_{-} f_{(k)} \rangle_{\ell^2(\Lambda)}, \quad (5.37)$$

wobei

$$|f_{(k)}\rangle := \sum_{x \in \Lambda} \delta_{x \in \Omega} e^{-ik \cdot x} |x\rangle \in \ell^2(\Lambda) \quad \text{und} \quad P_{-} := \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} |\varphi_j\rangle \langle \varphi_j| \in B(\ell^2(\Lambda)) \quad (5.38)$$

Behauptung 5.2.

$$\|f_{(k)}\|_{\ell^2(\Lambda)}^2 = |\Omega| \quad (5.39)$$

Nach Behauptungen 5.1, 5.2 und nach der Tatsache, dass $\mathbf{1}_{\ell^2(\Lambda)} = \sum_{j=1}^{|\Lambda|} |\varphi_j\rangle \langle \varphi_j|$ gilt, folgt

$$\begin{aligned}
\rho_{\Omega,\mu}(k) &= \langle f_{(k)} | P_- f_{(k)} \rangle_{\ell^2(\Lambda)} = \langle f_{(k)} | [\mathbf{1} - (\mathbf{1} - P_-)] f_{(k)} \rangle_{\ell^2(\Lambda)} \\
&= \langle f_{(k)} | f_{(k)} \rangle_{\ell^2(\Lambda)} - \langle f_{(k)} | (\mathbf{1} - P_-) f_{(k)} \rangle_{\ell^2(\Lambda)} \\
&= |\Omega| - \langle f_{(k)} | \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} |\varphi_j\rangle \langle \varphi_j| f_{(k)} \rangle_{\ell^2(\Lambda)} \\
&= |\Omega| - \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} \langle f_{(k)} | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | f_{(k)} \rangle_{\ell^2(\Lambda)} = |\Omega| - \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} |\langle f_{(k)} | \varphi_j \rangle_{\ell^2(\Lambda)}|^2 \\
&= |\Omega| - \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} \left| \sum_{x \in \Lambda} \delta_{x \in \Omega} e^{ik \cdot x} \varphi_j(x) \right|^2 = |\Omega| - \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} \left| \sum_{x \in \Lambda} e^{ik \cdot x} (P_\Omega \varphi_j)(x) \right|^2 \\
&= |\Omega| - \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} \left| \widehat{P_\Omega \varphi_j}(k) \right|^2 \leq |\Omega|
\end{aligned}$$

Beweis der Behauptung 5.1 : Für alle $k \in BZ$ gilt:

$$\begin{aligned}
\rho_{\Omega,\mu}(k) &:= \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} \left| \widehat{P_\Omega \varphi_j}(k) \right|^2 = \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} \widehat{P_\Omega \varphi_j}(k) \overline{\widehat{P_\Omega \varphi_j}(k)} = \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} \left(\sum_{x \in \Lambda} (P_\Omega \varphi_j)(x) e^{ikx} \right) \overline{\left(\sum_{y \in \Lambda} (P_\Omega \varphi_j)(y) e^{iky} \right)} \\
&= \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} \sum_{x,y \in \Lambda} (P_\Omega \varphi_j)(x) e^{ikx} \overline{(P_\Omega \varphi_j)(y) e^{iky}} = \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} \sum_{x,y \in \Lambda} \delta_{x \in \Omega} \varphi_j(x) e^{ikx} \delta_{y \in \Omega} \overline{\varphi_j(y) e^{iky}} \\
&= \sum_{x \in \Lambda} \delta_{x \in \Omega} e^{ikx} \sum_{y \in \Lambda} \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} \varphi_j(x) \overline{\varphi_j(y)} \delta_{y \in \Omega} e^{-iky} = \sum_{x \in \Lambda} \langle f_{(k)} | x \rangle \sum_{y \in \Lambda} \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} \langle x | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | y \rangle \langle y | f_{(k)} \rangle \\
&= \langle f_{(k)} | \left(\sum_{x \in \Lambda} |x\rangle \langle x| \right) \sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} |\varphi_j\rangle \langle \varphi_j| \left(\sum_{y \in \Lambda} |y\rangle \langle y| \right) | f_{(k)} \rangle = \langle f_{(k)} | \left(\sum_{\substack{j=1: \\ e_j < 0}}^{|\Lambda|} |\varphi_j\rangle \langle \varphi_j| \right) | f_{(k)} \rangle = \langle f_{(k)} | P_- f_{(k)} \rangle
\end{aligned}$$

Beweis der Behauptung 5.2:

$$\|f_{(k)}\|_{\ell^2(\Lambda)}^2 = \sum_{x \in \Lambda} |f_{(k)}(x)|^2 = \sum_{x \in \Lambda} |\delta_{x \in \Omega} e^{-ikx}|^2 = \sum_{x \in \Lambda} \delta_{x \in \Omega} = |\Omega|$$

□

Beweis des Lemmas 5.4:

Zum Beweis der oberen Schranke (5.14) mit Randvektor in (5.15) greifen wir auf das Lemma 5.2 zurück.

Das Lemma 5.2 besagt Folgendes:

$$\rho_{\Omega,\mu}(k) = |\Omega| - \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} \left| \widehat{P_\Omega \varphi_j}(k) \right|^2 \quad \text{für alle } k \in BZ \quad (5.40)$$

Weiterhin wird der Summand über j in (5.40) mit Hilfe der Gleichung (5.4)

$$(P_\Omega \varphi_j)(x)e_j = (2d - \mu)(P_\Omega \varphi_j)(x) - \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} (P_\Omega \varphi_j)(x+e) + \delta_{x \in \Omega^c} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} (P_\Omega \varphi_j)(x+e), \quad x \in \Lambda, \quad j = 1, 2, \dots, |\Lambda| \quad (5.4)$$

nach unten abgeschätzt, nämlich:

Behauptung 5.3. *Multipliziert man mit e^{ikx} und summiert über $x \in \Lambda$ beide Seiten der Gleichung (5.4), dann erhält man*

$$e_j \widehat{P_\Omega \varphi_j}(k) = (\varepsilon(k) - \mu) \widehat{P_\Omega \varphi_j}(k) + \sum_{x \in \Lambda} \delta_{x \in \Omega^c} \sum_{\substack{e \in \Lambda \\ |e|=1}} (P_\Omega \varphi_j)(x+e) e^{ikx}, \quad j = 1, 2, \dots, |\Lambda| \quad (5.41)$$

Hierbei versteht man unter $\widehat{\cdot}$ die Fouriertransformierte $\ell^2(BZ) \ni \widehat{\psi}(k) := \sum_{x \in \Lambda} \psi(x) e^{ikx}$ von $\psi \in \ell^2(\Lambda)$, $\Lambda := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$, $BZ := \left([-\pi, \pi) \cap \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z} \right)^d$ und $\varepsilon(k) := 2d - \sum_{\nu=1}^d 2 \cos(k_\nu)$.

Weiterhin gilt folgende Identität für den letzten Summanden in (5.41)

$$\sum_{x \in \Lambda} \delta_{x \in \Omega^c} \sum_{\substack{e \in \Lambda \\ |e|=1}} (P_\Omega \varphi_j)(x+e) e^{ikx} = \langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle_{\ell^2(\Lambda)} \quad j = 1, 2, \dots, |\Lambda| \quad (5.42)$$

mit $b_k(\partial\Omega) \in \ell^2(\Lambda)$ für jedes $k \in BZ$. Der Vektor $b_k(\partial\Omega) \in \ell^2(\Lambda)$ heißt Randvektor und seine Komponenten sind gegeben durch:

$$b_k(\partial\Omega)(x) := \chi_{\partial\Omega}(x) e^{-ikx} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1 \\ x+e \in \Omega^c}} e^{-ike}, \quad x \in \Lambda \quad (5.43)$$

Nach (5.41) und (5.42) gilt

$$(\varepsilon(k) - \mu - e_j)^2 |\widehat{P_\Omega \varphi_j}(k)|^2 = |\langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle|^2, \quad j = 1, 2, \dots, |\Lambda|. \quad (5.44)$$

Offensichtlich gilt $\varepsilon(k) - \mu \in [-\mu, 4d - \mu]$, wenn $k \in BZ$. Dies gilt auch für die Eigenwerte e_j von $P_\Omega(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_\Omega$, nämlich:

Behauptung 5.4. *Für alle beliebigen Teilmengen Ω des Gitters Λ und $\mu \in [0, 4d]$ gilt*

$$e_j \in \text{Spec}(P_\Omega(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_\Omega : \ell^2(\Lambda) \rightarrow \ell^2(\Lambda)) \subset [-\mu, 4d - \mu] \quad \text{für alle } j = 1, 2, \dots, |\Lambda|. \quad (5.45)$$

Daher folgt für alle $k \in BZ$ und alle $j = 1, 2, \dots, |\Lambda|$, dass

$$\begin{aligned} \left(\underbrace{\varepsilon(k) - \mu}_{:=\alpha} - \underbrace{e_j}_{:=\beta} \right)^2 &\leq \max\{ (\alpha - \beta)^2 \mid (\alpha, \beta) \in [-\mu, 4d - \mu] \times [-\mu, 4d - \mu] \} \quad (\text{nach (5.45)}) \\ &\stackrel{(\bullet)}{=} \max\{ [(4d - \mu) - (4d - \mu)]^2, [(4d - \mu) - (-\mu)]^2, [(-\mu) - (4d - \mu)]^2, [-\mu - (-\mu)]^2 \} \\ &= \max\{ 0, (4d)^2, (-4d)^2, 0 \} = (4d)^2 \end{aligned} \quad (5.46)$$

In (\bullet) haben wir die folgende Tatsache benutzt: Zur Bestimmung des Maximumwerts einer konvexen Funktion

$f(\alpha, \beta) = (\alpha - \beta)^2$ auf einer konvexen Menge $[-\mu, 4d - \mu] \times [-\mu, 4d - \mu]$ reicht es, die Extrempunkte dieser konvexen Menge zu analysieren.

Nach (5.44) und (5.46) erhalten wir

$$(4d)^2 |\widehat{P_\Omega \varphi_j}(k)|^2 \geq |\langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle|^2, \quad j = 1, 2, \dots, |\Lambda|.$$

und daher

$$\sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} |\widehat{P_\Omega \varphi_j}(k)|^2 \geq \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} \frac{1}{(4d)^2} |\langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle_{\ell^2(\Lambda)}|^2,$$

Diese letzte Ungleichung mit (5.40) beweist (5.14) und (5.15).

Zum Beweis von (5.16) haben wir

$$\begin{aligned} E_{\Omega, \mu} - e_\Lambda(\mu)|\Omega| &= \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{k \in BZ} (\varepsilon(k) - \mu) \rho_{\Omega, \mu}(k) - e_\Lambda(\mu)|\Omega| \quad \text{nach (5.5)} \\ &\geq \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{k \in BZ: \\ \varepsilon(k) < \mu}} (\varepsilon(k) - \mu) \left\{ |\Omega| - \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} \frac{1}{(4d)^2} |\langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle_{\ell^2(\Lambda)}|^2 \right\} - e_\Lambda(\mu)|\Omega| \quad \begin{array}{l} \text{nach (5.14) und} \\ \text{dem Badewannen-} \\ \text{prinzip} \end{array} \\ &= \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{k \in BZ: \\ \varepsilon(k) < \mu}} (\mu - \varepsilon(k)) \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} \frac{1}{(4d)^2} |\langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle_{\ell^2(\Lambda)}|^2 + \underbrace{\frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{k \in BZ: \\ \varepsilon(k) < \mu}} (\varepsilon(k) - \mu)|\Omega| - e_\Lambda(\mu)|\Omega|}_{=0} \\ &= \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{k \in BZ: \\ \varepsilon(k) < \mu}} (\mu - \varepsilon(k)) \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} \frac{1}{(4d)^2} |\langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle_{\ell^2(\Lambda)}|^2 \quad \begin{array}{l} \text{nach Definition von } e_\Lambda(\mu) \\ \text{siehe Gleichung (5.9)} \end{array} \end{aligned}$$

Nun beweisen wir die Behauptungen 5.3 und 5.4, um den Beweis des Lemmas 5.4 abzuschließen.

Beweis der Behauptung 5.3:

Der Übergang von (5.4) in (5.41) lässt sich leicht nachvollziehen, nämlich:

Für alle $j = 1, 2, \dots, |\Lambda|$ gilt

$$\begin{aligned} e_j \sum_{x \in \Lambda} (P_\Omega \varphi_j)(x) e^{ikx} &= (2d - \mu) \sum_{x \in \Lambda} (P_\Omega \varphi_j)(x) e^{ikx} - \sum_{x \in \Lambda} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} (P_\Omega \varphi_j)(x + e) e^{ikx} + \sum_{x \in \Lambda} \delta_{x \in \Omega^c} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} (P_\Omega \varphi_j)(x + e) e^{ikx} \\ e_j \widehat{P_\Omega \varphi_j}(k) &= (2d - \mu) \widehat{P_\Omega \varphi_j}(k) - \sum_{y \in \Lambda} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} (P_\Omega \varphi_j)(y) e^{ik(y-e)} + \sum_{x \in \Lambda} \delta_{x \in \Omega^c} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} (P_\Omega \varphi_j)(x + e) e^{ikx} \\ &= (2d - \mu) \widehat{P_\Omega \varphi_j}(k) - \left(\sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} e^{-ike} \right) \sum_{y \in \Lambda} (P_\Omega \varphi_j)(y) e^{iky} + \sum_{x \in \Lambda} \delta_{x \in \Omega^c} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} (P_\Omega \varphi_j)(x + e) e^{ikx} \\ &= (2d - \mu) \widehat{P_\Omega \varphi_j}(k) - \left(\sum_{\nu=1}^d 2\cos(k_\nu) \right) \widehat{P_\Omega \varphi_j}(k) + \sum_{x \in \Lambda} \delta_{x \in \Omega^c} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} (P_\Omega \varphi_j)(x + e) e^{ikx} \\ &= (\varepsilon(k) - \mu) \widehat{P_\Omega \varphi_j}(k) + \sum_{x \in \Lambda} \delta_{x \in \Omega^c} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} (P_\Omega \varphi_j)(x + e) e^{ikx} \end{aligned}$$

Zum Beweis von (5.42) und (5.43): Für alle $j = 1, 2, \dots, |\Lambda|$ gilt

$$\begin{aligned}
\sum_{x \in \Lambda} \delta_{x \in \Omega^c} \sum_{\substack{e \in \Lambda \\ |e|=1}} (P_\Omega \varphi_j)(x+e) e^{ikx} &= \sum_{\substack{e \in \Lambda \\ |e|=1}} \sum_{x \in \Lambda} \delta_{x \in \Omega^c} (P_\Omega \varphi_j)(x+e) e^{ikx} = \sum_{\substack{e \in \Lambda \\ |e|=1}} \sum_{y \in \Lambda} \delta_{y+(-e) \in \Omega^c} (P_\Omega \varphi_j)(y) e^{ik[y+(-e)]} \\
&= \sum_{\substack{e \in \Lambda \\ |e|=1}} \sum_{y \in \Lambda} \delta_{y+(-e) \in \Omega^c} \delta_{y \in \Omega} \varphi_j(y) e^{ik[y+(-e)]} \\
&= \sum_{\substack{\tilde{e} \in \Lambda \\ |\tilde{e}|=1}} \sum_{y \in \Lambda} \delta_{y+\tilde{e} \in \Omega^c} \delta_{y \in \Omega} \varphi_j(y) e^{ik[y+\tilde{e}]} \quad \text{da } \tilde{e} := -e \\
&\quad \text{und } |e| = |\tilde{e}| = 1 \\
&= \sum_{\substack{\tilde{e} \in \Lambda \\ |\tilde{e}|=1}} e^{ik\tilde{e}} \sum_{y \in \Lambda} \delta_{y+\tilde{e} \in \Omega^c} \delta_{y \in \Omega} \varphi_j(y) e^{iky} = \sum_{\substack{\tilde{e} \in \Lambda \\ |\tilde{e}|=1 \\ y+\tilde{e} \in \Omega^c}} e^{ik\tilde{e}} \sum_{y \in \Lambda} \delta_{y \in \partial\Omega} \varphi_j(y) e^{iky} \\
&= \sum_{y \in \Lambda} \left(\overline{\delta_{y \in \partial\Omega} e^{-iky} \sum_{\substack{\tilde{e} \in \Lambda \\ |\tilde{e}|=1 \\ y+\tilde{e} \in \Omega^c}} e^{-ik\tilde{e}}} \right) \varphi_j(y) = \langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle_{\ell^2(\Lambda)}
\end{aligned}$$

△

Beweis der Behauptung 5.4:

Wir können die Behauptung 5.4 unmittelbar aus folgendem Lemma beweisen.

Lemma 5.7. *Seien $A = A^\dagger \in B(\ell^2(\Lambda))$ und $P = P^\dagger = P^2 \in B(\ell^2(\Lambda))$. Seien weiterhin $e_1(A)$ und $e_1(PAP)$ der kleinste Eigenwert von A bzw. von PAP und $e_{|\Lambda|}(A)$ und $e_{|\Lambda|}(PAP)$ der größte Eigenwert von A bzw. von PAP , dann gilt Folgendes:*

$$\min\{0, e_1(A)\} \stackrel{(ii)}{\leq} e_1(PAP) \stackrel{(\text{trivial})}{\leq} e_{|\Lambda|}(PAP) \stackrel{(i)}{\leq} \max\{0, e_{|\Lambda|}(A)\}$$

Beweis: Seien die Mengen

$$B_1 := \{ \psi \in \ell^2(\Lambda) \mid \|\psi\| = 1 \}$$

$$B_{\leq 1}^+ := \{ \psi \in \ell^2(\Lambda) \mid 0 < \|\psi\| \leq 1 \}$$

$$B_{\leq 1} := \{ \psi \in \ell^2(\Lambda) \mid \|\psi\| \leq 1 \} = B_{\leq 1}^+ \cup \{0\}$$

und nehmen wir die allgemein bekannte Tatsache an, dass $e_{|\Lambda|}(A) = \sup_{\varphi \in B_1} \langle \varphi | A \varphi \rangle = \sup_{\varphi \in B_{\leq 1}^+} \langle \varphi | A \varphi \rangle$ und $e_1(A) = \inf_{\varphi \in B_1} \langle \varphi | A \varphi \rangle$ für alle $A = A^\dagger$ gilt.

Zu (i)

$$\begin{aligned}
e_{|\Lambda|}(PAP) &= \sup_{\varphi \in B_{\leq 1}^+} \langle \varphi | PAP \varphi \rangle = \sup_{\varphi \in B_{\leq 1}^+} \langle (P\varphi) | A(P\varphi) \rangle \\
&= \sup\{ \langle \psi | A\psi \rangle \mid \psi \in \text{Bild von } P \text{ auf } B_{\leq 1}^+ \} \\
&\stackrel{(\bullet)}{\leq} \sup\{ \langle \psi | A\psi \rangle \mid \psi \in B_{\leq 1} \} \\
&= \max\{ 0, \sup_{\psi \in B_{\leq 1}^+} \langle \psi | A\psi \rangle \} \quad \text{da } B_{\leq 1} = B_{\leq 1}^+ \cup \{0\} \\
&= \max\{ 0, e_{|\Lambda|}(A) \}
\end{aligned}$$

In (\bullet) haben wir benutzt, dass $\|\psi\| = \|P\varphi\| \leq \|P\|\|\varphi\| \leq \|\varphi\| \leq 1$ für $\varphi \in B_{\leq 1}^+$ (wobei $\|P\|$ die Operatornorm von P ist, die 0 oder 1 ist). D. h. $\|\psi\| \leq 1$, wenn $\varphi \in B_{\leq 1}^+$ (In diesem Fall kann $\|\psi\|$ auch gleich Null sein).

Zu (ii) : Da im Allgemeinen $e_1(A) = \inf_{\varphi \in B_1} \langle \varphi | A\varphi \rangle \neq \inf_{\varphi \in B_{\leq 1}^+} \langle \varphi | A\varphi \rangle$ (z.B. $A = \mathbf{1}$) ist, geht der Beweis zu (ii) nicht analog zu (i) , sondern benutzt man „ $\inf = -\sup - \dots$ “ und danach (i) , nämlich:

$$\begin{aligned}
e_1(PAP) &= \inf_{\varphi \in B_1} \langle \varphi | PAP \varphi \rangle = - \sup_{\varphi \in B_1} -\langle \varphi | PAP \varphi \rangle = - \sup_{\varphi \in B_1} \langle \varphi | P(-A)P \varphi \rangle \\
&\geq - \max\{ 0, e_{|\Lambda|}(-A) \} \quad \text{nach } (i) \text{ für den Operator } (-A) \\
&= - \max\{ 0, -e_1(A) \} = \min\{ -0, e_1(A) \} = \min\{ 0, e_1(A) \}
\end{aligned}$$

□

Verwende man das Lemma für $A = -\Delta - \mu\mathbf{1}$ und $P = P_\Omega$ folgt

$$\min\{ 0, e_1(-\Delta - \mu) \} \leq e_1(PAP) =: e_1 \leq e_{|\Lambda|} := e_{|\Lambda|}(PAP) \leq \max\{ 0, e_{|\Lambda|}(-\Delta - \mu) \},$$

genauer

$$\min\{ 0, -\mu \} \leq e_1(PAP) =: e_1 \leq e_{|\Lambda|} := e_{|\Lambda|}(PAP) \leq \max\{ 0, 4d - \mu \} \quad (5.47)$$

Also ist $0 \leq \mu \leq 4d$, dann können wir direkt aus (5.47) ablesen, dass $e_j \in [-\mu, 4d - \mu]$ für alle $j = 1, 2, \dots, |\Lambda|$ gilt. Δ

Dies beweist die Behauptung 5.4 und damit beenden wir den Beweis des Lemmas 5.4. \square

Beweis des Lemmas 5.5:

Zu (a): Siehe Behauptung 5.4.

Zu (b): da $P_\Omega(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_\Omega\varphi_j = e_j\varphi_j$ gilt, folgt

$$e_j \delta_{ij} = \langle \varphi_j | P_\Omega(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_\Omega \varphi_i \rangle \quad (5.48)$$

und daher

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{|\Lambda|} |\langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle_{\ell^2(\Lambda)}|^2 e_j &= \sum_{j=1}^{|\Lambda|} \langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle e_j \langle \varphi_j | b_k(\partial\Omega) \rangle = \sum_{j,i=1}^{|\Lambda|} \langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle e_j \delta_{ij} \langle \varphi_i | b_k(\partial\Omega) \rangle \\
&= \sum_{j,i=1}^{|\Lambda|} \langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | P_\Omega(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_\Omega \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | b_k(\partial\Omega) \rangle \quad \text{nach (5.48)} \\
&= \langle b_k(\partial\Omega) | \left(\sum_{j=1}^{|\Lambda|} |\varphi_j\rangle \langle \varphi_j| \right) P_\Omega(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_\Omega \left(\sum_{i=1}^{|\Lambda|} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \right) | b_k(\partial\Omega) \rangle \\
&= \langle b_k(\partial\Omega) | P_\Omega(-\Delta - \mu\mathbf{1})P_\Omega b_k(\partial\Omega) \rangle_{\ell^2(\Lambda)}
\end{aligned}$$

Zu (c): Das Resultat folgt aus der Tatsache, dass der Träger des Vektors $b_k(\partial\Omega)$ in $\partial\Omega$ ($\partial\Omega \subset \Omega$) enthalten ist. Somit gilt $P_\Omega b_k(\partial\Omega) = b_k(\partial\Omega) = b_k(\partial\Omega) P_\Omega$.

Zu (d):

$$\begin{aligned}
\langle b_k(\partial\Omega) | (-\Delta) b_k(\partial\Omega) \rangle &= \sum_{\substack{x,y \in \Lambda: \\ |x-y|=1}} |b_k(\partial\Omega)(x) - b_k(\partial\Omega)(y)|^2 \\
&= \sum_{x \in \Lambda} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1}} |b_k(\partial\Omega)(x) - b_k(\partial\Omega)(x+e)|^2 \\
&\geq \sum_{x \in \partial\Omega} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1 \\ e+x \in \Omega^c}} |b_k(\partial\Omega)(x) - b_k(\partial\Omega)(x+e)|^2 \\
&= \sum_{x \in \partial\Omega} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1 \\ e+x \in \Omega^c}} |b_k(\partial\Omega)(x)|^2 \quad \text{da } x+e \notin \Omega \Rightarrow x+e \notin \partial\Omega \Rightarrow b_k(\partial\Omega)(x+e) = 0 \\
&= \sum_{x \in \partial\Omega} \underbrace{\#\{e \in \Lambda : |e|=1 \text{ und } e+x \in \Omega^c\}}_{\geq 1} |b_k(\partial\Omega)(x)|^2 \stackrel{(\bullet)}{\geq} \sum_{x \in \partial\Omega} |b_k(\partial\Omega)(x)|^2 \\
&= \sum_{x \in \Lambda} |b_k(\partial\Omega)(x)|^2 = \|b_k(\partial\Omega)\|_{\ell^2(\Lambda)}^2 \quad \text{da der Träger des Vektors } b_k(\partial\Omega) \text{ in } \partial\Omega \text{ ist.}
\end{aligned}$$

In (\bullet) haben wir die Definition von $\partial\Omega$ benutzt, nämlich: Ist $x \in \partial\Omega$, dann existiert mindestens ein $e \in \Lambda$ mit $|e|=1$, so dass $x+e \in \Omega^c$.

Zu (e): Dieser Beweis basiert auf der Tatsache, dass

$$|k|_\infty := \max_{\nu \in \{1, \dots, d\}} |k_\nu| \leq \frac{\pi}{3} \quad \implies \quad \cos(k_\nu) = \cos(-k_\nu) \geq \frac{1}{2} \quad \text{für alle } \nu \in \{1, \dots, d\} \quad (5.49)$$

Ist $|k|_\infty \leq \frac{\pi}{3}$, dann gilt Folgendes:

$$\begin{aligned}
\|b_k(\partial\Omega)\|_{\ell^2(\Lambda)}^2 &= \sum_{x \in \Lambda} |b_k(\partial\Omega)(x)|^2 = \sum_{x \in \Lambda} \left| \chi_{\partial\Omega}(x) e^{-ikx} \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1 \\ x+e \in \Omega^c}} e^{-ike} \right|^2 \\
&= \sum_{x \in \partial\Omega} \left| \sum_{\substack{e \in \Lambda: \\ |e|=1 \\ x+e \in \Omega^c}} e^{-ike} \right|^2 = \sum_{x \in \partial\Omega} \left| \sum_{(\nu, \sigma) \in B_x} e^{-i\sigma k_\nu} \right|^2 \\
&= \sum_{x \in \partial\Omega} \left(\sum_{(\nu, \sigma) \in B_x} \operatorname{Re}\{e^{-i\sigma k_\nu}\} \right)^2 + \sum_{x \in \partial\Omega} \left(\sum_{(\nu, \sigma) \in B_x} \operatorname{Im}\{e^{-i\sigma k_\nu}\} \right)^2 \\
&= \sum_{x \in \partial\Omega} \left(\sum_{(\nu, \sigma) \in B_x} \cos(\sigma k_\nu) \right)^2 + \sum_{x \in \partial\Omega} \left(\sum_{(\nu, \sigma) \in B_x} \sin(\sigma k_\nu) \right)^2 \\
&\geq \sum_{x \in \partial\Omega} \left(\sum_{(\nu, \sigma) \in B_x} \cos(\sigma k_\nu) \right)^2 \\
&\geq \sum_{x \in \partial\Omega} \left(\sum_{(\nu, \sigma) \in B_x} \frac{1}{2} \right)^2 \quad \text{nach (5.49)} \\
&= \sum_{x \in \partial\Omega} \left(|B_x| \frac{1}{2} \right)^2 \geq \sum_{x \in \partial\Omega} \frac{1}{4} = \frac{1}{4} |\partial\Omega| \quad \text{da } |B_x| \geq 1, \text{ wenn } x \in \partial\Omega
\end{aligned}$$

Hierbei ist

$$B_x := \{(\nu, \sigma) \in \{1, \dots, d\} \times \{-1, 1\} \mid x + (0, 0, \underbrace{\sigma}_{\nu\text{-te Stelle}}, 0, 0) \in \Omega^c\}$$

Zu (f): Das Resultat folgt unmittelbar aus (5.20) und (5.21), namlich:

Sei $\mu \in [0, 1]$, dann gilt:

$$\begin{aligned}
\langle b_k(\partial\Omega) | (-\Delta - \mu \mathbf{1}) b_k(\partial\Omega) \rangle &= \langle b_k(\partial\Omega) | (-\Delta) b_k(\partial\Omega) \rangle - \mu \|b_k(\partial\Omega)\|_{\ell^2(\Lambda)}^2 \\
&\geq \|b_k(\partial\Omega)\|_{\ell^2(\Lambda)}^2 - \mu \|b_k(\partial\Omega)\|_{\ell^2(\Lambda)}^2 \quad \text{nach (5.20)} \\
&= (1 - \mu) \|b_k(\partial\Omega)\|_{\ell^2(\Lambda)}^2 \\
&\geq (1 - \mu) \frac{1}{4} |\partial\Omega| \quad \text{nach (5.21) und da } (1 - \mu) \geq 0 \text{ ist.}
\end{aligned}$$

Zu (g): Es reicht zu zeigen, dass

$$\{k \in [-\pi, \pi]^d \mid \varepsilon(k) \leq \varepsilon((\frac{\pi}{3}, 0, 0, \dots, 0)) = 1\} \subset \{k \in [-\pi, \pi]^d \mid |k|_\infty \leq \frac{\pi}{3}\} \quad (5.50)$$

Tatsachlich, angenommen, ware $k \in [-\pi, \pi]^d$ und $|k|_\infty > \frac{\pi}{3}$, dann existiert ein $\nu_* \in \{1, 2, \dots, d\}$, so dass

$$|k|_\infty := \max_{\nu \in \{1, \dots, d\}} |k_\nu| = |k_{\nu_*}|$$

Weiterhin galte

$$|k_{\nu_*}| > \frac{\pi}{3} \implies -2 \cos(k_{\nu_*}) > -2 \cos(\frac{\pi}{3}) = -1 \quad (5.51)$$

Somit folgt unter der Annahme $|k|_\infty > \frac{\pi}{3}$, dass

$$\begin{aligned}
\varepsilon(k) &:= 2d - 2 \sum_{\nu=1}^d \cos(k_\nu) = 2d - 2 \sum_{\substack{\nu=1: \\ \nu \neq \nu_*}}^d \cos(k_\nu) - 2 \cos(k_{\nu_*}) \\
&\geq 2d - 2(d-1) - 2 \cos(k_{\nu_*}) \\
&> 2d - 2(d-1) - 1 \quad \text{nach (5.51)} \\
&= 1 = \varepsilon\left(\frac{\pi}{3}, 0, \dots, 0\right),
\end{aligned}$$

was (5.50) zeigt. □

Beweis des Lemmas 5.6:

Für alle $\mu \in [0, 4d]$ und für alle $k \in BZ$ gilt

$$\begin{aligned}
(4d - \mu) \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} |\langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle|^2 &\geq \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} |\langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle|^2 e_j \quad \text{da } 4d - \mu \geq e_j \geq 0 \quad \text{siehe (5.17)} \\
&\geq \sum_{j=1}^{|\Lambda|} |\langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle|^2 e_j \\
&= \langle b_k(\partial\Omega) | P_\Omega(-\Delta - \mu \mathbf{1}) P_\Omega b_k(\partial\Omega) \rangle \quad \text{nach (5.18)}
\end{aligned}$$

Also gilt

$$(4d - \mu) \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} |\langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle|^2 \geq \langle b_k(\partial\Omega) | P_\Omega(-\Delta - \mu \mathbf{1}) P_\Omega b_k(\partial\Omega) \rangle, \quad \mu \in [0, 4d] \quad \text{und für alle } k \in BZ \quad (5.52)$$

Daher nun für alle $\mu \in [0, 1]$ und $|k|_\infty \leq \frac{\pi}{3}$ gilt

$$\begin{aligned}
\frac{1}{(4d)^2} \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} |\langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle|^2 &= \frac{1}{(4d)^2(4d-\mu)} (4d - \mu) \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} |\langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle|^2 \\
&\geq \frac{1}{(4d)^2(4d-\mu)} \langle b_k(\partial\Omega) | P_\Omega(-\Delta - \mu \mathbf{1}) P_\Omega b_k(\partial\Omega) \rangle \quad \text{nach (5.52)} \\
&= \frac{1}{(4d)^2(4d-\mu)} \langle b_k(\partial\Omega) | (-\Delta - \mu \mathbf{1}) b_k(\partial\Omega) \rangle \quad \begin{array}{l} \text{da der Träger von } b_k(\partial\Omega) \subset \partial\Omega \subset \Omega \\ \text{d. h. } b_k(\partial\Omega) P_\Omega = b_k(\partial\Omega) = P_\Omega b_k(\partial\Omega) \end{array} \\
&\geq \frac{1}{(4d)^2(4d-\mu)} (1 - \mu) \frac{1}{4} |\partial\Omega| \quad \text{nach (5.22) \quad siehe die Voraussetzungen} \\
&\quad \quad \quad 0 \leq \mu \leq 1 \quad \text{und } |k|_\infty \leq \frac{\pi}{3}
\end{aligned}$$

Also gilt

$$\frac{1}{(4d)^2} \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|\Lambda|} |\langle b_k(\partial\Omega) | \varphi_j \rangle|^2 \geq \frac{1}{(4d)^2(4d-\mu)} (1 - \mu) \frac{1}{4} |\partial\Omega|, \quad \text{falls } \mu \in [0, 1] \quad \text{und } |k|_\infty \leq \frac{\pi}{3} \quad (5.53)$$

Ist $0 \leq \mu \leq \varepsilon((\frac{\pi}{3}, 0, \dots, 0)) = 1$, dann folgt nach (5.23), dass

$$\{k \in BZ \mid \varepsilon(k) < \mu\} \subset \{k \in BZ \mid |k|_\infty \leq \frac{\pi}{3}\}$$

Und daher darf man die Ungleichung (5.53) ohne die Einschränkung $|k|_\infty \leq \frac{\pi}{3}$ in die nachfolgende Summe über $\{k \in BZ \mid \varepsilon(k) < \mu\}$ einsetzen, wenn $0 \leq \mu \leq \min\{1, \varepsilon((\frac{\pi}{3}, 0, 0, \dots, 0)) = 1\} = 1$ ist. Nämlich erhalten wir Folgendes:

$$\sum_{\substack{k \in BZ: \\ \varepsilon(k) < \mu}} \left\{ (\mu - \varepsilon(k)) \sum_{\substack{j=1: \\ e_j \geq 0}}^{|A|} \frac{1}{(4d)^2} |\langle b_k(\partial\Omega) \mid \varphi_j \rangle_{\ell^2(\Lambda)}|^2 \right\} \geq \frac{1}{(4d)^2} \frac{(1-\mu)}{(4d-\mu)} \frac{1}{4} |\partial\Omega| \sum_{\substack{k \in BZ: \\ \varepsilon(k) < \mu}} (\mu - \varepsilon(k)), \quad \text{falls } 0 \leq \mu \leq 1,$$

was das Lemma 5.6 beweist. □

5.3 Anhang zum Kapitel 5 (Potenzgesetz $\mu^{\frac{2+d}{2}}$ für $\tilde{\alpha}_1(\mu, d)$)

Erinnern wir uns, dass

$$\tilde{\alpha}_1(\mu, d) := \left(1 + \frac{1}{4d}\right) \frac{1}{(4d)^2} \frac{(1-\mu)}{(4d-\mu)} \frac{1}{4} \left(-e_\Lambda(\mu)\right).$$

In diesem Anhang schätzen wir die Energie pro Gitterplatz $e_\Lambda(\mu)$ (siehe Definition 5.2) durch ein Potenzgesetz in μ ab, nämlich:

Proposition 5.1. *Für alle $L, d \in \mathbb{N}$ und $\mu \geq 0$ gilt folgende Abschätzung:*

$$-e_\Lambda(\mu) \geq \frac{|S_d|}{(2\pi)^d} \left(\mu/2\right)^{\frac{2+d}{2}} - \frac{2\pi d}{L} \quad \text{für alle } \mu \geq 0, \quad (5.54)$$

wobei $e_\Lambda(\mu)$ (siehe Definition 5.2) gegeben ist durch:

$$-e_\Lambda(\mu) := -\frac{1}{|\Lambda|} \text{Tr}_\Lambda \{[-\Delta - \mu \mathbf{1}]_-\} = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{k \in BZ_{L,d} \\ \varepsilon(k) < \mu}} \mu - \varepsilon(k)$$

und weiterhin

$$\Lambda = \Lambda_{L,d} = \left(\mathbb{Z}/L\mathbb{Z}\right)^d \quad (\text{Gitter}) \quad \text{und} \quad BZ = BZ_{L,d} := \left([-\pi, \pi) \cap \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}\right)^d \quad (\text{Brillouin-Zone})$$

Bemerke, dass $|\Lambda| = |BZ| = L^d$.

Der Beweis der Proposition 5.1 folgt unmittelbar aus den folgenden zwei Lemmata.

Lemma 5.8. *(Abweichung vom thermodynamischen Limes)*

Für alle L und $d \in \mathbb{N}$ gilt

$$\left| (-e_\Lambda)(\mu) - \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\substack{k \in (-\pi, \pi]^d \\ \varepsilon(k) < \mu}} (\mu - \varepsilon(k)) d^d k \right| = \left| \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{k \in BZ_{L,d} \\ \varepsilon(k) < \mu}} [\mu - \varepsilon(k)] - \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\substack{k \in (-\pi, \pi]^d \\ \varepsilon(k) < \mu}} (\mu - \varepsilon(k)) d^d k \right| \leq \frac{2\pi d}{L} \quad (5.55)$$

Lemma 5.9. *(Potenzgesetz für den thermodynamischen Limes)*

Für alle $\mu \geq 0$ gilt

$$\frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\substack{k \in (-\pi, \pi]^d \\ \varepsilon(k) < \mu}} (\mu - \varepsilon(k)) d^d k \geq \frac{|S_d|}{(2\pi)^d} \left(\frac{\mu}{2}\right)^{\frac{2+d}{2}} \quad (5.56)$$

Hierbei ist $|S_d|$ das Volumen der d -dimensionalen Einheitskugel, nämlich:

$$|S_d| = \int_{\substack{k \in \mathbb{R}^d \\ |k|_2 \leq 1}} d^d k = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2} + 1)}, \quad d \geq 1$$

Beweis des Lemmas 5.8:

Für $\xi \in \mathbb{T}^d := [-\pi, \pi]^d$ sei definiert

$$\mathbf{Q}_r(\xi) := \{ k \in \mathbb{T}^d \mid |k - \xi|_\infty := \max_{\nu \in \{1, \dots, d\}} |k_\nu - \xi_\nu| < r \} \quad \text{mit } r > 0.$$

Nach Definition der Brillouin-Zone gilt Folgendes, wenn $r = \frac{1}{2} \frac{2\pi}{L} = \frac{\pi}{L}$:

(a)

$$\mathbf{Q}_{\frac{\pi}{L}}(\xi_1) \cap \mathbf{Q}_{\frac{\pi}{L}}(\xi_2) = \emptyset \quad \text{falls } \xi_1, \xi_2 \in BZ_{L,d} \quad \text{und} \quad \xi_1 \neq \xi_2$$

(5.57)

(b)

$$\tilde{\mathbb{T}}^d := \bigcup_{\xi \in BZ_{L,d}} \mathbf{Q}_{\frac{\pi}{L}}(\xi) \subset \mathbb{T}^d \quad \text{und} \quad \text{das Lebesgue-Ma\ss } \mu_{\text{Leb}}(\mathbb{T}^d - \tilde{\mathbb{T}}^d) = 0$$

Nach (a) ist die folgende Funktion $\xi : \tilde{\mathbb{T}}^d \rightarrow BZ_{L,d}$ wohldefiniert:

$$\xi(k) := \{ \xi \in BZ_{L,d} \mid k \in \mathbf{Q}_{\frac{\pi}{L}}(\xi) \} \quad (5.58)$$

Behauptung 5.5. *Sei eine Funktion $g : \mathbb{T}^d \rightarrow \mathbb{R}$, dann lässt sich ihr Mittel auf der Brillouin-Zone durch ein Integral über \mathbb{T}^d folgendermaßen ausdrücken:*

$$\frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\eta \in BZ_{L,d}} g(\eta) = \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} \int_{\mathbb{T}^d} g(\xi(k)) d^d k \quad (5.59)$$

Behauptung 5.6. *Folgende Abschätzung gilt:*

$$\begin{aligned} \left| (-e_\Lambda)(\mu) - \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} \int_{\substack{k \in \mathbb{T}^d \\ \varepsilon(k) < \mu}} (\mu - \varepsilon(k)) d^d k \right| &= \left| (-e_\Lambda)(\mu) - \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} \int_{\mathbb{T}^d} [\mu - \varepsilon(k)] \chi(\varepsilon(k) < \mu) d^d k \right| \\ &\leq \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} \sum_{\xi \in BZ_{L,d}} \int_{\mathbf{Q}_{\frac{\pi}{L}}(\xi)} \left| [\mu - \varepsilon(\xi)] \chi(\varepsilon(\xi) < \mu) - [\mu - \varepsilon(k)] \chi(\varepsilon(k) < \mu) \right| d^d k \end{aligned} \quad (5.60)$$

Behauptung 5.7. *Für alle $\xi \in BZ_{L,d}$ und $k \in \mathbf{Q}_{\frac{\pi}{L}}(\xi)$ gilt*

$$\left| [\mu - \varepsilon(\xi)] \chi(\varepsilon(\xi) < \mu) - [\mu - \varepsilon(k)] \chi(\varepsilon(k) < \mu) \right| \leq \frac{2\pi d}{L} \quad (5.61)$$

Nun folgt der Beweis des Lemmas 5.8 unmittelbar aus den Behauptungen 5.6 und 5.7, nämlich:

$$\begin{aligned} \left| (-e_\Lambda)(\mu) - \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} \int_{\substack{k \in \mathbb{T}^d \\ \varepsilon(k) < \mu}} (\mu - \varepsilon(k)) d^d k \right| &\leq \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} \sum_{\xi \in BZ_{L,d}} \int_{\mathbf{Q}_{\frac{\pi}{L}}(\xi)} \frac{2\pi d}{L} d^d k \\ &= \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} |BZ_{L,d}| |\mathbf{Q}_{\frac{\pi}{L}}(\xi)| \frac{2\pi d}{L} = \frac{1}{(2\pi)^d} L^d \left(\frac{2\pi}{L}\right)^d \frac{2\pi d}{L} = \frac{2\pi d}{L} \end{aligned}$$

Damit wir den Beweis des Lemmas 5.8 schließen, bleibt es nur die Behauptungen 5.5-5.7 zu zeigen.

Beweis der Behauptung 5.5:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} \int_{\mathbb{T}^d} g(\xi(k)) d^d k &\stackrel{(\bullet)}{=} \frac{1}{|\tilde{\mathbb{T}}^d|} \int_{\tilde{\mathbb{T}}^d} g(\xi(k)) d^d k \stackrel{(\circ)}{=} \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} \sum_{\xi \in BZ_{L,d}} \int_{\mathbf{Q}_{\frac{\pi}{L}}(\xi)} g(\xi(k)) d^d k \stackrel{(\star)}{=} \frac{1}{(2\pi)^d} \sum_{\xi \in BZ_{L,d}} g(\xi) \int_{\mathbf{Q}_{\frac{\pi}{L}}(\xi)} d^d k \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \left[\sum_{\xi \in BZ_{L,d}} g(\xi) \right] \left(\frac{2\pi}{L} \right)^d = \frac{1}{L^d} \sum_{\xi \in BZ_{L,d}} g(\xi) = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\xi \in BZ_{L,d}} g(\xi) \end{aligned}$$

In (\bullet) und (\circ) haben wir den Punkt (b) aus (5.57) benutzt, nämlich dass $\mu_{\text{Leb}}(\mathbb{T}^d - \tilde{\mathbb{T}}^d) = 0$ bzw. $\tilde{\mathbb{T}}^d := \bigcup_{\xi \in BZ_{L,d}} \mathbf{Q}_{\frac{\pi}{L}}(\xi)$.

In (\star) haben wir die wohldefinierte Funktion (5.58) benutzt.

△

Beweis der Behauptung 5.6:

Verwende man die Behauptung 5.5 für $g(k) = [\mu - \varepsilon(k)][\chi(\mu < \varepsilon(k))]$, $k \in \mathbb{T}^d$, nämlich:

$$\begin{aligned} \left| (-e_\Lambda)(\mu) - \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} \int_{\substack{k \in \mathbb{T}^d \\ \varepsilon(k) < \mu}} (\mu - \varepsilon(k)) d^d k \right| &= \left| \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{k \in BZ_{L,d} \\ \varepsilon(k) < \mu}} [\mu - \varepsilon(k)] - \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} \int_{\mathbb{T}^d} [\mu - \varepsilon(k)] [\chi(\varepsilon(k) < \mu)] d^d k \right| \\ &= \left| \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{k \in BZ_{L,d}} [\mu - \varepsilon(k)] [\chi(\varepsilon(k) < \mu)] - \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} \int_{\mathbb{T}^d} [\mu - \varepsilon(k)] [\chi(\varepsilon(k) < \mu)] d^d k \right| \\ &= \left| \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\eta \in BZ_{L,d}} g(\eta) - \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} \int_{\mathbb{T}^d} g(k) d^d k \right| \\ &= \left| \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} \int_{\mathbb{T}^d} g(\xi(k)) d^d k - \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} \int_{\mathbb{T}^d} g(k) d^d k \right| \begin{array}{l} \text{nach Behauptung 5.5} \\ \text{mit } g(k) = [\mu - \varepsilon(k)] [\chi(\varepsilon(k) < \mu)] \end{array} \\ &\leq \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} \int_{\mathbb{T}^d} |g(\xi(k)) - g(k)| d^d k \\ &= \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} \sum_{\xi \in BZ_{L,d}} \int_{\mathbf{Q}_{\frac{\pi}{L}}(\xi)} |g(\xi(k)) - g(k)| d^d k \quad \text{nach Punkt (b) aus (5.57)} \\ &= \frac{1}{|\mathbb{T}^d|} \sum_{\xi \in BZ_{L,d}} \int_{\mathbf{Q}_{\frac{\pi}{L}}(\xi)} |g(\xi) - g(k)| d^d k \quad \text{nach (5.58)} \end{aligned}$$

△

Beweis der Behauptung 5.7 :

Ist $k \in \mathbf{Q}_{\frac{\pi}{L}}(\xi) \subset \mathbb{T}^d := [-\pi, \pi]^d$ mit $\xi \in BZ_{L,d}$ dann treten 4 Fälle auf, nämlich:

$$\begin{aligned} &\left| [\mu - \varepsilon(\xi)] [\chi(\varepsilon(\xi) < \mu)] - [\mu - \varepsilon(k)] [\chi(\varepsilon(k) < \mu)] \right| = \\ &= \begin{cases} 0 & , \text{ falls } \varepsilon(\xi) \geq \mu \text{ und } \varepsilon(k) \geq \mu \quad \text{1.Fall} \\ |(\mu - \varepsilon(\xi)) - (\mu - \varepsilon(k))| & , \text{ falls } \varepsilon(\xi) < \mu \text{ und } \varepsilon(k) < \mu \quad \text{2.Fall} \\ |0 - (\mu - \varepsilon(k))| & , \text{ falls } \varepsilon(\xi) \geq \mu \text{ und } \varepsilon(k) < \mu \quad \text{3.Fall} \\ |(\mu - \varepsilon(\xi)) - 0| & , \text{ falls } \varepsilon(k) < \mu \text{ und } \varepsilon(k) \geq \mu \quad \text{4.Fall} \end{cases} \end{aligned}$$

Nun zeigen wir, dass in allen diesen 4 Fällen die Ungleichung (5.61) erfüllt wird, wenn $k \in \mathbf{Q}_{\frac{\pi}{L}}(\xi)$.

Zum 1. Fall gibt es nichts zu beweisen, da die Ungleichung (5.61) automatisch erfüllt ist.

Zum 2. Fall benutzen wir folgendes Lemma:

Lemma 5.10. Sei $\gamma : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ ein stetiger und differenzierbarer Weg auf $(0, 1)$. Ist $|\gamma'(t)| \leq M$ für alle $t \in (0, 1)$ dann gilt:

$$|\gamma(1) - \gamma(0)| \leq M(1 - 0) = M$$

Beweis: Es folgt unmittelbar aus dem Mittelwertsatz der Differentialrechnung.

Verwende man dieses Lemma mit $\gamma(t) := \varepsilon((1-t)\xi + tk)$, erhält man

$$\begin{aligned} |\gamma'(t)| &= \left| \sum_{\nu=1}^d \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\nu}((1-t)\xi + tk) \cdot (k_\nu - \xi_\nu) \right| \leq \sum_{\nu=1}^d \left| \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\nu}((1-t)\xi + tk) \right| |k_\nu - \xi_\nu| \\ &\leq \sum_{\nu=1}^d \left| \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\nu}((1-t)\xi + tk) \right| \frac{\pi}{L} \quad \text{da } k \in \mathbf{Q}_{\frac{\pi}{L}}(\xi) \\ &= \sum_{\nu=1}^d \left| 2 \sin((1-t)\xi_\nu + tk_\nu) \right| \frac{\pi}{L} \leq d \cdot 2 \frac{\pi}{L} = \frac{2\pi d}{L} \end{aligned}$$

Also können wir das Lemma 5.10 mit $M = \frac{2\pi d}{L}$ verwenden und dabei erhalten wir:

$$|(\mu - \varepsilon(\xi)) - (\mu - \varepsilon(k))| = |\varepsilon(\xi) - \varepsilon(k)| = |\gamma(0) - \gamma(1)| \leq M = \frac{2\pi d}{L}, \quad (5.62)$$

was den Beweis des 2. Falls schließt.

Zum 3. Fall bemerke, dass in diesem Fall gilt

$$\begin{aligned} |0 - (\mu - \varepsilon(k))| &= \mu - \varepsilon(k) \quad \text{da } \varepsilon(k) < \mu \quad (3. \text{ Fall}) \\ &\leq \mu - \varepsilon(k) + \varepsilon(\xi) - \mu \quad \text{da } \varepsilon(\xi) \geq \mu \quad (3. \text{ Fall}) \\ &= \mu - \varepsilon(k) - (\mu - \varepsilon(\xi)) = |\mu - \varepsilon(\xi) - (\mu - \varepsilon(k))| \\ &\leq \frac{2\pi d}{L} \quad \text{nach (5.62)} \end{aligned}$$

Zum 4. Fall: Dieser Fall ist analog zum 3. Fall, nämlich:

$$\begin{aligned} |(\mu - \varepsilon(\xi)) - 0| &= \mu - \varepsilon(\xi) \quad \text{da } \varepsilon(\xi) < \mu \quad (4. \text{ Fall}) \\ &\leq \mu - \varepsilon(\xi) + \varepsilon(k) - \mu \quad \text{da } \varepsilon(k) \geq \mu \quad (4. \text{ Fall}) \\ &= \mu - \varepsilon(\xi) - (\mu - \varepsilon(k)) = |\mu - \varepsilon(\xi) - (\mu - \varepsilon(k))| \\ &\leq \frac{2\pi d}{L} \quad \text{nach (5.62)} \end{aligned}$$

Damit sind die Behauptungen 5.5 – 5.7 gezeigt, und daher ist das Lemma 5.8 bewiesen. □

Beweis des Lemmas 5.9:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\substack{k \in (-\pi, \pi]^d \\ \varepsilon(k) < \mu}} (\mu - \varepsilon(k)) d^d k &\geq \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\substack{k \in (-\pi, \pi]^d \\ \varepsilon(k) \leq \frac{\mu}{2}}} (\mu - \varepsilon(k)) d^d k \geq \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\substack{k \in (-\pi, \pi]^d \\ \varepsilon(k) \leq \frac{\mu}{2}}} (\mu - \frac{\mu}{2}) d^d k \\
&= \frac{\mu/2}{(2\pi)^d} \int_{\substack{k \in (-\pi, \pi]^d \\ \varepsilon(k) \leq \frac{\mu}{2}}} d^d k
\end{aligned} \tag{5.63}$$

Aber nun gilt

$$\{ k \in (-\pi, \pi]^d \mid \varepsilon(k) \leq \mu/2 \} \supset \{ k \in (-\pi, \pi]^d \mid |k|_2^2 := \sum_{\nu=1}^d k_\nu^2 \leq \mu/2 \} \quad \text{da für alle } k \in \mathbb{R}^d \text{ gilt } \varepsilon(k) \leq |k|_2^2$$

daher folgt

$$\begin{aligned}
\frac{\mu/2}{(2\pi)^d} \int_{\substack{k \in (-\pi, \pi]^d \\ \varepsilon(k) \leq \frac{\mu}{2}}} d^d k &\geq \frac{\mu/2}{(2\pi)^d} \int_{\substack{k \in (-\pi, \pi]^d \\ |k|_2^2 \leq \frac{\mu}{2}}} d^d k \\
&= \frac{\mu/2}{(2\pi)^d} |S_d^{R=\sqrt{\mu/2}}| = \frac{\mu/2}{(2\pi)^d} (\sqrt{\mu/2})^d |S_d^{R=1}| = \frac{\mu/2}{(2\pi)^d} (\mu/2)^{d/2} |S_d| \\
&= \frac{|S_d|}{(2\pi)^d} \left(\frac{\mu}{2} \right)^{\frac{2+d}{2}}
\end{aligned} \tag{5.64}$$

Nach (5.63) und (5.64) ist das Lemma 5.9 bewiesen. □

Und daher ist die Proposition 5.1 bewiesen. □

6 Eine positive untere Schranke an der Dichte

$\mathcal{D}_-[\Omega, V, d](x) := \langle x | \mathbf{1}_{[P_\Omega(-\Delta+V)P_\Omega < 0]} x \rangle$ mit $-\mu \leq V \leq -\frac{\mu}{2} < 0$ und $x \in \text{Box} := \{x - M, \dots, x, \dots, x + M\}^d \subset \Omega \subset \Lambda$

6.1 Problemstellung

Ziel: Sei Ω eine beliebige Teilmenge von $\Lambda := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$, $L, d \in \mathbb{N}$ und $H := -\Delta + V \in B(\ell^2(\Lambda))$ ein diskreter Schrödinger-Operator auf dem Gitter Λ , wobei das Potential $V : \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ folgende Eigenschaft besitzt:

$$-\mu \leq V(x) \leq -\mu/2 \quad \text{für alle } x \in \Lambda \quad \text{mit } 0 < \mu < 1 \quad (6.1)$$

Seien weiterhin $H_\Omega := P_\Omega H P_\Omega \in B(\ell^2(\Omega))$ mit $P_\Omega = \sum_{x \in \Omega} \mathbf{1}_x$ Projektion auf Ω und $\{\varphi_j\}_{j=1}^{|\Lambda|}$ eine ON-Basis von Eigenfunktionen zu Eigenwerten λ_j von $H_\Omega \in B(\ell^2(\Omega))$.

D. h. $H_\Omega \varphi_j = \lambda_j \varphi_j$, $j = 1, \dots, |\Lambda| = L^d$.

Die *Dichte* an der Stelle $x \in \Lambda$ für H_Ω ist definiert durch:

$$\mathcal{D}_-[\Omega, \mu, d](x) := \sum_{\substack{j=1: \\ \lambda_j < 0}}^{|\Lambda|} |\varphi_j(x)|^2 = \langle x | \mathbf{1}_{[H_\Omega < 0]} x \rangle \quad (6.2)$$

Das angestrebte Ziel dieses Kapitels ist es, eine endliche Halbkantenlänge $M_o = M_o(\mu, d) < \infty$ und eine positive untere Schranke $\mathcal{A}(\mu, d)$ an $\mathcal{D}_-[\Omega, \mu, d](x)$ zu finden, vorausgesetzt $x \in \Omega$, so dass die $\text{Box} := \{x - M_o, \dots, x, \dots, x + M_o\}^d$ in Ω bleibt.

Notation: In diesem Kapitel reservieren wir den Buchstaben P für die Projektion auf der obigen Box. D. h. $P \equiv P_{\text{Box}} := \sum_{x \in \text{Box}} \mathbf{1}_x$.

6.2 Ergebnis dieses Kapitels (Theorem 6.1)

Das Hauptresultat dieses Kapitels fassen wir in Form eines Theorems zusammen:

Theorem 6.1. (*Untere Schranke $\approx \mu^{d+\varepsilon}$ an der Dichte an einer Stelle x des Gitters Λ ; Anwendung der Trotter-Formel*)

Für alle $0 < \mu < 1$, $d \in \mathbb{N}$ existiert eine endliche Halbkantenlänge $M_o \equiv M_o(\mu, d) < \infty$, so dass Folgendes gilt:

Für alle beliebigen Teilmengen Ω des Gitters $\Lambda := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ mit $L > 2M_o(\mu, d) + 1$ und für alle Potentiale $V : \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ mit $-\mu \leq V \leq -\mu/2$ gilt

$$\mathcal{D}_-[\Omega, -\mu \leq V \leq -\mu/2, d](x) := \langle x | \mathbf{1}_{[P_\Omega(-\Delta + V)P_\Omega < 0]} x \rangle \geq \mathcal{A}(\mu, d) > 0, \quad (6.3)$$

vorausgesetzt, $x \in \Omega$, so dass die

$$\text{Box}(x) := \{-M_o + x, \dots, x, \dots, M_o + x\}^d \quad \text{in } \Omega \text{ bleibt.} \quad (6.4)$$

Die positive Funktion $\mathcal{A}(\mu, d)$ hängt weder von Ω noch von V ab und verhält sich im Limes $\mu \rightarrow 0$ folgendermaßen:

$$\lim_{\mu \rightarrow 0} \mathcal{A}(\mu, d) \left[\left(\frac{1}{\mu} \right) \ln \left(\frac{1}{\mu} \right) \right]^d = \frac{1}{16} \left(\frac{\text{erf}^2(\pi)}{32\pi d} \right)^d.$$

Explizite Ausdrücke für $\mathcal{A}(\mu, d)$ und $M_o(\mu, d)$ sind gegeben durch:

$$\mathcal{A}(\mu, d) := \frac{C_d^{(\text{Trotter})}}{\left(\frac{1}{\mu} \right)^d \left[\ln \frac{1}{C_d^{(\text{Trotter})} \mu^d} \right]^d} \quad \text{für alle } d \leq 23 \quad (6.5)$$

oder

$$\mathcal{A}(\mu, d) := \frac{C_d^{(\text{Trotter})}}{\left(\frac{1}{\mu} \right)^d \left[\max \left\{ \ln \frac{1}{C_d^{(\text{Trotter})} \mu^d}, X(d) \right\} \right]^d} \quad \text{für alle } d \in \mathbb{N} \quad (6.6)$$

wobei

$$C_d^{(\text{Trotter})} := \frac{1}{16} \left(\frac{\text{erf}^2(\pi)}{32\pi} \right)^d \quad \text{für alle } d \in \mathbb{N} \quad (6.7)$$

Weiterhin ist die Halbkantenlänge M_o der um x zentrierten Box gegeben durch:

$$M_o(\mu, d) := \left\lceil \frac{1}{2} \ell_3(\beta_*(\mu, d), d) - 1 \right\rceil \in \mathbb{N} \quad (6.8)$$

wobei

$$\ell_3(\beta, d) := \max \left\{ \frac{2d}{\ln 2} \beta, \left(\frac{4\pi}{\text{erf}(\pi)} \sqrt{\frac{2\pi}{e}} \right) \beta \right\} \quad (6.9)$$

und

$$\beta_*(\mu, d) := \frac{2}{\mu} \ln \frac{1}{C_d^{(\text{Trotter})} \mu^d} \quad \text{für alle } d \leq 23 \quad (6.10)$$

oder

$$\beta_*(\mu, d) := \frac{2}{\mu} \max \left\{ \ln \frac{1}{C_d^{(\text{Trotter})} \mu^d}, X(d) \right\} \quad \text{für alle } d \in \mathbb{N} \quad (6.11)$$

Die in (6.6) und (6.11) aufgetauchte Funktion $X(d)$ ist folgendermaßen definiert:

$$X(d) = \begin{cases} e \approx 2,71828 & \text{falls } d = 1, 2. \\ \text{implizit definiert durch } X(d) = d \ln X(d) \text{ mit } X(d) \geq e & \text{falls } d = 3, 4, \dots \end{cases} \quad (6.12)$$

Bem.: Im Fall $\mu \rightarrow 0$ sind $\mathcal{A}(\mu, d)$ und $\beta_*(\mu, d)$ für alle $d \in \mathbb{N}$ gegeben durch (6.5) bzw. (6.10).

Bemerkung 6.1. Man kann auch bessere Potenzgesetze in μ – wie z.B. $\approx \mu^{d/2}$ – für die untere Schranke an $\mathcal{D}_-[\Omega, -\mu \leq V \leq -\mu/2, d](x)$ erhalten. Dies gilt allerdings z.B. für $d = 1$ nur im Bereich $\mu \geq 0,4$, für $d = 2$ nur im Bereich $\mu \geq 0,8$ und für $d = 3$ nur im Bereich $\mu \geq 1,4$.

6.3 Beweis des Theorems 6.1 durch das Theorem 6.2 und das Theorem 6.3

Der Beweis des Theorems 6.1 beruht auf folgenden zwei Zwischenergebnissen:

- (Theorem 6.2)(E. Lieb) Seien $\mu > 0$, $d \in \mathbb{N}$ und $\Omega \subset \Lambda := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ fest gegeben. Ist x der Mittelpunkt einer Box, d. h. $\text{Box} = \{-M + x, \dots, x, \dots, x + M\}^d$ für einige $M \in \mathbb{N}$, und $\text{Box} \subset \Omega$, dann gilt Folgendes:

$$\mathcal{D}_-[\Omega, \mu, d](x) \geq e^{-\frac{\beta\mu}{2}} \left[\frac{1}{|\text{Box}|} \text{Tr}_{\text{Box}} \{e^{\beta\Delta_{\text{Box}}}\} - e^{-\frac{\beta\mu}{2}} \right] \quad \text{für alle } \beta > 0,$$

wobei $\Delta_{\text{Box}} := P_{\text{Box}} \Delta P_{\text{Box}}$ definiert ist.

Der Beweis dieses Zwischenergebnisses befindet sich im Unterkapitel 6.4 (siehe Theorem 6.2).

- (Theorem 6.3) Für alle $\beta \geq 1$ und Kantenlänge der Box $\ell \geq \ell_3(\beta, d) := \max \left\{ \frac{2d}{\ln 2} \beta, \left(\frac{4\pi}{\text{erf}(\pi)} \sqrt{\frac{2\pi}{e}} \right) \beta \right\}$ gilt Folgendes:

$$\frac{1}{|\text{Box}|} \text{Tr}_{\text{Box}} \{e^{\beta\Delta_{\text{Box}}}\} \geq \frac{1}{2} \left(\frac{\text{erf}(\pi)}{4\sqrt{\pi}} \right)^d \left(\frac{1}{\beta} \right)^{d/2}$$

Der Beweis dieses Zwischenergebnisses befindet sich im Unterkapitel 6.6 (siehe Theorem 6.3).

Beweis des Theorems 6.1 durch das Theorem 6.2 und das Theorem 6.3 :

Kombiniert man das Theorem 6.2 mit dem Theorem 6.3, erhält man für alle $\mu > 0$ Folgendes:

$$\mathcal{D}_-[\Omega, \mu, d](x) \geq e^{-\frac{\beta\mu}{2}} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\text{erf}(\pi)}{4\sqrt{\pi}} \right)^d \left(\frac{1}{\beta} \right)^{d/2} - e^{-\frac{\beta\mu}{2}} \right], \quad (6.13)$$

falls $\beta \geq 1$, die Kantenlänge der Box $\ell \geq \ell_3(\beta, d) := \max \left\{ \frac{2d}{\ln 2} \beta, \left(\frac{4\pi}{\text{erf}(\pi)} \sqrt{\frac{2\pi}{e}} \right) \beta \right\}$, x die Mittelpunkt der Box und $\text{Box} \subset \Omega$.

Im Folgenden wird ein passendes $\beta_*(\mu, d) \geq 1$ ausgesucht, so dass die rechte Seite von (6.13) mit dieser Wahl von $\beta_*(\mu, d)$ eine echt positive Funktion von μ und d wird.

Setze nun

$$\alpha := \frac{\beta\mu}{2} \quad \text{und} \quad K(\mu, d) := \frac{1}{2} \left(\frac{\text{erf}(\pi)}{4\sqrt{2\pi}} \right)^d \mu^{d/2}, \quad (6.14)$$

dann lässt sich (6.13) folgendermaßen umschreiben:

$$\mathcal{D}_-[\Omega, \mu, d](x) \geq e^{-\alpha} \left[\frac{K(\mu, d)}{\alpha^{d/2}} - e^{-\alpha} \right] \quad (6.15)$$

Wähle nun $\alpha_*(\mu, d) > 0$ die größere Lösung der transzendenten Gleichung:

$$\frac{1}{2} K(\mu, d) = e^{-\alpha} \alpha^{d/2} \quad \text{für alle } 0 < \mu < 1 \text{ und } d \in \mathbb{N} \quad (6.16)$$

oder äquivalenterweise,

$$\ln \left(\frac{2}{K(\mu, d)} \right) = \alpha \left[1 - \frac{d}{2} \frac{\ln \alpha}{\alpha} \right] \quad \text{für alle } 0 < \mu < 1 \text{ und } d \in \mathbb{N} \quad (6.17)$$

Behauptung 6.1. (Über die Lösung $\alpha_*(\mu, d)$)

1. Eine solche Lösung $\alpha_*(\mu, d)$ existiert tatsächlich für alle $0 < \mu < 1$ und für alle $d \in \mathbb{N}$. Weiterhin ist $\alpha_*(\mu, d)$ eindeutig.
2. Nach (6.14) wird das gesuchte $\beta_*(\mu, d)$ gegeben durch $\beta_*(\mu, d) := 2 \frac{\alpha_*(\mu, d)}{\mu}$. Wir behaupten hier, dass dieses $\beta_*(\mu, d)$ die Bedingung $\beta_*(\mu, d) \geq 1$ erfüllt. Somit wird die Voraussetzung zu (6.13) mit dieser Wahl von $\beta_*(\mu, d)$ nicht verletzt.

Nach Definition von $\alpha_*(\mu, d)$ und (6.15) folgt

$$\mathcal{D}_-[\Omega, \mu, d](x) \geq e^{-2\alpha_*(\mu, d)} = \frac{1}{4} K^2(\mu, d) \alpha_*^{-d}(\mu, d) \quad (6.18)$$

Behauptung 6.2. Sei $X = X(d)$ gleich $e = 2.718\dots$ für $d = 1, 2$ und definiert als die einzige reelle Lösung der folgenden transzendenten Gleichung:²³

$$\frac{\ln X}{X} = \frac{1}{d} \quad \text{mit } X \geq e, \quad \text{für } d = 3, 4, 5, \dots \quad (6.19)$$

Über das obig definierte $X(d)$ gilt Folgendes für alle $d \in \mathbb{N}$:

$$1 - \frac{d \ln x}{2x} \geq \frac{1}{2}, \quad \text{falls } x \geq X(d) \quad (6.20)$$

Nun treten zwei Fälle für die Lösung $\alpha_*(\mu, d)$ auf. Entweder ist $\alpha_*(\mu, d) \geq X(d)$ oder ist $\alpha_*(\mu, d) < X(d)$.

1. Fall: $\alpha_*(\mu, d) \geq X(d)$

Da $\alpha_*(\mu, d)$ die transzendenten Gleichung (6.17) erfüllt, gilt

$$\ln \left(\frac{2}{K(\mu, d)} \right) = \alpha_*(\mu, d) \left[1 - \frac{d \ln \alpha_*(\mu, d)}{2 \alpha_*(\mu, d)} \right] \quad \text{für alle } 0 < \mu < 1 \text{ und } d \in \mathbb{N} \quad (6.21)$$

und nach (6.20) mit $\alpha_*(\mu, d) \geq X(d)$, gilt dass

$$\ln \left(\frac{2}{K(\mu, d)} \right) = \alpha_*(\mu, d) \left[1 - \frac{d \ln \alpha_*(\mu, d)}{2 \alpha_*(\mu, d)} \right] \geq \alpha_*(\mu, d) \frac{1}{2} \quad (6.22)$$

D. h.

$$\alpha_*^{-d}(\mu, d) \geq \left[2 \ln \left(\frac{2}{K(\mu, d)} \right) \right]^{-d} \quad (6.23)$$

Nach (6.18) und (6.23) gilt in diesem Fall ($\alpha_*(\mu, d) \geq X(d)$), dass

$$\mathcal{D}_-[\Omega, \mu, d](x) \geq \frac{1}{4} K^2(\mu, d) \left[2 \ln \left(\frac{2}{K(\mu, d)} \right) \right]^{-d} \quad (6.24)$$

2. Fall: $\alpha_*(\mu, d) < X(d)$

Nach (6.18) folgt unmittelbar in diesem Fall, dass

$$\mathcal{D}_-[\Omega, \mu, d](x) \geq \frac{1}{4} K^2(\mu, d) X^{-d}(d) \quad (6.25)$$

gilt.

²³Über die Gleichung (6.19) ist es zu bemerken:

- Diese Gleichung hat keine reelle Lösung für $d = 1$ und $d = 2$. Dies weil $\max\{\frac{\ln X}{X} \mid X \geq 0\} = \frac{1}{e}$.
- Für $d = 3, 4, \dots$ hat diese Gleichung zwei reelle Lösungen: Eine im Bereich $(1, e)$ und die Andere im Bereich $[e, \infty)$. Wir werden hier nur die größere Lösung betrachten.

Also folgt nach (6.24) und (6.25), dass für alle $0 < \mu < 1$ und für alle $d \in \mathbb{N}$

$$\mathcal{D}_-[\Omega, \mu, d](x) \geq \frac{1}{4} K^2(\mu, d) \min \left\{ \left[2 \ln \left(\frac{2}{K(\mu, d)} \right) \right]^{-d}, X^{-d}(d) \right\} \quad (6.26)$$

gilt.

Nach (6.22) für den 1. Fall ($\alpha_*(\mu, d) \geq X(d)$) und nach der Tatsache $\alpha_*(\mu, d) < X(d)$ für den 2. Fall gilt Folgendes:

$$\alpha_*(\mu, d) \leq \max \left\{ 2 \ln \left(\frac{2}{K(\mu, d)} \right), X(d) \right\} \quad \text{für alle } 0 < \mu < 1 \text{ und } d \in \mathbb{N} \quad (6.27)$$

Damit erhält man folgende obere Schranke an $\beta_*(\mu, d) := \frac{2}{\mu} \alpha_*(\mu, d)$:

$$\beta_*(\mu, d) \leq \frac{2}{\mu} \max \left\{ 2 \ln \left(\frac{2}{K(\mu, d)} \right), X(d) \right\} \quad (6.28)$$

Die Ausdrücke (6.26) und (6.28) lassen sich im Fall $d \leq 23$ vereinfachen, da die folgende Behauptung gilt:

Behauptung 6.3. *Für alle $0 < \mu < 1$ und für alle $d \leq 23$ gilt*

$$\max \left\{ 2 \ln \left(\frac{2}{K(\mu, d)} \right), X(d) \right\} = 2 \ln \left(\frac{2}{K(\mu, d)} \right) \quad (6.29)$$

Andererseits ist $d \geq 24$, dann gibt es ein μ_ in der Nähe von 1, so dass*

$$\max \left\{ 2 \ln \left(\frac{2}{K(\mu_*, d)} \right), X(d) \right\} = X(d) \quad (6.30)$$

Nach Definition von $K(\mu, d)$ in (6.14), nach (6.26) und nach (6.29) folgt, dass für alle $d \leq 23$ gilt:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_-[\Omega, \mu, d](x) &\geq \frac{1}{4} K^2(\mu, d) \left[2 \ln \left(\frac{2}{K(\mu, d)} \right) \right]^{-d} \\ &= \frac{1}{4} \frac{1}{4} \left(\frac{\operatorname{erf}^2(\pi)}{32\pi} \right)^d \mu^d \left[\ln \left(\frac{4}{K^2(\mu, d)} \right) \right]^{-d} \\ &= \frac{1}{16} \left(\frac{\operatorname{erf}^2(\pi)}{32\pi} \right)^d \mu^d \left[\ln \left(16 \left(\frac{32\pi}{\operatorname{erf}^2(\pi)} \right)^d \left(\frac{1}{\mu} \right)^d \right) \right]^{-d} \\ &= \frac{C_d^{(\text{Trotter})}}{\left(\frac{1}{\mu} \right)^d \left[\ln \frac{1}{C_d^{(\text{Trotter})} \mu^d} \right]^d} \end{aligned}$$

Hierbei ist

$$C_d^{(\text{Trotter})} := \frac{\left(\frac{1}{2} K(\mu, d) \right)^2}{\mu^d} = \frac{1}{16} \left(\frac{\operatorname{erf}^2(\pi)}{32\pi} \right)^d$$

Und $\beta_*(\mu, d)$ kann nach (6.28) folgendermaßen gesetzt werden:

$$\begin{aligned} \beta_*(\mu, d) &:= \frac{2}{\mu} \max \left\{ 2 \ln \left(\frac{2}{K(\mu, d)} \right), X(d) \right\} = \frac{2}{\mu} \max \left\{ \ln \frac{1}{\left(\frac{1}{2} K(\mu, d) \right)^2}, X(d) \right\} \\ &= \frac{2}{\mu} \max \left\{ \ln \frac{1}{C_d^{(\text{Trotter})} \mu^d}, X(d) \right\} \end{aligned}$$

Abschließend wird das gesuchte Halbkantenlänge M_o der um x zentrierten Box folgendermaßen gesetzt:

$$M_o(\mu, d) := \left\lceil \frac{1}{2} \ell_3(\beta_*(\mu, d), d) - 1 \right\rceil \in \mathbb{N}$$

Und die Kantenlänge ℓ_3 wird durch

$$\ell_3(\beta_*(\mu, d), d) := \max \left\{ \frac{2d}{\ln 2} \beta_*(\mu, d), \left(\frac{4\pi}{\operatorname{erf}(\pi)} \sqrt{\frac{2\pi}{e}} \right) \beta_*(\mu, d) \right\}$$

gesetzt, damit die Voraussetzung des Theorems 6.3 erfüllt wird.

Damit beenden wir (bis auf den Beweis der Behauptungen 6.1 – 6.3) den Beweis des Theorems 6.1 durch das Theorem 6.2 und das Theorem 6.3. □

Beweis der Behauptung 6.1 – 6.3:

Beweis der Behauptung 6.1:

1. Zum Beweis der Existenz einer reellen Lösung für die transzendente Gleichung $\frac{1}{2} K(\mu, d) = e^{-\alpha} \alpha^{d/2}$, $\alpha \geq 0$ in (6.16) sei $f_d : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$ durch $f_d(\alpha) := e^{-\alpha} \alpha^{d/2}$. Da $f_d(0) = 0$ und $\max\{f_d(\alpha) \mid \alpha \geq 0\} = f_d(d/2)$ reicht es nach dem Zwischenwertsatz zu zeigen, dass $\frac{1}{2} K(\mu, d) \leq f_d(d/2)$ für alle $d \in \mathbb{N}$ und für alle $0 < \mu < 1$ gilt. Tatsächlich gilt Folgendes für alle $d \in \mathbb{N}$ und für alle $0 < \mu < 1$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2e} > \frac{1}{32\pi} &\Rightarrow \sqrt{\frac{1}{2e}} > \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \stackrel{d \geq 1}{\Rightarrow} \sqrt{\frac{d}{2e}} > \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \Rightarrow \sqrt{\frac{d}{2e}} > \frac{\operatorname{erf}(\pi)}{4\sqrt{2}\pi} \Rightarrow \\ f_d(d/2) = \left(\sqrt{\frac{d}{2e}}\right)^d &> \left(\frac{\operatorname{erf}(\pi)}{4\sqrt{2}\pi}\right)^d \stackrel{0 < \mu < 1}{\Rightarrow} f_d(d/2) > \left(\frac{\operatorname{erf}(\pi)}{4\sqrt{2}\pi}\right)^d \mu^{d/2} \Rightarrow \\ f_d(d/2) > \frac{1}{4} \left(\frac{\operatorname{erf}(\pi)}{4\sqrt{2}\pi}\right)^d \mu^{d/2} &\text{ D. h. } f_d(d/2) > \frac{1}{2} K(\mu, d). \end{aligned}$$

Damit ist die Existenz gezeigt.

In der Tat existieren zwei reelle Lösung für diese Gleichung: Eine im Bereich $[0, d/2]$ und die Andere (die Größere) im Bereich $(d/2, \infty)$. Dies kann man deutlich durch die Ableitung von f_d sehen. Nämlich $f'_d(\alpha) = e^{-\alpha} \alpha^{d/2} \left(\frac{d}{2\alpha} - 1\right)$. Wir werden hier nur die größere Lösung betrachten. Da $f'_d(\alpha)|_{\alpha > d/2} < 0$ gilt, ist die größere Lösung eindeutig.

2. Da diese Lösung $\alpha_*(\mu, d) > d/2$ für alle $(\mu, d) \in (0, 1) \times \mathbb{N}$ ist, folgt, dass für alle $(\mu, d) \in (0, 1) \times \mathbb{N}$ gilt:

$$\beta_*(\mu, d) := \frac{2}{\mu} \alpha_*(\mu, d) > \frac{d}{\mu} \geq \frac{1}{\mu} > 1$$

Damit wird die Voraussetzung ($\beta_*(\mu, d) \geq 1$) zu (6.13) mit dieser Wahl von $\beta_*(\mu, d)$ nicht verletzt. △

Beweis der Behauptung 6.2: Bemerke, dass folgende Tatsachen gelten:

1. $X(d) \geq e$ für alle $d \in \mathbb{N}$ (nach Definition von $X(d)$).
2. Die Funktion $-\frac{\ln x}{x}$ ist monoton steigende im Bereich $x \geq e$, da

$$\left(-\frac{\ln x}{x}\right)' \Big|_{x \geq e} = -\frac{1 - \ln x}{x^2} \Big|_{x \geq e} \geq 0.$$

Daher folgt, dass für alle $d \in \mathbb{N}$ und $x \geq X(d)$ gilt:

$$\begin{aligned}
1 - \frac{d \ln x}{2x} &\geq 1 - \frac{d \ln X(d)}{2X(d)} \quad \text{da } x \geq X(d) \geq e \\
&= 1 - \frac{d}{2} \cdot \begin{cases} \frac{1}{d} & \text{für } d = 3, 4, 5, \dots \\ \frac{1}{e} & \text{für } d = 1, 2. \end{cases} \quad (\text{nach Definition von } X(d) \text{ siehe (6.19)}) \\
&\geq \frac{1}{2} \quad \text{für alle } d \in \mathbb{N}
\end{aligned}$$

△

Beweis der Behauptung 6.3:

Sei $Y(d) := \ln 16 + d \ln \left(\frac{32\pi}{\operatorname{erf}^2(\pi)} \right)$ definiert. Dann folgt nach Definition von $K(\mu, d) := \frac{1}{2} \left(\frac{\operatorname{erf}(\pi)\sqrt{\mu}}{4\sqrt{2\pi}} \right)^d$, dass

$$2 \ln \left(\frac{2}{K(\mu, d)} \right) \geq Y(d) \quad \text{für alle } 0 < \mu < 1 \quad \text{und } d \in \mathbb{N} \quad (6.31)$$

gilt. Dies, weil

$$\begin{aligned}
2 \ln \left(\frac{2}{K(\mu, d)} \right) &= \ln \left(\frac{4}{K^2(\mu, d)} \right) = \ln 16 + d \ln \left(\frac{32\pi}{\operatorname{erf}^2(\pi) \mu} \right) \\
&\geq \ln 16 + d \ln \left(\frac{32\pi}{\operatorname{erf}^2(\pi)} \right) = Y(d) \quad \text{da } 0 < \mu < 1
\end{aligned} \quad (6.32)$$

Andererseits ist die Funktion $X(d)$, die durch $\frac{\ln X}{X} = \frac{1}{d}$ (siehe (6.19)) implizit gegeben ist, nach unten durch $d \ln(d \ln(d \ln d))$ beschränkt²⁴. D. h.

$$X(d) > d \ln(d \ln(d \ln d)) > d \ln(d \ln d) > d \ln d > d \quad \text{für alle } d = 3, 4, \dots \quad (6.33)$$

und wegen der Tatsache $\ln X < \sqrt{X}$ für $X \geq e$ folgt nach $\frac{\ln X}{X} = 1/d$, dass

$$X(d) < d^2 \quad \text{für alle } d = 3, 4, \dots \quad (6.34)$$

Außerdem kann man mit Hilfe des Satzes der impliziten Funktion auch ihre Ableitung ausrechnen und nach unten abschätzen. Nämlich: Sei $H(d, X) := \frac{\ln X}{X} - \frac{1}{d}$, dann ist $X(d)$ durch $H(d, X(d)) = 0$ mit $X(d) \geq e$ implizit definiert. Daher ist ihre Ableitung $X'(d)$ für alle $d \geq 3$ gegeben durch:

$$\begin{aligned}
X'(d) &= -\frac{\frac{\partial H}{\partial d}}{\frac{\partial H}{\partial X}} = \frac{X(d)}{d^2 \left[\frac{\ln X(d)}{X(d)} - \frac{1}{X(d)} \right]} \stackrel{(6.19)}{=} \frac{X(d)}{d - \frac{d^2}{X(d)}} \\
&> \frac{d \ln(d \ln(d \ln d))}{d-1} \quad (\text{nach (6.33) und (6.34)})
\end{aligned} \quad (6.35)$$

Weiterhin direkt aus der Gleichheit in (6.35) und (6.19) kann man die zweite Ableitung von $X(d)$ ausrechnen und man erhält Folgendes:

$$X''(d) = \underbrace{\frac{X^2(d)}{d(X(d)-d)^3}}_{\text{positiv}} (X(d) - 2d) \stackrel{(6.33)}{>} \frac{X^2(d)}{d(X(d)-d)^3} (d \ln d - 2d) > 0 \quad \text{für alle } d \geq 24 > e^2 \quad (6.36)$$

²⁴Benutze, dass $\ln X(d) > \ln e = 1$ in $X(d) = d \ln X(d) \Rightarrow X(d) > d \Rightarrow X(d) > d \ln d \Rightarrow X(d) > d \ln(d \ln d) \Rightarrow X(d) > d \ln(d \ln(d \ln d))$.

Nun haben wir folgende Tatsachen:

1. $Y(d) > X(d)$ für alle $d = 1, 2, 3, 4, \dots, 23$. (numerisch getestet)
2. $Y(d = 24) < X(d = 24)$ für $d = 24$ (numerisch getestet)
3. $X'(d \geq 24) \geq X'(d = 24)$ (Dies folgt nach (6.36))
4. $X'(d = 24) \stackrel{(6.35)}{>} \frac{24 \ln(24 \ln(24 \ln 24))}{24 - 1} \approx 4,84 > 4,61 \approx \ln\left(\frac{32\pi}{\operatorname{erf}^2(\pi)}\right) = \text{Konstante} = Y'(d \geq 24)$

Nach 1. – 4., (6.31) und (6.32) folgt der Beweis von (6.29) und (6.30).

△

Und damit ist der Beweis des Theorems 6.1 durch das Theorem 6.2 und das Theorem 6.3 beendet.

□

6.4 Anwendung der Trotter-Formel (Beweis des Theorems 6.2)

Eine Methode, um unser Ziel zu erreichen, besteht darin, die Diagonalelemente der Halbgruppe $\langle x | e^{-\beta P_\Omega H P_\Omega} x \rangle$, $\beta > 0$ durch die Trotter-Formel abzuschätzen.

Sei $\{\varphi_j\}_{j=1}^{|\Lambda|}$ eine ON-Basis von Eigenfunktionen zu Eigenwerten λ_j von $H_\Omega \equiv P_\Omega H P_\Omega$.

1. Schritt: (Benutze $-\mu \mathbf{1} \leq V$)

$$\begin{aligned}
 \langle x | e^{-\beta P_\Omega H P_\Omega} x \rangle &= \sum_{j=1}^{|\Lambda|} \langle x | e^{-\beta P_\Omega H P_\Omega} \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | x \rangle = \sum_{j=1}^{|\Lambda|} e^{-\beta \lambda_j} \langle x | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | x \rangle = \sum_{j=1}^{|\Lambda|} e^{-\beta \lambda_j} |\varphi_j(x)|^2 \\
 &= \sum_{\substack{j=1: \\ \lambda_j < 0}}^{|\Lambda|} e^{-\beta \lambda_j} |\varphi_j(x)|^2 + \sum_{\substack{j=1: \\ \lambda_j \geq 0}}^{|\Lambda|} e^{-\beta \lambda_j} |\varphi_j(x)|^2 \\
 &\leq \sum_{\substack{j=1: \\ \lambda_j < 0}}^{|\Lambda|} e^{-\beta \lambda_j} |\varphi_j(x)|^2 + \sum_{\substack{j=1: \\ \lambda_j \geq 0}}^{|\Lambda|} |\varphi_j(x)|^2 \\
 &\leq \sum_{\substack{j=1: \\ \lambda_j < 0}}^{|\Lambda|} e^{-\beta \lambda_j} |\varphi_j(x)|^2 + \sum_{j=1}^{|\Lambda|} |\varphi_j(x)|^2 = \sum_{\substack{j=1: \\ \lambda_j < 0}}^{|\Lambda|} e^{-\beta \lambda_j} |\varphi_j(x)|^2 + 1 \\
 &\leq \sum_{\substack{j=1: \\ \lambda_j < 0}}^{|\Lambda|} e^{\beta \mu} |\varphi_j(x)|^2 + 1 && \begin{aligned} &(\text{da } V \geq -\mu \mathbf{1} \Rightarrow H \geq -\mu \mathbf{1} \Rightarrow P_\Omega H P_\Omega \geq -\mu \mathbf{1} \\ &\Rightarrow \lambda_j \geq -\mu \Rightarrow e^{-\beta \lambda_j} \leq e^{\beta \mu}) \end{aligned} \\
 &= e^{\beta \mu} \mathcal{D}_-[\Omega, \mu, d](x) + 1
 \end{aligned}$$

Also gilt

$$e^{\beta \mu} \mathcal{D}_-[\Omega, \mu, d](x) + 1 \geq \langle x | e^{-\beta P_\Omega H P_\Omega} x \rangle \quad (6.37)$$

oder

$$\mathcal{D}_-[\Omega, \mu, d](x) \geq e^{-\beta \mu} \langle x | e^{-\beta P_\Omega H P_\Omega} x \rangle - e^{-\beta \mu} \quad (6.38)$$

2. Schritt: (Benutze $V \leq -\frac{t}{2}\mathbf{1}$)

Andererseits lässt sich $\langle x | e^{-\beta P_\Omega H P_\Omega} x \rangle$ durch die Trotter-Formel folgendermaßen ausdrücken:

$$\langle x | e^{-\beta P_\Omega H P_\Omega} x \rangle = \langle x | e^{-\beta(-P_\Omega \Delta P_\Omega + P_\Omega V P_\Omega)} x \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle x | \left(e^{-\frac{\beta}{n}(-P_\Omega \Delta P_\Omega)} e^{-\frac{\beta}{n} P_\Omega V P_\Omega} \right)^n x \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} K_{V,\Omega}^{(n)}(x, x; \beta) \quad (6.39)$$

wobei

$$K_{V,\Omega}^{(n)}(x, x; \beta) = \sum_{\substack{x_1, \dots, x_{n-1} \\ \in \Omega}} K_{0,\Omega}(x, x_1; \beta/n) K_{0,\Omega}(x_1, x_2; \beta/n) \dots K_{0,\Omega}(x_{n-2}, x_{n-1}; \beta/n) K_{0,\Omega}(x_{n-1}, x; \beta/n) \\ \times e^{-\beta/n[V(x) + \sum_{i=1}^{n-1} V(x_i)]} \quad (6.40)$$

mit

$$K_{0,\Omega}(x, y; \beta) := \langle x | e^{\beta P_\Omega \Delta P_\Omega} y \rangle \quad (6.41)$$

Es ist wichtig zu bemerken, dass $K_{0,\Omega}(x, y; \beta) := \langle x | e^{\beta P_\Omega \Delta P_\Omega} y \rangle \geq 0$ für alle $x, y \in \Omega$. Dieses da $\Delta = t - 2d\mathbf{1}$ gilt, und daher

$$\begin{aligned} \langle x | e^{\beta P_\Omega \Delta P_\Omega} y \rangle &= \langle x | e^{-\beta 2d P_\Omega} e^{\beta P_\Omega t P_\Omega} y \rangle \quad \text{da } [P_\Omega t P_\Omega, P_\Omega 2d\mathbf{1} P_\Omega] = 0 \\ &= \sum_{z \in \Omega} \langle x | e^{-2d\beta P_\Omega} z \rangle \langle z | e^{\beta P_\Omega t P_\Omega} y \rangle \\ &= e^{-2d\beta} \langle x | e^{\beta P_\Omega t P_\Omega} y \rangle \quad \text{da } \langle x | e^{-2d\beta P_\Omega} z \rangle = \delta_{x=z \in \Omega} \\ &= e^{-2d\beta} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\beta^k}{k!} \langle x | (P_\Omega t P_\Omega)^k y \rangle \end{aligned}$$

und

$$\langle x | (P_\Omega t P_\Omega)^k y \rangle \geq 0 \quad \text{für alle } k \in \mathbb{N}, \text{ denn die Einträge der Matrix } t \text{ sind 1 oder 0.}$$

Somit sind die Summanden in (6.40) nicht negativ.

Da $\text{Box} := B_{r \leq M}^{(\infty)}(x) \subset \Omega$ (Voraussetzung des Theorems 6.2) und die Summanden in (6.40) nicht negativ sind, geht $\langle x | e^{-\beta P_\Omega H P_\Omega} x \rangle$ nach unten, wenn man $\sum_{x_1, \dots, x_{n-1} \in \Omega}$ durch $\sum_{x_1, \dots, x_{n-1} \in \text{Box}}$ in (6.40) ersetzt. Nämlich:

$$\langle x | e^{-\beta H_\Omega} x \rangle \geq \lim_{n \rightarrow \infty} K_{V,\text{Box}}^{(n)}(x, x; \beta) \quad (6.42)$$

Weiterhin benutzen wir die Voraussetzung, dass V nach oben durch $-\mu/2$ beschränkt ist, und die Tatsache, dass die Funktion $\exp(-\beta \cdot)$ monoton fallend ist. Nämlich:

$$\begin{aligned}
K_{V, \text{Box}}^{(n)}(x, x; \beta) &\geq \sum_{\substack{x_1, \dots, x_{n-1} \\ \in \text{Box}}} K_{0, \Omega}(x, x_1; \beta/n) K_{0, \Omega}(x_1, x_2; \beta/n) \dots K_{0, \Omega}(x_{n-2}, x_{n-1}; \beta/n) K_{0, \Omega}(x_{n-1}, x; \beta/n) \\
&\quad \times e^{-\frac{\beta}{n}[-\mu/2 + \sum_{i=1}^{n-1} -\mu/2]} \\
&= e^{\frac{\beta\mu}{2}} \sum_{\substack{x_1, \dots, x_{n-1} \\ \in \text{Box}}} K_{0, \Omega}(x, x_1; \beta/n) K_{0, \Omega}(x_1, x_2; \beta/n) \dots K_{0, \Omega}(x_{n-2}, x_{n-1}; \beta/n) K_{0, \Omega}(x_{n-1}, x; \beta/n) \\
&= e^{\frac{\beta\mu}{2}} \sum_{\substack{x_1, \dots, x_{n-1} \\ \in \text{Box}}} \langle x | e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} x_1 \rangle \langle x_1 | e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} x_2 \rangle \dots \langle x_{n-2} | e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} x_{n-1} \rangle \langle x_{n-1} | e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} x \rangle \\
&= e^{\frac{\beta\mu}{2}} \langle x | e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} \left(\sum_{\substack{x_1 \\ \in \text{Box}}} |x_1\rangle \langle x_1| \right) e^{\beta/n \Delta} \dots e^{\beta/n \Delta} \left(\sum_{\substack{x_{n-1} \\ \in \text{Box}}} |x_{n-1}\rangle \langle x_{n-1}| \right) e^{\beta/n \Delta} x \rangle \\
&= e^{\frac{\beta\mu}{2}} \langle x | e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} P_{\text{Box}} e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} \dots e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} P_{\text{Box}} e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} x \rangle \quad \text{(wobei } P_{\text{Box}} := \sum_{y \in \text{Box}} |y\rangle \langle y| \text{ die Projektion auf Box ist)} \\
&= e^{\frac{\beta\mu}{2}} \langle x | \underbrace{(e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} P_{\text{Box}}) (e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} P_{\text{Box}}) \dots (e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} P_{\text{Box}})}_{n-1 \text{ Male}} e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} x \rangle \\
&= e^{\frac{\beta\mu}{2}} \langle x | (e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} P_{\text{Box}}) \underbrace{(P_{\text{Box}} e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} P_{\text{Box}}) \dots (P_{\text{Box}} e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} P_{\text{Box}})}_{n-2 \text{ Male}} (P_{\text{Box}} e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}}) x \rangle \quad \text{da } P_{\text{Box}}^2 = P_{\text{Box}} \\
&\stackrel{x \in \text{Box}}{=} e^{\frac{\beta\mu}{2}} \langle x | (P_{\text{Box}} e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} P_{\text{Box}}) \underbrace{(P_{\text{Box}} e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} P_{\text{Box}}) \dots (P_{\text{Box}} e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} P_{\text{Box}})}_{n-2 \text{ Male}} (P_{\text{Box}} e^{\beta/n P_{\Omega} \Delta P_{\Omega}} P_{\text{Box}}) x \rangle \\
&= e^{\frac{\beta\mu}{2}} \langle x | \underbrace{(P e^{\beta/n \Delta_{\Omega}} P) (P e^{\beta/n \Delta_{\Omega}} P) \dots (P e^{\beta/n \Delta_{\Omega}} P) (P e^{\beta/n \Delta_{\Omega}} P)}_{n \text{ Male}} x \rangle \tag{6.43}
\end{aligned}$$

Also folgt nach (6.39), (6.41), (6.42) und (6.43), dass

$$\langle x | e^{-\beta H_{\Omega}} x \rangle \geq e^{\frac{\beta\mu}{2}} \lim_{n \rightarrow \infty} \langle x | (P e^{\frac{\beta}{n} \Delta_{\Omega}} P)^n x \rangle, \tag{6.44}$$

Hierbei sind $P := \sum_{y \in \text{Box}} |y\rangle \langle y|$ die Projektion auf Box $\{x - M, \dots, x, \dots, x + M\}^d$ und $\Delta_{\Omega} := P_{\Omega} \Delta P_{\Omega} \in B(\ell^2(\Lambda))$.

Nach (6.38) und (6.44) folgt

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_-[\Omega, \mu, d](x) &\geq e^{-\beta\mu} \langle x | e^{-\beta P_{\Omega} H P_{\Omega}} x \rangle - e^{-\beta\mu} \\
&\geq e^{-\beta\mu} e^{\frac{\beta\mu}{2}} \lim_{n \rightarrow \infty} \langle x | (P e^{\frac{\beta}{n} \Delta_{\Omega}} P)^n x \rangle - e^{-\beta\mu} \\
&= e^{-\frac{\beta\mu}{2}} \lim_{n \rightarrow \infty} \langle x | (P e^{\frac{\beta}{n} \Delta_{\Omega}} P)^n x \rangle - e^{-\beta\mu} \\
&= e^{-\frac{\beta\mu}{2}} \left[\lim_{n \rightarrow \infty} \langle x | (P e^{\frac{\beta}{n} \Delta_{\Omega}} P)^n x \rangle - e^{-\frac{\beta\mu}{2}} \right]
\end{aligned}$$

D. h.

$$\mathcal{D}_-[\Omega, \mu, d](x) \geq e^{-\frac{\beta\mu}{2}} \left[\lim_{n \rightarrow \infty} \langle x | (P e^{\frac{\beta}{n} \Delta_{\Omega}} P)^n x \rangle - e^{-\frac{\beta\mu}{2}} \right] \tag{6.45}$$

Andererseits lässt sich der Limes $\lim_{n \rightarrow \infty} \langle x | (P e^{\frac{\beta}{n} \Delta_\Omega} P)^n x \rangle$ in einer leichteren Form ausdrücken. Nämlich:

Lemma 6.1. (Ausdruck für den Limes $\lim_{n \rightarrow \infty} \langle x | (P e^{\frac{\beta}{n} \Delta_\Omega} P)^n x \rangle$)

Für alle $y \in \text{Box} := \{x-M, \dots, x, \dots, x+M\}^d$ konvergiert die numerische Folge $\langle y | (P e^{\frac{\beta}{n} \Delta_\Omega} P)^n y \rangle$ gegen $\langle y | e^{\beta P \Delta_\Omega P} y \rangle = \langle y | e^{\beta \Delta_{\text{Box}}} y \rangle$.

Bemerke, da $PP_\Omega = P_\Omega P = P$ gilt, da $\text{Box} \subset \Omega$ und $P \equiv P_{\text{Box}}$

Daher gilt insbesondere für die Mittelpunkt x der Box, dass

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle x | (P e^{\frac{\beta}{n} \Delta_\Omega} P)^n x \rangle = \langle x | e^{\beta \Delta_{\text{Box}}} x \rangle \quad (6.46)$$

Lemma 6.2. (Größter Wert wird am Mittelpunkt der Box angenommen)

Für alle $y \in \text{Box} := \{x-M, \dots, x, \dots, x+M\}^d$ gilt

$$\langle x | e^{\beta \Delta_{\text{Box}}} x \rangle \geq \langle y | e^{\beta \Delta_{\text{Box}}} y \rangle \quad (6.47)$$

und daher

$$\langle x | e^{\beta \Delta_{\text{Box}}} x \rangle \geq \frac{1}{|\text{Box}|} \sum_{y \in \text{Box}} \langle y | e^{\beta \Delta_{\text{Box}}} y \rangle = \frac{1}{|\text{Box}|} \text{Tr}_{\text{Box}} \{e^{\beta \Delta_{\text{Box}}}\} \quad (6.48)$$

Der Vorteil von $\frac{1}{|\text{Box}|} \text{Tr}\{e^{\beta \Delta_{\text{Box}}}\}$ im Gegensatz zu $\langle x | e^{\beta \Delta_{\text{Box}}} x \rangle$ ist es, dass wir wichtige Ungleichungen benutzen können, in denen die Spur auftaucht, wie z.B. die Jensen-Ungleichung.

Kombiniert man (6.45) mit (6.46) und (6.48), erhält man das folgende Theorem:

Theorem 6.2. Seien $\mu > 0$, $d \in \mathbb{N}$ und $\Omega \subset \Lambda := (\mathbb{Z}/L/\mathbb{Z})^d$ fest gegeben.

Ist x der Mittelpunkt einer Box und $\text{Box} \subset \Omega$, dann gilt

$$\mathcal{D}_-[\Omega, \mu, d](x) \geq e^{-\frac{\beta\mu}{2}} \left[\frac{1}{|\text{Box}|} \text{Tr}_{\text{Box}} \{e^{\beta \Delta_{\text{Box}}}\} - e^{-\frac{\beta\mu}{2}} \right] \quad \text{für alle } \beta > 0$$

Wichtige Bemerkung: Ferner werden wir $\frac{1}{|\text{Box}|} \text{Tr}_{\text{Box}} \{e^{\beta \Delta_{\text{Box}}}\}$ nach unten abschätzen. Dazu vergleichen wir zuerst die Laplace-Operatoren auf der Box mit freien Randbedingungen $-\Delta_{\text{Box}}$ und mit zyklischen Randbedingungen $-\Delta_{\text{BoxZ}}$ miteinander. Der Grund dafür ist: Es gibt eine allgemeine Formel zur Diagonalisierung von $-\Delta_{\text{BoxZ}}$, aber zur Diagonalisierung von $-\Delta_{\text{Box}}$ gibt es leider keine allgemeine Formel.

Zur Behandlung des Ausdrucks $\frac{1}{|\text{Box}|} \text{Tr}_{\text{Box}} \{e^{\beta \Delta_{\text{Box}}}\}$ können wir Box durch $\text{Box} - x$ ersetzen, da

$$\langle y | e^{\beta \Delta_{\text{Box}}} y \rangle = \langle y - x | e^{\beta \Delta_{\text{Box}-x}} y - x \rangle$$

und daher

$$\frac{1}{|\text{Box}|} \text{Tr}_{\text{Box}} \{e^{\beta \Delta_{\text{Box}}}\} = \frac{1}{|\text{Box}-x|} \text{Tr}_{\text{Box}-x} \{e^{\beta \Delta_{\text{Box}-x}}\}$$

Aus diesem Grund werden wir im Folgenden eine Box, die um 0 zentriert ist, betrachten, und wir werden $\Delta_{\text{Box}} = P \Delta P = P_{\text{Box}} \Delta P_{\text{Box}}$ nicht mehr als einen Operator von $B(\ell^2(\Lambda))$, sondern nur als einen Operator von $B(\ell^2(\text{Box}))$ betrachten.

6.4.1 Beweis der Lemmata für das Theorem 6.2

Schließen wir das Unterkapitel 6.4 mit dem Beweis der Lemmata 6.1 und 6.2 für das Theorem 6.2.

Beweis des Lemmas 6.1:

Sei \tilde{R} , Rest der Taylorreihenentwicklung der Exponentialfunktion, folgendermaßen definiert:

$$e^{\frac{\beta}{n}\Delta_\Omega} = \mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta_\Omega + \frac{\beta^2}{n^2}\tilde{R} \quad (6.49)$$

Für $R := P\tilde{R}P$ gilt Folgendes:

$$\left(P e^{\frac{\beta}{n}\Delta_\Omega} P\right)^n = \left[P + \frac{\beta}{n}P\Delta_\Omega P + \frac{\beta^2}{n^2}P\tilde{R}P\right]^n \stackrel{(\bullet)}{=} \left[P + \frac{\beta}{n}P\Delta P + \frac{\beta^2}{n^2}P\tilde{R}P\right]^n = \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P + \frac{\beta^2}{n^2}R\right]^n \quad (6.50)$$

In (\bullet) haben wir die Tatsache benutzt, dass $PP_\Omega = P_\Omega P = P$ gilt, da $\text{Box} \subset \Omega$ und $P \equiv P_{\text{Box}}$. Daher $P\Delta_\Omega P = PP_\Omega\Delta P_\Omega P = P\Delta P$.

Weiterhin gilt nach (6.50) folgende Teleskopsumme:

$$\begin{aligned} \left(P e^{\frac{\beta}{n}\Delta_\Omega} P\right)^n &= \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P + \frac{\beta^2}{n^2}R\right]^n \\ &= \left\{ \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P + \frac{\beta^2}{n^2}R\right]^n - \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P + \frac{\beta^2}{n^2}R\right]^{n-1} \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P\right] \right\} \\ &\quad + \left\{ \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P + \frac{\beta^2}{n^2}R\right]^{n-1} \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P\right] - \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P + \frac{\beta^2}{n^2}R\right]^{n-2} \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P\right]^2 \right\} \\ &\quad + \left\{ \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P + \frac{\beta^2}{n^2}R\right]^{n-2} \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P\right]^2 - \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P + \frac{\beta^2}{n^2}R\right]^{n-3} \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P\right]^3 \right\} \\ &\quad + \dots \\ &\quad + \left\{ \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P + \frac{\beta^2}{n^2}R\right] \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P\right]^{n-1} - \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P\right]^n \right\} \\ &\quad + \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P\right]^n \\ &= \sum_{j=1}^n M_j^{(n)} + \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P\right]^n \end{aligned}$$

D. h.

$$\left(P e^{\frac{\beta}{n}\Delta_\Omega} P\right)^n = \sum_{j=1}^n M_j^{(n)} + \left[P + \frac{\beta}{n}P\Delta P\right]^n \quad (6.51)$$

wobei

$$\begin{aligned} M_j^{(n)} &:= \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P + \frac{\beta^2}{n^2}R\right]^{n-(j-1)} \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P\right]^{j-1} - \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P + \frac{\beta^2}{n^2}R\right]^{n-j} \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P\right]^j \\ &= \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P + \frac{\beta^2}{n^2}R\right]^{n-j} \left(\left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P + \frac{\beta^2}{n^2}R\right] \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P\right]^{j-1} - \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P\right]^j \right) \\ &= \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P + \frac{\beta^2}{n^2}R\right]^{n-j} \left(\left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P + \frac{\beta^2}{n^2}R\right] - \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P\right] \right) \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P\right]^{j-1} \\ &= \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P + \frac{\beta^2}{n^2}R\right]^{n-j} \frac{\beta^2}{n^2}R \left[P\left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n}\Delta\right)P\right]^{j-1} \end{aligned} \quad (6.52)$$

Weiterhin lässt sich die Norm (Operatornorm) des Operators $\sum_{j=1}^n M_j^{(n)}$ folgendermaßen nach oben abschätzen.

Behauptung 6.4. (Obere Schranke an der Norm von $\sum_{j=1}^n M_j^{(n)}$)

$$\left\| \sum_{j=1}^n M_j^{(n)} \right\| \leq e^{4d\beta} \frac{\beta^2}{n} \|R\| \quad \text{und} \quad \|R\| \leq \frac{e^{4d\beta}}{\beta^2} \quad (6.53)$$

Nach der Tatsache, dass $\|R\| \leq \text{Konstante}$ für alle $n \in \mathbb{N}$ gilt, und nach (6.51) und (6.53) folgt:

$$\left\| \left(P e^{\frac{\beta}{n} \Delta_\Omega} P \right)^n - \left[P + \frac{\beta}{n} P \Delta P \right]^n \right\| \rightarrow 0 \quad \text{wenn} \quad n \rightarrow \infty \quad (6.54)$$

Da $P \equiv P_{\text{Box}}$ ist, gilt $|Py\rangle = \mathbf{1}|y\rangle$ für alle $y \in \text{Box}$ und daher folgt

$$\begin{aligned} \langle y | \left[P + \frac{\beta}{n} P \Delta P \right]^n y \rangle &= \langle y | \left[P + \frac{\beta}{n} P \Delta P \right] \cdots \left[P + \frac{\beta}{n} P \Delta P \right] y \rangle \\ &= \langle y | \left[\mathbf{1} + \frac{\beta}{n} P \Delta P \right] \cdots \left[\mathbf{1} + \frac{\beta}{n} P \Delta P \right] y \rangle \quad \text{da } y \in \text{Box} \\ &= \langle y | \left[\mathbf{1} + \frac{\beta}{n} P \Delta P \right]^n y \rangle \end{aligned}$$

D. h.

$$\langle y | \left[P + \frac{\beta}{n} P \Delta P \right]^n y \rangle = \langle y | \left[\mathbf{1} + \frac{\beta}{n} P \Delta P \right]^n y \rangle \quad \text{falls } y \in \text{Box} \quad (6.55)$$

Andererseits nach dem Spektralsatz (Stetiger Funktionalkalkül) gilt

$$\left[\mathbf{1} + \frac{\beta P \Delta P}{n} \right]^n \xrightarrow{\text{in Norm}} e^{\beta P \Delta P} \quad (6.56)$$

da die Funktionsfolge $f_n(x) = (1 + x/n)^n$ gleichmäßig auf dem Kompaktum $\sigma(\beta P \Delta P) \subset [-4d\beta, 0]$ gegen die Funktion e^x konvergiert.

Nach (6.54), (6.55) und (6.56) folgt unmittelbar im Fall $y \in \text{Box}$, dass

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \langle y | \left(P e^{\frac{\beta}{n} \Delta_\Omega} P \right)^n y \rangle &= \lim_{n \rightarrow \infty} \langle y | \left[P + \frac{\beta P \Delta P}{n} \right]^n y \rangle \quad (\text{nach (6.54)}) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \langle y | \left[\mathbf{1} + \frac{\beta P \Delta P}{n} \right]^n y \rangle \quad (\text{nach (6.55) und da } y \in \text{Box}) \\ &= \langle y | e^{\beta P \Delta P} y \rangle = \langle y | e^{\beta \Delta_{\text{Box}}} y \rangle \quad (\text{nach (6.56)}), \end{aligned}$$

was das Lemma 6.1 bis auf die Behauptung 6.4 beweist.

Beweis der Behauptung 6.4 zum Lemma 6.1: Nach (6.52) gilt:

$$\begin{aligned}
\left\| \sum_{j=1}^n M_j^{(n)} \right\| &\leq \sum_{j=1}^n \|M_j^{(n)}\| \\
&= \sum_{j=1}^n \left\| \left[P \left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n} \Delta \right) P + \frac{\beta^2}{n^2} R \right]^{n-j} \right\| \left\| \frac{\beta^2}{n^2} R \right\| \left\| \left[P \left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n} \Delta \right) P \right]^{j-1} \right\| \\
&\leq \sum_{j=1}^n \left\| \left[P \left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n} \Delta \right) P + \frac{\beta^2}{n^2} R \right] \right\|^{n-j} \frac{\beta^2}{n^2} \|R\| \left\| P \left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n} \Delta \right) P \right\|^{j-1} \\
&= \sum_{j=1}^n \left\| P e^{\frac{\beta}{n} \Delta_\Omega} P \right\|^{n-j} \frac{\beta^2}{n^2} \|R\| \left\| P \left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n} \Delta \right) P \right\|^{j-1} \quad (\text{nach 6.50}) \\
&\leq \sum_{j=1}^n \left\| e^{\frac{\beta}{n} \Delta_\Omega} \right\|^{n-j} \frac{\beta^2}{n^2} \|R\| \left\| \mathbf{1} + \frac{\beta}{n} \Delta \right\|^{j-1} \\
&\leq \sum_{j=1}^n \left(e^{\frac{\beta}{n} \|\Delta_\Omega\|} \right)^{n-j} \frac{\beta^2}{n^2} \|R\| \left(1 + \frac{\beta}{n} \|\Delta\| \right)^{j-1} \\
&\leq \sum_{j=1}^n \left(e^{\frac{\beta}{n} \|\Delta\|} \right)^{n-j} \frac{\beta^2}{n^2} \|R\| \left(e^{\frac{\beta}{n} \|\Delta\|} \right)^{j-1} \quad (\text{da } \|\Delta_\Omega\| \leq \|\Delta\|) \\
&= \sum_{j=1}^n \left(e^{\beta \|\Delta\|} \right)^{\frac{n-1}{n}} \frac{\beta^2}{n^2} \|R\| = \sum_{j=1}^n e^{\beta \frac{n-1}{n} \|\Delta\|} \frac{\beta^2}{n^2} \|R\| \\
&\leq \sum_{j=1}^n e^{\beta \|\Delta\|} \frac{\beta^2}{n^2} \|R\| \quad (\text{da } \beta \frac{n-1}{n} \|\Delta\| \leq \beta \|\Delta\| \Rightarrow e^{\beta \frac{n-1}{n} \|\Delta\|} \leq e^{\beta \|\Delta\|}) \\
&= e^{\beta \|\Delta\|} \frac{\beta^2}{n} \|R\| = e^{\beta 4d} \frac{\beta^2}{n} \|R\| \quad (\text{da } \|\Delta\| = 4d)
\end{aligned}$$

Zum Beweis von $\|R\| \leq \frac{e^{4d\beta}}{\beta^2}$ haben wir Folgendes:

Nach Definition von \tilde{R} in (6.49) folgt unmittelbar, dass

$$\tilde{R} = \left(\frac{n}{\beta} \right)^2 \left[e^{\frac{\beta}{n} \Delta_\Omega} - \left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n} \Delta_\Omega \right) \right] \quad (6.57)$$

und daher

$$\begin{aligned}
\|\tilde{R}\| &= \left(\frac{n}{\beta} \right)^2 \left\| e^{\frac{\beta}{n} \Delta_\Omega} - \left(\mathbf{1} + \frac{\beta}{n} \Delta_\Omega \right) \right\| = \left(\frac{n}{\beta} \right)^2 \left\| \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{\beta}{n} \right)^k (\Delta_\Omega)^k \right\| = \left\| \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{\beta}{n} \right)^{k-2} (\Delta_\Omega)^k \right\| \\
&\leq \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{\beta}{n} \right)^{k-2} \|\Delta_\Omega\|^k \leq \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{\beta}{n} \right)^{k-2} (4d)^k \quad \text{da } \|\Delta_\Omega\| = \|P_\Omega \Delta P_\Omega\| \leq \|P_\Omega\| \|\Delta\| \|P_\Omega\| \leq \|\Delta\| = 4d \\
&\leq \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{k!} (\beta)^{k-2} (4d)^k \quad (\text{da } n \geq 1) \\
&= \frac{1}{\beta^2} \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{k!} (\beta)^k (4d)^k \leq \frac{1}{\beta^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (\beta)^k (4d)^k = \frac{1}{\beta^2} e^{4d\beta}
\end{aligned}$$

Und nach Definition von $R := P\tilde{R}P$ folgt

$$\|R\| = \|P\tilde{R}P\| \leq \|P\| \|\tilde{R}\| \|P\| \leq \|\tilde{R}\| \leq \frac{e^{4d\beta}}{\beta^2},$$

und damit beenden wir den Beweis der Behauptung 6.4.

△

Und damit ist das Lemma 6.1 bewiesen.

□

6.5 Vergleich zwischen den Laplace-Operatoren auf einer Box mit freien Randbedingungen $-\Delta_{\text{Box}}$ und mit zyklischen Randbedingungen $-\Delta_{\text{BoxZ}}$

Definition 6.1. ($\text{Box} = \text{Box}_M(0)$ mit Kantenlänge $\ell := 2M + 1$ um 0 zentriert; Teilmenge von $\Lambda_{L,d} := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$)

Für $2M + 1 \leq L$ sei definiert

$$\text{Box} := \{-M, \dots, 0, \dots, M\}^d \subset \Lambda_{L,d}$$

Da $\Lambda_{L,d}$ mit der Operation Summe + komponentenweise ein Vektorraum ist, ermöglicht es uns die folgenden Operatoren $-\Delta_{\text{Box}}, \Delta_{\text{BoxZ}}$ aus $B(\ell^2(\text{Box}))$ zu definieren:

Definition 6.2. (Die Operatoren $-\Delta_{\text{Box}}$ und $-\Delta_{\text{BoxZ}}$)

$$-\Delta_{\text{Box}} := 2d \mathbf{1}_{\text{Box}} - \sum_{\substack{y, z \in \text{Box}: \\ \exists e \in R_1(0) \text{ so,} \\ \text{dass } z = y + e}} |\delta_y\rangle\langle\delta_z| \quad (6.58)$$

und

$$-\Delta_{\text{BoxZ}} := 2d \mathbf{1}_{\text{Box}} - \sum_{\substack{y, z \in \text{Box}: \\ \exists e \in R_1(0) \text{ so,} \\ \text{dass } [z] = [y + e]}} |\delta_y\rangle\langle\delta_z| \quad (6.59)$$

Hierbei ist:

$$R_1(0) := \{e \in \text{Box} \mid \|e\|_1 := |e_1| + \dots + |e_d| = 1\} \quad (\text{die Ecken einer Raute in } d = 2)$$

Und unter $[\cdot]$ (die in (6.59) auftaucht) versteht man die Äquivalenzklasse mod $2M + 1$. Nämlich: Seien $y, z \in \Lambda_{L,d}$, dann

$$[y] = [z] :\iff \exists m_\nu \in \mathbb{Z}, \nu = 1, \dots, d \text{ so, dass } y_\nu - z_\nu = m_\nu (2M + 1), \nu = 1, \dots, d. \quad (6.60)$$

Weiterhin bezeichnen wir mit \mathcal{R} die Differenz zwischen $-\Delta_{\text{Box}}$ und $-\Delta_{\text{BoxZ}}$:

$$\mathcal{R} := -\Delta_{\text{Box}} - (-\Delta_{\text{BoxZ}}) \quad (6.61)$$

Definition 6.3. (Die Funktion „Return to the Box“ $r : \Lambda \rightarrow \text{Box}$)

Für gegebenes $y \in \Lambda$, ist $r(y) \in \text{Box}$ als das einzige Element der Box definiert, so dass $[r(y)] = [y]$ gilt.

Definition 6.4. (Zyklische Translation)

Für jedes $y \in \text{Box}$ sei seine zyklische Translation $U_y \in B(\ell^2(\text{Box}))$ folgendermaßen definiert:

$$U_y := \sum_{z \in \text{Box}} |\delta_z\rangle\langle\delta_{r(z+y)}| \quad (6.62)$$

Nun kommt eine wichtige Propositon, die besagt, dass \mathcal{R} und der zyklische Laplace-Operator durch unitäre Konjugation miteinander verknüpfen sind. Nämlich:

Proposition 6.1. (*Unitäre Konjugation von \mathcal{R}*)

Folgende Formel gilt:

$$\sum_{y \in \text{Box}} U_y \mathcal{R} U_y^\dagger = |\text{Box}^{(d-1)}| (\Delta_{\text{BoxZ}} + 2d \mathbf{1}_{\text{Box}}) = |\text{Box}^{(d-1)}| t_{\text{BoxZ}}$$

wobei $|\text{Box}^{(d-1)}| = (2M + 1)^{d-1}$ das Volumen der $d - 1$ dimensionalen Box ist, und t_{BoxZ} durch $\Delta_{\text{BoxZ}} + 2d \mathbf{1}_{\text{Box}}$ definiert ist.

Da die unitäre Konjugation *trace-preserving* ist, wird die Proposition 6.1 bei Abschätzung von $\frac{1}{|\text{Box}|} \text{Tr}_{\text{Box}} \{e^{\beta \Delta_{\text{Box}}}\}$ eine wichtige Rolle spielen.

Beweis der Proposition 6.1:

Zur Vereinfachung der Notation führen wir t_{Box} und t_{BoxZ} ein:

$$t_{\text{Box}} := \sum_{z \in \text{Box}} \sum_{\substack{e \in R_1(0) \\ z+e \in \text{Box}}} |\delta_y\rangle \langle \delta_{z+e}| \quad t_{\text{BoxZ}} := \sum_{z \in \text{Box}} \sum_{e \in R_1(0)} |\delta_y\rangle \langle \delta_{r(z+e)}| \quad (6.63)$$

Offensichtlich gilt $t_{\text{Box}} = \Delta_{\text{Box}} + 2d \mathbf{1}_{\text{Box}}$ und $t_{\text{BoxZ}} = \Delta_{\text{BoxZ}} + 2d \mathbf{1}_{\text{Box}}$.

Für den Fall $d = 1$ kann man den folgenden anschaulichen Beweis leicht nachvollziehen:

$$\mathcal{R} := -\Delta_{\text{Box}} - (-\Delta_{\text{BoxZ}}) = -t_{\text{Box}} + t_{\text{BoxZ}} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 1 \\ & \ddots & \\ 1 & & 0 \end{pmatrix}_{\ell \times \ell} \quad \text{mit } \ell = |\text{Box}| = 2M + 1$$

und die Wirkung unter Konjugation durch die unitären Matrizen $U_1, U_2, \dots, U_{\ell-1}, U_\ell$ zeigt sich folgendermaßen:

$$U_1 \mathcal{R} U_1^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & 0 \end{pmatrix}_{\ell \times \ell}, \quad U_2 \mathcal{R} U_2^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & & \\ 0 & 1 & 0 & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & 0 \end{pmatrix}_{\ell \times \ell}, \quad U_{\ell-1} \mathcal{R} U_{\ell-1}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & 0 & 1 \\ 0 & & 1 & 0 \end{pmatrix}_{\ell \times \ell}$$

und $U_\ell \mathcal{R} U_\ell^\dagger = \mathcal{R}$ da $U_\ell = \mathbf{1}_{\text{Box}}$.

Daraus ergibt sich Folgendes:

$$\sum_{y \in \text{Box}} U_y \mathcal{R} U_y^\dagger = \sum_{n=1}^{\ell} U_n \mathcal{R} U_n^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 1 & & \\ 0 & 1 & 0 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \\ 1 & & & & 1 & 0 \end{pmatrix}_{\ell \times \ell} = t_{\text{BoxZ}} = \Delta_{\text{BoxZ}} + 2d \mathbf{1}_{\text{Box}},$$

was die Proposition 6.1 für den Fall $d = 1$ beweist.

Für den Fall $d \geq 2$ benutzen wir folgende Behauptung:

Behauptung 6.5. (Umformung des Differenzoperators \mathcal{R})

Weiterhin lässt sich der Operator \mathcal{R} folgendermaßen umschreiben:

$$\mathcal{R} = \sum_{z \in \partial \text{Box}} \sum_{\substack{e \in R_1(0): \\ z+e \notin \text{Box}}} |\delta_z\rangle \langle \delta_{r(z+e)}| \quad (6.64)$$

Nach dieser Behauptung gilt

$$\begin{aligned} \sum_{y \in \text{Box}} U_y \mathcal{R} U_y^\dagger &= \sum_{y \in \text{Box}} \left(\sum_{a \in \text{Box}} |\delta_a\rangle \langle \delta_{r(a+y)}| \right) \left(\sum_{z \in \partial \text{Box}} \sum_{\substack{f \in R_1(0): \\ z+f \notin \text{Box}}} |\delta_z\rangle \langle \delta_{r(z+f)}| \right) \left(\sum_{b \in \text{Box}} |\delta_{r(b+y)}\rangle \langle \delta_b| \right) \\ &= \sum_{a, b \in \text{Box}} |\delta_a\rangle \left[\sum_{y \in \text{Box}} \sum_{z \in \partial \text{Box}} \sum_{\substack{f \in R_1(0) \\ z+f \notin \text{Box}}} \langle \delta_{r(a+y)} || \delta_z \rangle \langle \delta_{r(z+f)} || \delta_{r(b+y)} \rangle \right] \langle \delta_b| \\ &= \sum_{a, b \in \text{Box}} F(a, b) |\delta_a\rangle \langle \delta_b| \end{aligned}$$

wobei

$$F(a, b) := \sum_{y \in \text{Box}} \sum_{z \in \partial \text{Box}} \sum_{\substack{f \in R_1(0): \\ z+f \notin \text{Box}}} \langle \delta_{r(a+y)} || \delta_z \rangle \langle \delta_{r(z+f)} || \delta_{r(b+y)} \rangle = \sum_{y \in \text{Box}} \sum_{z \in \partial \text{Box}} \sum_{\substack{f \in R_1(0): \\ z+f \notin \text{Box}}} \delta_{\{r(a+y)=z\}} \delta_{\{r(z+f)=r(b+y)\}} \quad (6.65)$$

Somit bleibt es nur zu zeigen, dass

$$F(a, b) = \begin{cases} |\text{Box}^{(d-1)}|, & \text{falls } a, b \in \text{Box} \text{ mit } r(b-a) = e \in R_1(0) \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

Behauptung 6.6. Folgendes gilt für die Summanden in (6.65):

$$\delta_{\{r(a+y)=z\}} \delta_{\{r(z+f)=r(b+y)\}} = \delta_{\{r(a+y)=z\}} \delta_{\{r(z+f)=r(b+y)\}} \delta_{\{r(b-a)=f\}} \quad (6.66)$$

Nach (6.65) und nach dieser Behauptung gilt

$$F(a, b) = \sum_{y \in \text{Box}} \sum_{z \in \partial \text{Box}} \sum_{\substack{f \in R_1(0): \\ z+f \notin \text{Box}}} \delta_{\{r(a+y)=z\}} \delta_{\{r(z+f)=r(b+y)\}} \delta_{\{r(b-a)=f\}}, \quad (6.67)$$

was $F(a, b) = 0$ im Fall $r(b-a) \notin R_1(0)$ beweist.

Ist Andererseits $r(b-a) = e$ für ein festes $e \in R_1(0)$, dann gilt nach (6.67)

$$\begin{aligned}
F(a, b) &= \sum_{y \in \text{Box}} \sum_{\substack{z \in \partial \text{Box}: \\ z+e \notin \text{Box}}} \delta_{\{r(a+y)=z\}} \delta_{\{r(z+e)=r(b+y)\}} \\
&= \sum_{\substack{z \in \partial \text{Box}: \\ z+e \notin \text{Box}}} \sum_{\substack{y \in \text{Box} \\ r(y+a)=z}} \delta_{\{r(a+y)=z\}} \delta_{\{r(z+e)=r(b+y)\}} \\
&= \sum_{\substack{z \in \partial \text{Box}: \\ z+e \notin \text{Box}}} \sum_{\substack{y \in \text{Box}: \\ r(y+a)=z}} 1 \cdot \delta_{\{r(z+e)=r(b+y)\}}
\end{aligned}$$

Aber nur ein einziges $y \in \text{Box}$ existiert, so dass $r(y+a) = z$ für ein festes gegebenes z , und zwar $y = r(z-a)$. Daher folgt:

$$F(a, b) = \sum_{\substack{z \in \partial \text{Box}: \\ z+e \notin \text{Box}}} \delta_{\{r(z+e)=r(b+r(z-a))\}} \quad (6.68)$$

aber nun ist $\delta_{\{r(z+e)=r(b+r(z-a))\}} = 1$ für $r(b-a) = e$, da $r(b+r(z-a)) = r(b+z-a+m) = r(b-a+z+m) = r(e+n+z+m) = r(z+e+m+n) = r(z+e)$, wobei $m = (m_1, \dots, m_d)$ und $n = (n_1, \dots, n_d)$ mit $m_\nu, n_\nu \in (2M+1)\mathbb{Z}$ und $\nu \in \{1, \dots, d\}$.

Dieses zeigt, dass Folgendes im Fall $r(b-a) = e$ gilt:

$$\begin{aligned}
F(a, b) &= |\{z \in \partial \text{Box} \mid z+e \notin \text{Box}\}| \\
&= |\{z \in \text{Box} \mid \langle z - Me \mid e \rangle = 0\}| = |F_e| \quad (\text{siehe nächste Abbildung}) \\
&= |\text{Box}^{(d-1)}|
\end{aligned}$$

wobei $F_e := \{z \in \text{Box} \mid \langle z - Me \mid e \rangle = 0\}$ (die Fläche der Box, deren Normale \mathbf{n} zu dem Einheitsvektor e parallel ist).

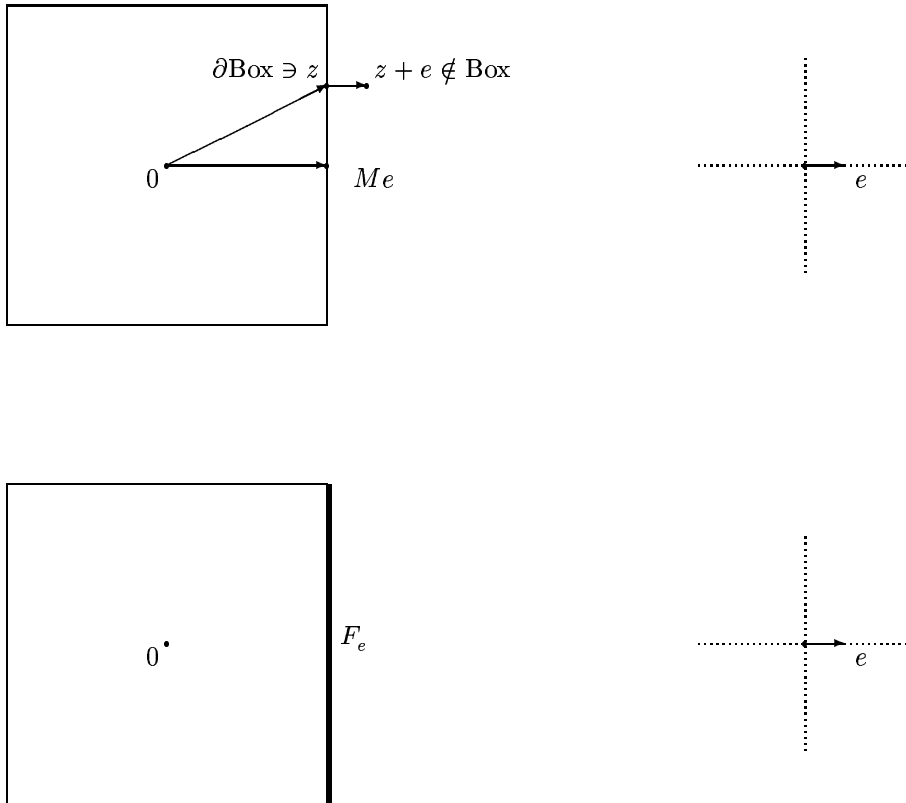


Abbildung zur Erklärung, warum $\{z \in \partial\text{Box} \mid z + e \notin \text{Box}\} = \{z \in \text{Box} \mid \langle z - Me \mid e \rangle = 0\} =: F_e$ gilt.

Genauer sind die Elemente von F_e gegeben durch:

$$\begin{aligned}
 F_e &= \{z \in \text{Box} \mid \langle z - Me \mid e \rangle = 0\} = \{z \in \text{Box} \mid \langle z \mid e \rangle = M\} \\
 &= \{z \in \text{Box} \mid z_\nu = \sigma M\} \quad \text{wobei } e \equiv e_{\nu,\sigma} = (0, 0, \underbrace{\sigma}_{\nu\text{-te Stelle}}, 0, 0) \text{ mit } \nu \in \{1, \dots, d\} \text{ und } \sigma \in \{-1, 1\} \\
 &= \{z \equiv (z_1, \dots, z_d) \mid z_\kappa \in \{-M, \dots, 0, \dots, M\} \text{ für alle } \kappa \neq \nu \text{ und } z_\nu = \sigma M\}
 \end{aligned}$$

und daher ist es leichter zu sehen, dass $|F_e| = (2M + 1)^{d-1} = |\text{Box}^{(d-1)}|$ gilt.

Abschließend beweisen wir die Behauptungen 6.5 und 6.6

Beweis der Behauptung 6.5:

$$\begin{aligned}
\mathcal{R} &:= -\Delta_{\text{Box}} - (-\Delta_{\text{Box}Z}) = t_{\text{Box}Z} - t_{\text{Box}} \quad (\text{nach 6.63}) \\
&= \sum_{z \in \text{Box}} \sum_{e \in R_1(0)} |\delta_y \langle \delta_{r(z+e)} | \quad - \quad \sum_{z \in \text{Box}} \sum_{\substack{e \in R_1(0): \\ z+e \in \text{Box}}} |\delta_y \rangle \langle \delta_{z+e} | \\
&= \sum_{z \in \text{Box}} \sum_{\substack{e \in R_1(0): \\ z+e \notin \text{Box}}} |\delta_y \rangle \langle \delta_{z+e} | \\
&= \sum_{z \in \partial \text{Box}} \sum_{\substack{e \in R_1(0): \\ z+e \notin \text{Box}}} |\delta_y \rangle \langle \delta_{z+e} | \quad (\text{nach Definition von } \partial \text{Box} \quad \exists e \in R_1(0), \text{ so dass } z+e \notin \text{Box}),
\end{aligned}$$

was die Behauptung 6.5 beweist.

△

Beweis der Behauptung 6.6:

$$\begin{aligned}
\delta_{\{r(a+y)=z\}} \delta_{\{r(z+f)=r(b+y)\}} &= \delta_{\{r(a+y+f)=r(z+f)\}} \delta_{\{r(z+f)=r(b+y)\}} \\
&= \delta_{\{r(a+y+f)=r(z+f)\}} \delta_{\{r(z+f)=r(b+y)\}} \delta_{\{r(a+y+f)=r(y+b)\}} \\
&= \delta_{\{r(a+y)=z\}} \delta_{\{r(z+f)=r(b+y)\}} \delta_{\{r(a+y+f)=r(y+b)\}} \\
&= \delta_{\{r(a+y)=z\}} \delta_{\{r(z+f)=r(b+y)\}} \delta_{\{r(f)=r(b-a)\}} \\
&= \delta_{\{r(a+y)=z\}} \delta_{\{r(z+f)=r(b+y)\}} \delta_{\{f=r(b-a)\}},
\end{aligned}$$

was die Behauptung 6.6 beweist.

△

Damit beenden wir den Beweis der Proposition 6.1.

□

6.6 Untere Schranke an $\frac{1}{|\text{Box}|} \text{Tr}_{\text{Box}} \{e^{\beta \Delta_{\text{Box}}}\}$ (Theorem 6.3)

Theorem 6.3. Für alle $\beta \geq 1$ und Box mit Kantenlänge $\ell \geq \ell_3(\beta, d) := \max \left\{ \frac{2d}{\ln 2} \beta, \left(\frac{4\pi}{\text{erf}(\pi)} \sqrt{\frac{2\pi}{e}} \right) \beta \right\}$ gilt Folgendes:

$$\frac{1}{|\text{Box}|} \text{Tr}_{\text{Box}} \{e^{\beta \Delta_{\text{Box}}}\} \geq \frac{1}{2} \left(\frac{\text{erf}(\pi)}{4\sqrt{\pi}} \right)^d \left(\frac{1}{\beta} \right)^{d/2} \quad (6.69)$$

Der Beweis des Theorems 6.3 folgt unmittelbar aus den folgenden drei Lemmata:

Lemma 6.3. (Anwendung der Jensen-Ungleichung)

Für eine Box mit Kantenlänge ℓ gilt Folgendes:

$$\frac{1}{|\text{Box}|} \text{Tr}_{\text{Box}} \{e^{\beta \Delta_{\text{Box}}}\} \geq e^{-\beta \frac{2d}{\ell}} \left(\frac{1}{|\text{Box}^*|} \sum_{k \in \text{Box}^*} e^{-\beta \varepsilon(k)} \right), \quad \beta > 0 \quad (6.70)$$

Hierbei sind Box^* die Brillouin-Zone (oder reziprokes Gitter) zur Box und $\varepsilon(k)$ die Dispersionsrelation von $-\Delta_{\text{Box}^*}$ gegeben durch:

$$\text{Box}^* := \left([-\pi, \pi) \cap \frac{2\pi}{\ell} \mathbb{Z} \right)^d, \quad \ell = 2M + 1 \quad (6.71)$$

bzw.

$$\varepsilon(k) := \sum_{\nu=1}^d 2 - 2 \cos(k_\nu), \quad k = (k_1, \dots, k_d) \in [-\pi, \pi)^d \quad (6.72)$$

Bemerkung 6.2. Wäre $\frac{1}{|\text{Box}|} \text{Tr}_{\text{Box}} \{e^{\beta \Delta_{\text{Box}^*}}\}$ statt $\frac{1}{|\text{Box}|} \text{Tr}_{\text{Box}} \{e^{\beta \Delta_{\text{Box}}}\}$ in (6.70), dann hätten wir

$$\frac{1}{|\text{Box}|} \text{Tr}_{\text{Box}} \{e^{\beta \Delta_{\text{Box}^*}}\} = \left(\frac{1}{|\text{Box}^*|} \sum_{k \in \text{Box}^*} e^{-\beta \varepsilon(k)} \right), \quad (6.73)$$

da die Eigenvektoren von $-\Delta_{\text{Box}^*}$ im Gegensatz zu $-\Delta_{\text{Box}}$ bekannt sind. (nämlich: $\varphi_k(x) = e^{i k \cdot x}$ mit Eigenwert $\varepsilon(k)$, $k \in \text{Box}^*$).

Ferner bemerken wir, dass die Tatsachen

(i) $e^{-\beta \frac{2d}{\ell}} \nearrow 1$ wenn $\ell \rightarrow \infty$.

(ii) $|\text{Box}| \simeq |\text{Box}^*|$ wenn $\ell \rightarrow \infty$.

in Übereinstimmung mit (6.70) und (6.73) stehen.

Lemma 6.4. Ist die Kantenlänge ℓ der Box hinreichend groß, können wir $e^{-\beta \frac{2d}{\ell}}$ durch $\frac{1}{2}$ ersetzen. Nämlich:

Für alle $\beta > 0$ gilt

$$\frac{1}{|\text{Box}|} \text{Tr}_{\text{Box}} \{e^{\beta \Delta_{\text{Box}}}\} \geq \frac{1}{2} \left(\frac{1}{|\text{Box}^*|} \sum_{k \in \text{Box}^*} e^{-\beta \varepsilon(k)} \right) \quad \text{falls } \ell \geq \ell_1(\beta, d) := \frac{2d}{\ln 2} \beta \quad (6.74)$$

Lemma 6.5. Ist die Kantenlänge ℓ der Box weiterhin hinreichend groß, können wir eine untere Schranke an $\left(\frac{1}{|\text{Box}^*|} \sum_{k \in \text{Box}^*} e^{-\beta \varepsilon(k)} \right)$ unabhängig von ℓ erhalten. Nämlich:

Für alle $\beta \geq 1$ gilt

$$\left(\frac{1}{|\text{Box}^*|} \sum_{k \in \text{Box}^*} e^{-\beta \varepsilon(k)} \right) \geq \left(\frac{\text{erf}(\pi)}{4\sqrt{\pi}} \right)^d \left(\frac{1}{\beta} \right)^{d/2} \quad \text{falls } \ell \geq \ell_2(\beta, d) := \left(\frac{4\pi}{\text{erf}(\pi)} \sqrt{\frac{2\pi}{e}} \right) \beta \quad (6.75)$$

6.6.1 Beweis der Lemmata zum Theorem 6.3

Beweis des Lemmas 6.3:

Der Beweis des Lemmas 6.3 beruht auf der Proposition 6.1 und der Anwendung der Jensen-Ungleichung (siehe Lemma 6.6) für die konvexe Funktion $f(\lambda) = e^{-\beta\lambda}$.

Lemma 6.6. (Jensen-Ungleichung) Seien A, B Matrizen und $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eine konvexe Funktion, dann gilt

$$\mathrm{Tr}\{f((1-\alpha)A + \alpha B)\} \leq (1-\alpha)\mathrm{Tr}\{f(A)\} + \alpha\mathrm{Tr}\{f(B)\} \quad \text{für alle } 0 \leq \alpha \leq 1$$

Eine unmittelbare Konsequenz ist Folgendes: Im Allgemeinen gilt für $\{A_i\}_{i=1}^N$ Matrizen Folgendes:

$$\mathrm{Tr}\left\{f\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N A_i\right)\right\} \leq \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \mathrm{Tr}\{f(A_i)\} \quad \text{für alle } N \in \mathbb{N}$$

Für einen Beweis siehe z.B. [S 79].

Verwenden wir nun die Jensen-Ungleichung zum Beweis des Lemmas 6.3. Nämlich:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\mathrm{Box}|} \mathrm{Tr}_{\mathrm{Box}}\{e^{\beta\Delta_{\mathrm{Box}}}\} &= \frac{1}{|\mathrm{Box}|} \mathrm{Tr}_{\mathrm{Box}}\{e^{-\beta(-\Delta_{\mathrm{Box}})}\} = \frac{1}{|\mathrm{Box}|} \mathrm{Tr}_{\mathrm{Box}}\{e^{-\beta(-\Delta_{\mathrm{BoxZ}}+\mathcal{R})}\} \quad (\text{nach Definition von } \mathcal{R} \text{ in (6.61)}) \\ &= \frac{1}{|\mathrm{Box}|} \left[\frac{|\mathrm{Box}|}{|\mathrm{Box}|} \mathrm{Tr}_{\mathrm{Box}}\left\{e^{-\beta(-\Delta_{\mathrm{BoxZ}}+\mathcal{R})}\right\} \right] \\ &= \frac{1}{|\mathrm{Box}|} \left[\frac{1}{|\mathrm{Box}|} \sum_{y \in \mathrm{Box}} \mathrm{Tr}_{\mathrm{Box}}\left\{U_y e^{-\beta(-\Delta_{\mathrm{BoxZ}}+\mathcal{R})} U_y^\dagger\right\} \right] \quad (\text{da unitäre Konjugation trace-preserving ist}) \\ &= \frac{1}{|\mathrm{Box}|} \left[\frac{1}{|\mathrm{Box}|} \sum_{y \in \mathrm{Box}} \mathrm{Tr}_{\mathrm{Box}}\left\{e^{-\beta(-U_y\Delta_{\mathrm{BoxZ}}U_y^\dagger + U_y\mathcal{R}U_y^\dagger)}\right\} \right] \quad (\text{da jedes } U_y \text{ unitär ist}) \\ &= \frac{1}{|\mathrm{Box}|} \left[\frac{1}{|\mathrm{Box}|} \sum_{y \in \mathrm{Box}} \mathrm{Tr}_{\mathrm{Box}}\left\{e^{-\beta(-\Delta_{\mathrm{BoxZ}} + U_y\mathcal{R}U_y^\dagger)}\right\} \right] \quad (\text{da } \Delta_{\mathrm{BoxZ}} \text{ invariant gegenüber einer zyklischen Translation } U_y \text{ ist}) \\ &\geq \frac{1}{|\mathrm{Box}|} \left[\mathrm{Tr}_{\mathrm{Box}}\left\{e^{-\beta\left[\frac{1}{|\mathrm{Box}|} \sum_{y \in \mathrm{Box}} (-\Delta_{\mathrm{BoxZ}} + U_y\mathcal{R}U_y^\dagger)\right]}\right\} \right] \quad (\text{Nach Anwendung der Jensen-Ungl. mit der konvexen Funktion } f(\lambda)=e^{-\beta\lambda}) \\ &= \frac{1}{|\mathrm{Box}|} \mathrm{Tr}_{\mathrm{Box}}\left\{e^{-\beta\left[-\Delta_{\mathrm{BoxZ}} + \frac{1}{|\mathrm{Box}|} \sum_{y \in \mathrm{Box}} U_y\mathcal{R}U_y^\dagger\right]}\right\} \\ &= \frac{1}{|\mathrm{Box}|} \mathrm{Tr}_{\mathrm{Box}}\left\{e^{-\beta\left[-\Delta_{\mathrm{BoxZ}} + \frac{|\mathrm{Box}^{(d-1)}|}{|\mathrm{Box}|}(\Delta_{\mathrm{BoxZ}} + 2d\mathbf{1}_{\mathrm{Box}})\right]}\right\} \quad (\text{nach Proposition 6.1}) \\ &= \frac{1}{|\mathrm{Box}|} \sum_{k \in \mathrm{Box}^*} e^{-\beta[\varepsilon(k) + \frac{|\mathrm{Box}^{(d-1)}|}{|\mathrm{Box}|}(2d-\varepsilon(k))]} = \frac{1}{|\mathrm{Box}|} \sum_{k \in \mathrm{Box}^*} e^{-\beta[\varepsilon(k) + \frac{1}{\ell}(2d-\varepsilon(k))]} \\ &= e^{-\beta\frac{2d}{\ell}} \left(\frac{1}{|\mathrm{Box}|} \sum_{k \in \mathrm{Box}^*} e^{-\beta\left[\frac{\ell-1}{\ell}\varepsilon(k)\right]} \right) \\ &\geq e^{-\beta\frac{2d}{\ell}} \left(\frac{1}{|\mathrm{Box}|} \sum_{k \in \mathrm{Box}^*} e^{-\beta\varepsilon(k)} \right) \quad (\text{da } \frac{\ell-1}{\ell} \leq 1) \\ &= e^{-\beta\frac{2d}{\ell}} \left(\frac{1}{|\mathrm{BZ}|} \sum_{k \in \mathrm{Box}^*} e^{-\beta\varepsilon(k)} \right) \end{aligned}$$

□

Beweis des Lemmas 6.4:

Ist die Kantenlänge $\ell \geq \ell_1(\beta, d) := \frac{2d}{\ln 2} \beta$, dann gilt

$$e^{-\beta \frac{2d}{\ell}} \geq e^{-\beta \frac{2d}{\ell_1(\beta, d)}} = \exp\left(-\beta \frac{2d}{\frac{2d}{\ln 2} \beta}\right) = e^{-\ln 2} = \frac{1}{2},$$

was mit dem Lemma 6.3 den Beweis des Lemmas 6.4 schließt. □

Beweis des Lemmas 6.5:

Der Beweis des Lemmas 6.5 beruht auf den folgenden drei Lemmata:

Lemma 6.7. *(Reduktion auf den eindimensionalen Fall)*

$$\frac{1}{|\text{Box}|} \sum_{k \in \text{Box}^*} e^{-\beta \varepsilon(k)} \geq \left(\frac{1}{2M+1} \sum_{\kappa \in BZ_{2M+1}} e^{-\beta \kappa^2} \right)^d \quad (6.76)$$

Hierbei ist BZ_{2M+1} die eindimensionale Brillouin-Zone zu dem eindimensionalen Gitter $\{-M, \dots, 0, \dots, M\}$ definiert durch:

$$BZ_{2M+1} := [-\pi, \pi) \cap \frac{2\pi}{2M+1} \mathbb{Z} \quad (6.77)$$

Damit gilt selbstverständlich, dass

$$\text{Box}^* := BZ_{2M+1}^d$$

Lemma 6.8. *(Abweichung vom thermodynamischen Limes)*

Für alle $M \in \mathbb{N}$ gilt

$$\left| \frac{1}{2M+1} \sum_{\kappa \in BZ_{2M+1}} e^{-\beta \kappa^2} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-\beta \kappa^2} d\kappa \right| \leq \sqrt{\frac{2}{e}} \left(\frac{\pi}{2M+1} \right) \sqrt{\beta} \quad (6.78)$$

Lemma 6.9. *(Potenzgesetz in β für den thermodynamischen Limes)*

Für alle $\beta \geq 1$ gilt

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-\beta \kappa^2} d\kappa \geq \left(\frac{\text{erf}(\pi)}{2\sqrt{\pi}} \right) \frac{1}{\sqrt{\beta}} \quad (6.79)$$

Hierbei ist $\text{erf}(x)$ die Errorfunktion, die folgendermaßen definiert ist:

$$\text{erf}(x) := \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-x}^x e^{-t^2} dt, \quad \text{erf}(\pi) \approx 0,9999911239$$

Beweis des Lemmas 6.5 nach Lemmata 6.7, 6.8 und 6.9 :

Die Voraussetzung $\ell^d \equiv (2M+1)^d = |\text{Box}| \geq |\text{Box}|_2(\beta, d) := \left(\frac{4\pi}{\text{erf}(\pi)} \sqrt{\frac{2\pi}{e}} \right)^d \beta^d$ ist äquivalent zu:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\text{erf}(\pi)}{2\sqrt{\pi}} \right) \frac{1}{\sqrt{\beta}} \geq \sqrt{\frac{2}{e}} \left(\frac{\pi}{2M+1} \right) \sqrt{\beta} \quad (6.80)$$

Weiterhin gilt für alle $\beta \geq 1$ und $M \in \mathbb{N}$ mit $(2M+1)^d = |\text{Box}| \geq |\text{Box}|_2(\beta, d) := \left(\frac{4\pi}{\text{erf}(\pi)} \sqrt{\frac{2\pi}{e}} \right)^d \beta^d$ Folgendes:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2M+1} \sum_{\kappa \in BZ_{2M+1}} e^{-\beta\kappa^2} &\geq \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-\beta\kappa^2} d\kappa - \sqrt{\frac{2}{e}} \left(\frac{\pi}{2M+1} \right) \sqrt{\beta} && \text{(nach Lemma 6.8)} \\ &\geq \left(\frac{\text{erf}(\pi)}{2\sqrt{\pi}} \right) \frac{1}{\sqrt{\beta}} - \sqrt{\frac{2}{e}} \left(\frac{\pi}{2M+1} \right) \sqrt{\beta} && \text{(nach Lemma 6.9, } \beta \geq 1) \\ &\geq \left(\frac{\text{erf}(\pi)}{2\sqrt{\pi}} \right) \frac{1}{\sqrt{\beta}} - \frac{1}{2} \left(\frac{\text{erf}(\pi)}{2\sqrt{\pi}} \right) \frac{1}{\sqrt{\beta}} && \text{(nach 6.80)} \\ &= \left(\frac{\text{erf}(\pi)}{4\sqrt{\pi}} \right) \frac{1}{\sqrt{\beta}} > 0 \end{aligned}$$

D. h. unter den obigen Bedingungen gilt

$$\frac{1}{2M+1} \sum_{\kappa \in BZ_{2M+1}} e^{-\beta\kappa^2} \geq \left(\frac{\text{erf}(\pi)}{4\sqrt{\pi}} \right) \frac{1}{\sqrt{\beta}} > 0, \quad (6.81)$$

was mit dem Lemma 6.7 den Beweis des Lemmas 6.5 schließt. Nämlich:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{|\text{Box}|} \sum_{k \in \text{Box}^*} e^{-\beta \varepsilon(k)} \right) &\geq \left(\frac{1}{2M+1} \sum_{\kappa \in BZ_{2M+1}} e^{-\beta\kappa^2} \right)^d && \text{(nach Lemma 6.7)} \\ &\geq \left(\frac{\text{erf}(\pi)}{4\sqrt{\pi}} \right)^d \left(\frac{1}{\beta} \right)^{d/2} && \text{(nach 6.81)} \end{aligned}$$

□

Beweis des Lemmas 6.7:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{|\text{Box}|} \sum_{k \in \text{Box}^*} e^{-\beta \varepsilon(k)} &= \frac{1}{|\text{Box}|} \sum_{k \in \text{Box}^*} e^{-\beta \sum_{\nu=1}^d 2-2\cos(k_\nu)} \\
&\geq \frac{1}{|\text{Box}|} \sum_{k \in \text{Box}^*} e^{-\beta \sum_{\nu=1}^d k_\nu^2} \quad (\text{da } 2-2\cos(x) \leq x^2, x \in \mathbb{R}) \\
&= \frac{1}{(2M+1)^d} \sum_{(k_1, \dots, k_d) \in BZ_{2M+1}^d} e^{-\beta k_1^2} e^{-\beta k_2^2} \dots e^{-\beta k_{d-1}^2} e^{-\beta k_d^2} \\
&= \frac{1}{(2M+1)^d} \sum_{k_1 \in BZ_{2M+1}} \sum_{k_2 \in BZ_{2M+1}} \dots \sum_{k_{d-1} \in BZ_{2M+1}} \sum_{k_d \in BZ_{2M+1}} e^{-\beta k_1^2} e^{-\beta k_2^2} \dots e^{-\beta k_{d-1}^2} e^{-\beta k_d^2} \\
&= \frac{1}{(2M+1)^d} \sum_{k_1 \in BZ_{2M+1}} \sum_{k_2 \in BZ_{2M+1}} \dots \sum_{k_{d-1} \in BZ_{2M+1}} e^{-\beta k_1^2} e^{-\beta k_2^2} \dots e^{-\beta k_{d-1}^2} \sum_{k_d \in BZ_{2M+1}} e^{-\beta k_d^2} \\
&= \left(\frac{1}{2M+1} \sum_{\kappa \in BZ_{2M+1}} e^{-\beta \kappa^2} \right)^d
\end{aligned}$$

□

Beweis des Lemmas 6.8:

Für $\xi \in \mathbb{T} := [-\pi, \pi]$ seien folgende offene Intervalle in \mathbb{T} definiert:

$$\mathcal{I}_r(\xi) := \{k \in \mathbb{T} \mid |k - \xi| < r\}, \quad r > 0$$

Nach Definition der eindimensionalen Brillouin-Zone gilt Folgendes, wenn $r = \frac{1}{2} \frac{2\pi}{2M+1} = \frac{\pi}{2M+1}$:

(a)

$$\mathcal{I}_{\frac{\pi}{2M+1}}(\xi_1) \cap \mathcal{I}_{\frac{\pi}{2M+1}}(\xi_2) = \emptyset \quad \text{falls } \xi_1, \xi_2 \in BZ_{2M+1} \text{ und } \xi_1 \neq \xi_2$$

(6.82)

(b)

$$\tilde{\mathbb{T}} := \bigcup_{\xi \in BZ_{2M+1}} \mathcal{I}_{\frac{\pi}{2M+1}}(\xi) \subset \mathbb{T} \quad \text{und das Lebesgue-Maß } \mu_{\text{Leb}}(\mathbb{T} - \tilde{\mathbb{T}}) = 0$$

Nach (a) ist die folgende Funktion $\xi : \tilde{\mathbb{T}} \rightarrow BZ_{2M+1}$ wohldefiniert:

$$\xi(k) := \{ \xi \in BZ_{2M+1} \mid k \in \mathcal{I}_{\frac{\pi}{2M+1}}(\xi) \}$$

(6.83)

Behauptung 6.7. Sei eine Funktion $g : [-\pi, \pi] \rightarrow \mathbb{R}$, dann ihr Mittel auf der eindimensionalen Brillouin-Zone lässt sich durch ein Integral über \mathbb{T} folgendermaßen ausdrücken:

$$\frac{1}{2M+1} \sum_{\eta \in BZ_{2M+1}} g(\eta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} g(\xi(\kappa)) d\kappa$$

(6.84)

Verwende man die Behauptung 6.7 für $g(\kappa) = e^{-\beta \kappa^2}$, erhält man:

Behauptung 6.8.

$$\left| \frac{1}{2M+1} \sum_{\kappa \in BZ_{2M+1}} e^{-\beta \kappa^2} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-\beta \kappa^2} d\kappa \right| \leq \frac{1}{2\pi} \sum_{\xi \in BZ_{2M+1}} \int_{\mathcal{I}_{\frac{\pi}{2M+1}}(\xi)} |e^{-\beta \xi^2} - e^{-\beta \kappa^2}| d\kappa$$

(6.85)

Behauptung 6.9. Für alle $\xi \in BZ_{2M+1}$ und $\kappa \in \mathcal{I}_{\frac{\pi}{2M+1}}(\xi)$ gilt

$$\left| e^{-\beta\xi^2} - e^{-\beta\kappa^2} \right| \leq \sqrt{\frac{2}{e}} \left(\frac{\pi}{2M+1} \right) \sqrt{\beta} \quad (6.86)$$

Nun folgt der Beweis des Lemmas 6.8 unmittelbar aus den Behauptung 6.8 und 6.9, nämlich:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2M+1} \sum_{\kappa \in BZ_{2M+1}} e^{-\beta\kappa^2} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-\beta\kappa^2} d\kappa \right| &\leq \frac{1}{2\pi} \sum_{\xi \in BZ_{2M+1}} \int_{\mathcal{I}_{\frac{\pi}{2M+1}}(\xi)} \sqrt{\frac{2}{e}} \left(\frac{\pi}{2M+1} \right) \sqrt{\beta} d\kappa \quad (\text{n. Behauptungen} \\ &\quad \text{6.8 u. 6.9}) \\ &= \frac{1}{2\pi} |BZ_{2M+1}| |\mathcal{I}_{\frac{\pi}{2M+1}}(\xi)| \sqrt{\frac{2}{e}} \left(\frac{\pi}{2M+1} \right) \sqrt{\beta} \quad (\text{da der Integrand} \\ &\quad \text{von } \kappa \text{ unabhängig ist}) \\ &= \frac{1}{2\pi} (2M+1) \frac{2\pi}{(2M+1)} \sqrt{\frac{2}{e}} \left(\frac{\pi}{2M+1} \right) \sqrt{\beta} \\ &= \sqrt{\frac{2}{e}} \left(\frac{\pi}{2M+1} \right) \sqrt{\beta} \end{aligned}$$

Damit wir den Beweis des Lemmas 6.8 schließen, bleibt es nur die Behauptungen 6.7-6.9 zu zeigen.

Beweis der Behauptung 6.7:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} g(\xi(\kappa)) d\kappa &\stackrel{(\bullet)}{=} \frac{1}{2\pi} \int_{\tilde{\mathbb{T}}} g(\xi(\kappa)) d\kappa \stackrel{(\circ)}{=} \frac{1}{2\pi} \sum_{\xi \in BZ_{2M+1}} \int_{\mathcal{I}_{\frac{\pi}{2M+1}}(\xi)} g(\xi(\kappa)) d\kappa \stackrel{(\star)}{=} \frac{1}{2\pi} \sum_{\xi \in BZ_{2M+1}} g(\xi) \int_{\mathcal{I}_{\frac{\pi}{2M+1}}(\xi)} d\kappa \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[\sum_{\xi \in BZ_{2M+1}} g(\xi) \right] \left(\frac{2\pi}{2M+1} \right) = \frac{1}{2M+1} \sum_{\xi \in BZ_{2M+1}} g(\xi) \end{aligned}$$

In (\bullet) und (\circ) haben wir den Punkt (b) in (6.82) benutzt, nämlich, dass $\mu_{\text{Leb}}(\mathbb{T} - \tilde{\mathbb{T}}) = 0$ bzw. $\tilde{\mathbb{T}} := \bigcup_{\xi \in BZ_{2M+1}} \mathcal{I}_{\frac{\pi}{2M+1}}(\xi)$.

In (\star) haben wir die wohldefinierte Funktion (6.83) benutzt. △

Beweis der Behauptung 6.8:

Verwende die Behauptung 6.7 für $g(\kappa) = e^{-\beta\kappa^2}$, $\kappa \in [-\pi, \pi]$. Nämlich:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2M+1} \sum_{\kappa \in BZ_{2M+1}} e^{-\beta\kappa^2} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-\beta\kappa^2} d\kappa \right| &= \left| \frac{1}{2M+1} \sum_{\kappa \in BZ_{2M+1}} g(\kappa) - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} g(\kappa) d\kappa \right| \\ &= \left| \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} g(\xi(\kappa)) d\kappa - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} g(\kappa) d\kappa \right| \\ &\leq \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} |g(\xi(\kappa)) - g(\kappa)| d\kappa \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{\xi \in BZ_{2M+1}} \int_{\mathcal{I}_{\frac{\pi}{2M+1}}(\xi)} |g(\xi(\kappa)) - g(\kappa)| d\kappa \quad (\text{nach Punkt (b)} \\ &\quad \text{aus (6.82)}) \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{\xi \in BZ_{2M+1}} \int_{\mathcal{I}_{\frac{\pi}{2M+1}}(\xi)} |g(\xi) - g(\kappa)| d\kappa \quad (\text{nach (6.83)}) \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{\xi \in BZ_{2M+1}} \int_{\mathcal{I}_{\frac{\pi}{2M+1}}(\xi)} |e^{-\beta\xi^2} - e^{-\beta\kappa^2}| d\kappa \end{aligned}$$

△

Beweis der Behauptung 6.9:

Für alle $\xi \in BZ_{2M+1}$ und $\kappa \in \mathcal{I}_{\frac{\pi}{2M+1}}(\xi)$ gilt

$$\begin{aligned}
 \left| e^{-\beta\xi^2} - e^{-\beta\kappa^2} \right| &\leq \max_{t \in [0,1]} \left\{ \left| \frac{\partial e^{-\beta\kappa^2}}{\partial \kappa} ((1-t)\xi + t\kappa) \right| \right\} \cdot |\xi - \kappa| && \text{(nach dem Mittelwertsatz der Differentialrechnung)} \\
 &\leq \max_{t \in [0,1]} \left\{ \left| \frac{\partial e^{-\beta\kappa^2}}{\partial \kappa} ((1-t)\xi + t\kappa) \right| \right\} \cdot \frac{\pi}{2M+1} && \text{(da } \kappa \in \mathcal{I}_{\frac{\pi}{2M+1}}(\xi) \text{)} \\
 &\stackrel{(\bullet)}{\leq} \left| \frac{\partial e^{-\beta\kappa^2}}{\partial \kappa} (\kappa_*) \right| \cdot \frac{\pi}{2M+1} \\
 &= \left| \frac{\partial e^{-\beta\kappa^2}}{\partial \kappa} \left(\pm \sqrt{\frac{1}{2\beta}} \right) \right| \cdot \frac{\pi}{2M+1} \\
 &= \left| -2\beta \left(\pm \sqrt{\frac{1}{2\beta}} \right) e^{-\beta \left(\pm \sqrt{\frac{1}{2\beta}} \right)^2} \right| \cdot \frac{\pi}{2M+1} = \sqrt{2\beta} e^{-1/2} \frac{\pi}{2M+1} \\
 &= \sqrt{\frac{2}{e}} \left(\frac{\pi}{2M+1} \right) \sqrt{\beta}
 \end{aligned}$$

In (\bullet) haben wir benutzt, dass die Funktion $\left| \frac{\partial e^{-\beta\kappa^2}}{\partial \kappa} (\kappa) \right|$ auf ganz \mathbb{R} beschränkt ist. Nämlich:

$$\left| \frac{\partial e^{-\beta\kappa^2}}{\partial \kappa} (\kappa) \right| \leq \left| \frac{\partial e^{-\beta\kappa^2}}{\partial \kappa} (\kappa_*) \right| \quad \text{für alle } \kappa \in \mathbb{R},$$

wobei $\kappa_* = \pm \sqrt{\frac{1}{2\beta}}$ die einzigen Lösungen der Extremalbedingung $\frac{\partial^2 e^{-\beta\kappa^2}}{\partial \kappa^2} (\kappa_*) \stackrel{!}{=} 0$ sind.

△

Damit sind die Behauptungen 6.7-6.9 gezeigt, und daher ist das Lemma 6.8 bewiesen.

□

Beweis des Lemmas 6.9:

Für alle $\beta \geq 1$ gilt

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-\beta\kappa^2} d\kappa &= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{\beta}} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-(\sqrt{\beta}\kappa)^2} \sqrt{\beta} d\kappa \\
 &= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{\beta}} \int_{-\pi\sqrt{\beta}}^{\pi\sqrt{\beta}} e^{-x^2} dx \quad \text{(Variablensubstitution } x := \sqrt{\beta}\kappa \text{)} \\
 &\geq \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{\beta}} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-x^2} dx \quad \text{(da } \beta \geq 1 \text{)} \\
 &\geq \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\pi) = \left(\frac{\operatorname{erf}(\pi)}{2\sqrt{\pi}} \right) \frac{1}{\sqrt{\beta}}
 \end{aligned}$$

□

Somit ist das letzte Lemma (Lemma 6.5) zum Theorem 6.3 bewiesen.

□

Literatur

- [BLT 05] V. Bach, E. H. Lieb, M. V. Travaglia, *Ferromagnetism of the Low-Density Hubbard Model in the Hartree-Fock-Approximation*, <http://tw.arxiv.org/pdf/cond-mat/0506695> (2005).
- [Faz 99] P. Fazekas, *Electron Correlation and Magnetism*, World Scientific, Singapore (1999).
- [H 63] J. Hubbard, *Electron Correlations in Narrow Energy Bands*, Proc. Roy. Soc. , **A276**, 238-257 (1963).
- [K 63] J. Kanamori, *Electron Correlation and ferromagnetism of transition metals*, Prog. Theor.-Phys. **30**, 275-289 (1963).
- [G 63] M. C. Gutzwiller, *Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals*, Phys. Rev. Lett. **10**, 159-162 (1963)
- [Penn 66] D. R. Penn, *Stability Theory of the Magnetic Phases for a Simple Model of the Transitions Metals* Phys. Rev. **142**, 350-365 (1966).
- [Hirsch 85] J. E. Hirsch, *Two-Dimensional Hubbard Model: Numerical Simulation Study*, Phys. Rev. **B 31**, 4403-4419 (1985).
- [LW 68] E. H. Lieb, F. Y. Wu, *Absence of Mott transition in an exact solution of the short range, one band model in one dimension.*, Phys. Rev. Lett **20**, 1445-1448 (1968) (siehe [Lieb 93] für einen Überblick über *rigorous results* für das Hubbardmodell).
- [Lieb 89] E. H. Lieb, *Two theorems on the Hubbard Model*, Phys. Rev. Lett. **62**, 1201-1204 (1989), [Errata **62**, 1927, (1989)] (siehe [Lieb 93] für einen Überblick über *rigorous results* für das Hubbardmodell).
- [Lieb 93] E. H. Lieb, *The Hubbard Model: Some Rigorous Results and Open Problems*, In Proceedings of the Conference on Advances in Dynamical Systems and Quantum Physics: On the Occasion of the 60th Birthday of Gianfausto Dell'Antonio. Singapura, World Scientific (1995).
- [BLS 94] V. Bach, E. H. Lieb, J. P. Solovej, *Generalized Hartee-Fock theory and the Hubbard Model*, J. Stat. Phys. **76**, 3-90 (1994).
- [BP 96] V. Bach and J. Poelchau, *Hartree-Fock Gibbs states for the Hubbard model*, Markov Processes and Rel. Fields, 2(1), 225-240, (1996).
- [Nag 66] Y. Nagaoka, *Ferromagnetism in a narrow, almost half-filled S-band* , Phys. Rev. **147**, 392-405 (1966).
- [T 65] D. J. Thouless, *Exchange in solid ^3He and the Heisenberg Hamiltonian*, Proc. Phys. Soc. (London), **86**, 893-904 (1965).
- [Tsa-r1 97] H. Tasaki, *From Nagaoka's ferromagnetism to flat-band ferromagnetism and beyond: An introduction to ferromagnetism in the Hubbard model*, Progress of Theoretical Physics, Vol. **99**, No. 4, April 1998. preprint (1997), cond-mat/9712219.
- [Tsa-r2 97] H. Tasaki, *The Hubbard model - introduction and some rigorous results*, cond-mat/9512169 (1997).
- [Mil 91] A. Milke, *Ferromagnetism in the Hubbard model on line graphs and further considerations*, J. Phys. A: Math. Gen. **24**, 3311-3321 (1991).

- [Mi2 92] A. Milke, *Exact ground states for the Hubbard model on the kagomé lattice*, J. Phys. A: Math. Gen. **25**, 4335-4345 (1992).
- [MT 93] A. Mielke and H. Tasaki, *Ferromagnetism in the Hubbard model – examples from models with degenerate single-electron ground states*. Commun. Math. Phys., **158**, 341-371, (1993). (Archived as cond-mat/9305026).
- [Tas1 94] H. Tasaki, *Stability of Ferromagnetism in the Hubbard Model*, Phys. Rev. Lett. **73**, 1158-1161 (1994).
- [Tas2 95] H. Tasaki, *Stability of ferromagnetism in Hubbard models with nearly-flat bands*, J. Stat. Phys. **84**, 535-653 (1996).
- [Tas3 95] H. Tasaki, *Ferromagnetism in Hubbard-Models*, Phy. Rev. Lett., **75**, 4678-4681 (1995), cond-mat/9509063.
- [Tas4 03] H. Tasaki, *Ferromagnetism in the Hubbard model - A constructive approach -*, cond-mat/0301071 (2003).
- [SA 91] A. Sütő, *Absence of highest spin ground states in the Hubbard model*, Commun. Math. Phys. **140**, 43-62 (1991).
- [TB 91] B. Tóth, *Failure of saturated ferromagnetism for the Hubbard model with two holes*, Lett. Math. Phys. **22**, 321-333 (1991).
- [SKA 90] B.S. Shastry, H.R. Krishnamurthy and P.W. Anderson. *Instability of the Nagaoka ferromagnetic state of the $U = \infty$ Hubbard model*. Phys. Rev. B, **41**:2375-2379 (1990).
- [FLU 02] J. K. Freericks, E. H. Lieb und D. Ueltschi, *Segregation in the Falicov-Kimball Model*, Commun. Math. Phys. **227**, 243-279 (2002).
- [Gb 02] P.S. Goldbaum, *A Lower Bound for the Segregation Energy in the Falicov-Kimball Model*, Physica A **36**, 2227-34 (2003). Bemerkung: Hier wurde der Koeffizient des Randterms $\alpha_1(n)$ für $d = 2$ und $n := N/|\Lambda| = 1/2$ (entspricht dem Fall der vierteln Füllung) explizit ausgerechnet, nämlich: $E_{N,\Omega} \geq e_{\mathbb{Z}^2}(n = 1/2)|\Omega| + 10^{-13}|\partial\Omega|$.
- [Lemb 92] P. Lemberger, *Segregation in the Falicov-Kimball model*, J. Phys. A **25**, 715-733 (1992) (siehe [GM 96] für einen Überblick über *rigorous results* für das Falicov-Kimball-Modell).
- [KL 86] T. Kennedy, E. H. Lieb, *An Itinerant Electron Model with Crystalline or Magnetic Long Range Order*, Physica A **138**, 320 (1986); E. Lieb, *A Model for Crystallization: A Variation on the Hubbard Model*, Physica A, **140**, 240, (1986) (siehe [GM 96] für einen Überblick über *rigorous results* für das Falicov-Kimball-Modell).
- [GM 96] Ch. Gruber and N. Macris, *The Falicov-Kimball Model: A review of exact results and extensions*, Helv. Phus. Acta, Vol. 69 (1996).
- [BFS 98] V. Bach, J. Fröhlich, I. M. Sigal, *Renormalization Group Analysis of Spectral Problems in Quantum Field Theory*, Adv. in Math., **137**, 205-298 (1998).
- [Bathia 97] R. Bathia, *Matrix Analysis*, Grad. Texts in Math. 169, Springer-Verlag, New York (1997).
- [BP2 97] V. Bach and J. Poelchau., *Accuracy of the Hartree-Fock approximation for the Hubbard model*. J. Math. Phys., 38(4):2072–2083, (1997).
- [Poelchau 95] J. Poelchau, *Eine analytische Fehlerabschätzung der Hartree-Fock Näherung für die Grundzustandsenergie des Hubbardmodells* Diploma Thesis at the Technische Universität Berlin (1995) (unpublished).

- [Bach 92] V. Bach, *Error bound for the Hartree-Fock energy of atoms and molecules*, Commun. Math. Phys., **147**:527-548, (1992).
- [Bach 93] V. Bach, *Accuracy of mean field approximations for atoms and molecules*, Commun. Math. Phys., **155**:295-310, (1993).
- [Lieb 81] E. H. Lieb, *Variational principle for many-fermion systems*, Phys. Rev. Lett., **46**:457-459, (1981).
- [S 79] B. Simon, *Functional Integration and Quantum Physics*, Academic Press, (1979).
- [LS 01] E. Lieb, M. Loss, *Analysis, Graduate Studies in Mathematics 14*, American Mathematical Society, (2001).
- [FU 04] J. Fröhlich, D. Ueltschi, *Hund's rule and metallic ferromagnetism*, cond-mat/0404483, (2004).