

Optische Anregungen in eindimensionalen Peierls-Hubbard-Modellen

Dissertation

zur Erlangung des
Doktorgrades der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)
dem Fachbereich Physik
der Philipps-Universität Marburg
vorgelegt von

Anja Grage
aus Heidelberg

Marburg an der Lahn, September 2004

Vom Fachbereich Physik der Philipps-Universität Marburg
als Dissertation angenommen am: 22.10.2004

Erstgutachter: Prof. Dr. F. Gebhard
Zweitgutachter: Prof. Dr. P. Thomas

Tag der mündlichen Prüfung: 29.10.2004

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Erweitertes Peierls-Hubbard-Modell	11
2.1	Hamilton-Operator	11
2.2	Symmetrien bei halber Bandfüllung	12
2.3	Physikalische Größen und Begriffe	13
2.3.1	Isolatoren	13
2.3.2	Anregungslücken	14
3	Limites	17
3.1	Peierls-Modell	17
3.2	Hubbard-Modell	20
3.3	Erweitertes Hubbard-Modell	21
3.3.1	Limes schwacher Wechselwirkung	21
3.3.2	Limes starker Kopplung	22
3.4	Erweitertes Peierls-Hubbard-Modell	24
3.4.1	Bisherige Ergebnisse	24
3.4.2	Aufgabenstellung	24
4	Feldtheorie	25
4.1	Ableitung des feldtheoretischen Modells	25
4.1.1	Linearisierung	25
4.1.2	Bosonisierung	27
4.1.3	Sine-Gordon-Modell	31
4.2	Semiklassische Untersuchung des effektiven feldtheoretischen Modells	32
4.2.1	Mott-Hubbard-Regime	33
4.2.2	Ladungsdichtewelle-Regime	37
4.2.3	Ordnungsparameter im Ladungsdichtewelle-Regime	40
4.3	Renormierungsgruppengleichungen	43
4.3.1	Hamilton-Dichte im RG-Zugang	43
4.3.2	Operator-Produkt-Entwicklung	45
4.3.3	Renormierungsgruppenzugang	49
4.3.4	RG-Gleichungen des Mean-Field-Ansatzes	51
4.3.5	RG-Gleichungen des erweiterten Peierls-Hubbard-Modells	54
4.3.6	Zusammenfassung	55

5	Störungstheorie in der Coulomb-Wechselwirkung	57
5.1	Störungstheoretische Ansätze	57
5.1.1	Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie	58
5.1.2	Wannier-Störungstheorie für optische Anregungen	60
5.1.3	Two-Step-Störungstheorie für optische Anregungen	61
5.1.4	Downfolding-Störungstheorie für optische Anregungen	63
5.2	Grundzustandsenergie	65
5.2.1	Beitrag führender Ordnung	66
5.2.2	Beiträge erster Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung	66
5.2.3	Beiträge zweiter Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung	66
5.3	Einteilchenlücke	69
5.3.1	Beitrag führender Ordnung	69
5.3.2	Beiträge erster Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung	69
5.3.3	Beiträge zweiter Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung	70
5.4	Matrixelemente der optischen Anregungen	72
5.4.1	Matrixelement in führender Ordnung	73
5.4.2	Matrixelemente erster Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung	73
5.4.3	Matrixelemente zweiter Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung	74
5.5	Optische Anregungen	79
5.5.1	Wannier-Störungstheorie	79
5.5.2	Two-Step-Störungstheorie	80
5.5.3	Downfolding-Störungstheorie	80
6	Ergebnisse	81
6.1	Grundzustandsenergie: Vergleich mit DMRG	81
6.1.1	Finite-Size-Effekte	81
6.1.2	Diskussion	82
6.2	Einteilchenlücke: Vergleich mit DMRG	84
6.2.1	Finite-Size-Effekte	84
6.2.2	Diskussion	85
6.3	Optische Anregungen: Vergleich mit DMRG	87
6.3.1	Ladungslücke (Singulett-Exzitonen)	87
6.3.2	Spinlücke (Triplett-Exzitonen)	90
6.3.3	Zusammenhang mit dem Experiment	93
7	Zusammenfassung und Ausblick	97
	Anhang	98
A	Linearisierung und Bosonisierung	99
A.1	Kinetische Energie	99
A.2	Bosonisierung von Dichteoperatoren	101

B	Hilfsfunktionen und nützliche Kontraktionen	103
C	Matrixelemente	107
C.1	Matrixelemente des Grundzustandes	107
C.1.1	Matrixelemente der lokalen Coulomb-Wechselwirkung	107
C.1.2	Matrixelemente der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung . .	107
C.2	Matrixelemente der Einteilchenlücke	109
C.2.1	Matrixelemente der lokalen Coulomb-Wechselwirkung	109
C.2.2	Matrixelemente der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung . .	110
C.3	Matrixelemente der optischen Anregungen	112
C.3.1	Matrixelemente der lokalen Coulomb-Wechselwirkung	112
C.3.2	Matrixelemente der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung . .	113

Abbildungsverzeichnis

3.1	Dispersion der Peierls-Bänder in der vollen bzw. halben Brillouin-Zone . . .	18
3.2	Optische Leitfähigkeit im Peierls-Modell	20
3.3	Optische Leitfähigkeit im erweiterten Hubbard-Modell im Limes starker Kopplung	23
4.1	Dispersionsrelation und Linearisierung an den Fermipunkten	26
4.2	Auftretende Streuprozesse in der g -ology	28
5.1	Null-Teilchen-Loch-Anregung und Ein-Teilchen-Loch-Anregung	59
5.2	Zwei-Teilchen-Loch-Anregung mit entgegengesetzten und parallelen Spins	59
5.3	Drei-Teilchen-Loch-Anregung mit entgegengesetzten und parallelen Spins	60
5.4	Ein-Teilchen-Loch-Anregung mit der niedrigstmöglichen Energie	73
6.1	Finite-Size-Abhängigkeit der Energiedichte des Grundzustandes	82
6.2	Abhängigkeit der Energiedichte des Grundzustands von V bei festem $U = 2V$	83
6.3	Abhängigkeit der Energiedichte des Grundzustands von U für festes $V = t$	83
6.4	Abhängigkeit der Energiedichte des Grundzustands von U für festes $V = 2t$	84
6.5	Finite-Size-Abhängigkeit der Einteilchenlücke	85
6.6	Abhängigkeit der Einteilchenlücke von V für festes $U = 2V$	86
6.7	Abhängigkeit der Einteilchenlücke von U für festes $V = t$	87
6.8	Finite-Size-Abhängigkeit der Ladungslücke	88
6.9	Abhängigkeit der Ladungslücke von V für festes $U = 2V$	89
6.10	Abhängigkeit der Ladungslücke von U für festes $V = t$	90
6.11	Finite-Size-Abhängigkeit der Spinlücke	91
6.12	Abhängigkeit der Spinlücke von V für festes $U = 2V$	92
6.13	Abhängigkeit der Spinlücke von U für festes $V = t$	92
6.14	Abhängigkeit der Ladungs- und Spinlücke von U für festes $V = t$ und $\delta = 0.1$	95
6.15	Bindungsenergien der Exzitonen der Wannier-Störungstheorie zweiter Ord- nung in Abhängigkeit von U für festes $V = t$ und $\delta = 0.1$	95

1 Einleitung

Motivation

Im Rahmen dieser Arbeit werden die optischen Anregungen in eindimensionalen erweiterten Peierls-Hubbard-Modellen untersucht. Diese Modelle beschreiben quasi-eindimensionale Materialien mit alternierenden Bindungslängen, wie sie beispielsweise im π -konjugierten Polymer Polyacetylen zu finden sind. Ein π -konjugiertes Polymer ist ein polymerer Halbleiter mit speziellen elektrooptischen Eigenschaften, die technisch zum Beispiel in Leuchtdioden genutzt werden. Im Gegensatz zu anorganischen Halbleitern, wie zum Beispiel GaAs, ist die Bindungsenergie der optischen Elementaranregungen (Exzitonen) in Polymeren von derselben Größenordnung wie die Anregungsenergie getrennter Elektron-Loch-Paare. Dies deutet auf einen wesentlichen Einfluß der Coulomb-Wechselwirkung hin: die quasi-eindimensionalen Polymere sind stark korreliert [1].

Das eindimensionale erweiterte Peierls-Hubbard-Modell ist das konzeptionell einfachste Gittermodell zur Beschreibung dieser Materialien [1, 2]. Ihre elektronischen Eigenschaften werden durch zwei konkurrierende Prozesse bestimmt. Dies ist zum einen die kinetische Energie, die zur Delokalisierung der Elektronen führt, und zum anderen die (lokale und langreichweitige) Coulomb-Wechselwirkung, welche die Abstoßung zweier Elektronen in Abhängigkeit vom Abstand beschreibt. Zusätzlich wird die statische Gitterverzerrung berücksichtigt. Dieses Modell stellt eine Näherung zum exakten Vielteilchenproblem dar, die im Gegensatz zu semiempirischen Methoden [3] systematisch verbessert werden kann [4].

Es stellt sich die Frage, wie das erweiterte Peierls-Hubbard-Modell theoretisch untersucht werden kann. Zum einen bieten sich numerische Verfahren an. An erster Stelle ist hier die Dichtematrix-Renormierungsgruppe (DMRG) [5, 6] zu nennen, mit der man die Eigenschaften des Grundzustands und elementarer Anregungen numerisch exakt berechnen kann. Ein Problem hierbei ist der Aufwand an Rechenzeit, da derartige Rechnungen für realistische Systemparameter einen CPU-Tag oder länger dauern können.

Wie kann das erweiterte Peierls-Hubbard-Modell analytisch behandelt werden? Die Antwort ist nicht offensichtlich, denn es gibt zwei konkurrierende Terme im Modell, von denen jeder für sich das isolierende Verhalten begründen kann und die zu einer völlig unterschiedlichen Beschreibung der elementaren Anregungen führen. Der Peierls-Mechanismus resultiert im üblichen Bänderbild eines Halbleiters mit fermionischen Einteilchenanregungen [7]. Die Coulomb-Wechselwirkung im Hubbard-Modell hingegen führt zu einem Mott-Hubbard-Isolator mit kollektiven Spin- und Ladungsanregungen (Spinonen und Holonen), von denen letztere eine Anregungslücke aufweisen. Entsprechend unterscheiden sich die Beschreibungen der optischen Anregungen. Die Gegensätzlichkeit von Peierls- und Hubbard-Modell wirft also die grundsätzliche Frage auf, ob der Peierls-Limes oder der Mott-

Hubbard-Limes des erweiterten Peierls-Hubbard-Modells der geeignete Startpunkt für eine störungstheoretische Behandlung sei. Wie in der vorliegenden Arbeit im Rahmen der Feldtheorie gezeigt wird, ist der Peierls-Limes der geeignete Ausgangspunkt, das heißt die Coulomb-Wechselwirkung darf im Prinzip störungstheoretisch behandelt werden.

In Poly(di)acetylen sind die optischen Singulett-Exzitonen mit 0.5 eV gebunden, ihre Anregungsenergie liegt um diesen Wert unterhalb der Lücke für stromtragende Anregungen von 2.3 eV [8]. Die Coulomb-Wechselwirkung liefert also keine kleinen Korrekturen. Sie kann nicht in Störungstheorie erster Ordnung behandelt werden, wie Vergleiche zwischen den Resultaten von Abe et al. [2] und DMRG-Rechnungen [9] für realistische Modellparameter zeigen. Es bleibt zu klären, inwieweit die Störungstheorie zweiter Ordnung eine Verbesserung bringt. Ziel ist es, eine Abschätzung für die Genauigkeit der Störungstheorie für reale Parametersätze des erweiterten Peierls-Hubbard-Modells zu gewinnen. Numerisch ist die zweite Ordnung Störungstheorie mit sehr viel weniger Aufwand verbunden als eine DMRG-Rechnung und kann dazu dienen, einen schnellen Überblick über die Auswirkungen von Veränderungen in den Modellparametern zu erhalten.

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, die Störungstheorie zweiter Ordnung für optische Anregungen zu formulieren. Daher stellt sich die Frage, welche Version die quantitativ beste Übereinstimmung mit der DMRG liefert: ist es Wannier-Störungstheorie, Two-Step-Störungstheorie oder Downfolding-Störungstheorie? Dies ist eine relevante Frage, da Varianten dieser Zugänge zur Beschreibung der optischen Anregungen in realen Materialien eingesetzt werden. Zum Beispiel ist der LDA+GW+BSE-Zugang [10] konzeptionell sehr ähnlich zur Two-Step-Störungstheorie.

Aufbau der Arbeit

Aus dieser Motivation heraus ergibt sich der folgende Aufbau der Arbeit. Im zweiten Kapitel wird der Hamilton-Operator des erweiterten Peierls-Hubbard-Modells und seine wichtigsten Eigenschaften vorgestellt. Zudem werden die physikalischen Größen eingeführt, die im Laufe der Arbeit eine wesentliche Rolle spielen.

Im dritten Kapitel sind Ergebnisse der bisherigen analytischen Untersuchungen in den verschiedenen Grenzfällen des Modells zusammengestellt. Die Limites zeigen, daß das Peierls-Modell und das erweiterte Hubbard-Modell qualitativ verschiedene Arten von Isolatoren beschreiben.

Der Nachweis, daß der Peierls-Term die Physik des erweiterten Peierls-Hubbard-Modells dominiert, wird im vierten Kapitel erbracht. Im Rahmen der Feldtheorie wird ein semiklassischer Zugang verwendet und eine Mean-Field-Analyse durchgeführt. Außerdem werden die Renormierungsgruppengleichungen aufgestellt und numerisch aufintegriert.

Im fünften Kapitel werden die verschiedenen perturbativen Zugänge für die Beschreibung optischer Anregungen zur zweiten Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung eingeführt. Zudem sind die expliziten Ausdrücke der erforderlichen Matrixelemente für die Grundzustandsenergie, die Einteilchenlücke und die optischen Anregungen zusammengestellt.

Im sechsten Kapitel werden die Ergebnisse der verschiedenen störungstheoretischen Ansätze präsentiert und mit den numerisch exakten Resultaten der Dichtematrix-Renormierungsgruppe verglichen. Die Arbeit schließt mit Zusammenfassung und Ausblick.

Im Anhang sind sowohl detaillierte Rechnungen zur Bosonisierung als auch zur perturbativen Berechnung der Matrixelemente und die wichtigsten Hilfsfunktionen zusammengestellt.

2 Erweitertes Peierls-Hubbard-Modell

Das generische Modell zur Beschreibung quasi-eindimensionaler Materialien, zum Beispiel von π -konjugierten Polymeren, ist das eindimensionale erweiterte Peierls-Hubbard-Modell, welches im ersten Abschnitt dieses Kapitels vorgestellt wird. Im zweiten Abschnitt werden die Symmetrien dieses Modells untersucht. In einem dritten Abschnitt werden die in dieser Arbeit auftretenden physikalischen Größen und Begriffe eingeführt und erläutert.

2.1 Hamilton-Operator

Eine geeignete Beschreibung der Physik quasi-eindimensionaler Materialien wie Polyacetylen liefert das halbgefüllte erweiterte Peierls-Hubbard-Modell [2]. In diesem Modell steht die kinetische Energie \hat{T} der Elektronen in Konkurrenz zu der rein lokalen Coulomb-Wechselwirkung $U\hat{D}$, der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung $V\hat{V}$ und der Peierls-Dimerisierung \hat{T}_δ . Der zugehörige Hamilton-Operator ist also gegeben durch

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{T}_\delta + U\hat{D} + V\hat{V}. \quad (2.1)$$

Die durch den Peierls-Term erweiterte kinetische Energie lautet

$$\hat{T} + \hat{T}_\delta = -t \sum_{\sigma} \sum_{l=1}^L \left(1 + (-1)^l \delta \right) \left(\hat{c}_{l,\sigma}^+ \hat{c}_{l+1,\sigma} + \hat{c}_{l+1,\sigma}^+ \hat{c}_{l,\sigma} \right), \quad (2.2)$$

wobei L die Anzahl der Gitterplätze und $\ell = La_0$ die Länge der Kette ist. Dieser Term beschreibt das Hüpfen der Elektronen von einem Gitterplatz l zum Nachbarplatz $l+1$ mit der Hüpfamplitude $-t(1 + (-1)^l \delta)$, wobei t als Energieeinheit dient und $t \equiv 1$ gesetzt wird. Es gelten periodische Randbedingungen, $\hat{c}_{l+L,\sigma} \equiv \hat{c}_{l,\sigma}$. Dabei erzeugt (vernichtet) der Operator $\hat{c}_{l,\sigma}^+$ ($\hat{c}_{l,\sigma}$) ein Elektron mit Spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ im Wannier-Orbital, dessen Zentrum sich am Ort l befindet. Es gelten die Antikommutationsrelationen für fermionische Operatoren,

$$\{\hat{c}_{l,\sigma}, \hat{c}_{m,\tau}^+\}_+ = \delta_{l,m} \delta_{\sigma,\tau}, \quad (2.3)$$

alle anderen Antikommutatoren verschwinden. Die Dimerisierung $0 \leq \delta \leq 1$ beschreibt den Effekt der alternierenden Bindungslängen der Elektron-Hüpfamplituden, welcher von der Instabilität des Gitters gegenüber der statischen Peierls-Verzerrung herrührt. Dieser Effekt verursacht eine Verdoppelung der Einheitszelle und damit eine Halbierung der Brillouin-Zone. Hüpfsterme zu weiter entfernten Nachbarn werden in diesem Modell nicht einbezogen. Der Operator für Doppelbesetzungen ist

$$\hat{D} = \sum_{l=1}^L \left(\hat{n}_{l,\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{l,\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \quad (2.4)$$

mit $\hat{n}_{l,\sigma} = \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma}$ und $\hat{n}_l = \hat{n}_{l,\uparrow} + \hat{n}_{l,\downarrow}$. Der Operator

$$\hat{V} = \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} \frac{1}{2|r|} (\hat{n}_l - 1) (\hat{n}_{l+r} - 1) \quad (2.5)$$

approximiert die langreichweitigen Anteile der Coulomb-Wechselwirkung, und der Operator für die Gesamtteilchenzahl ist durch

$$\hat{N} = \sum_{l=1}^L \hat{n}_l \quad (2.6)$$

gegeben. Im folgenden wird nur der Fall halber Bandfüllung betrachtet, bei dem die Anzahl der Elektronen gleich der Anzahl der Gitterplätze ist, $N = L$.

2.2 Symmetrien bei halber Bandfüllung

In diesem Abschnitt werden die Symmetrien des Modells (2.1) untersucht [4]. Bei halber Bandfüllung ist es invariant unter Spin- und Ladungsrotation ($SO(4)$ -Symmetrie) und unter speziellen Teilchen-Loch-Transformationen.

Invarianz unter Spinrotation: Rotationen im Spinsektor

$$\begin{aligned} \tau_{\text{spin}} : \quad \hat{c}_{l,\sigma} &\mapsto \hat{c}_{l,-\sigma} \\ \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger &\mapsto \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \end{aligned} \quad (2.7)$$

lassen den Hamilton-Operator (2.1) invariant, $\hat{\tau}_{\text{spin}}^\dagger \hat{H} \hat{\tau}_{\text{spin}} = \hat{H}$. Die zugehörige $SU(2)$ -Lie-Algebra wird generiert von den Operatoren für den Gesamtspin

$$\begin{aligned} \hat{S}^+ &= \sum_{l=1}^L \hat{c}_{l,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{l,\downarrow}, \\ \hat{S}^- &= \sum_{l=1}^L \hat{c}_{l,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{l,\uparrow}, \\ \hat{S}^z &= \frac{1}{2} \sum_{l=1}^L (\hat{n}_{l,\uparrow} - \hat{n}_{l,\downarrow}) \end{aligned} \quad (2.8)$$

mit $\hat{S}^+ = \hat{S}^x + i\hat{S}^y = (\hat{S}^-)^\dagger$.

Invarianz unter Ladungsrotation (η -pairing): Der Hamilton-Operator ist invariant unter der Abbildung eines doppeltbesetzten auf einen unbesetzten Gitterplatz und umgekehrt,

$$\begin{aligned} \tau_{\text{charge}} : \quad \hat{c}_{l,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{l,\downarrow}^\dagger &\mapsto \hat{c}_{l,\uparrow} \hat{c}_{l,\downarrow} \\ \hat{c}_{l,\uparrow} \hat{c}_{l,\downarrow} &\mapsto \hat{c}_{l,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{l,\downarrow}^\dagger. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Diese Abbildung verbindet Unterräume des Hilbertraums mit unterschiedlichen Teilchenzahlen. Die Operatoren

$$\begin{aligned}\hat{C}^+ &= \sum_{l=1}^L \hat{c}_{l,\uparrow}^+ \hat{c}_{l,\downarrow}^+, \\ \hat{C}^- &= \sum_{l=1}^L \hat{c}_{l,\downarrow} \hat{c}_{l,\uparrow}, \\ \hat{C}^z &= \frac{1}{2} \sum_{l=1}^L (\hat{n}_{l,\uparrow} + \hat{n}_{l,\downarrow} - 1)\end{aligned}\quad (2.10)$$

mit $\hat{C}^+ = \hat{C}^x + i\hat{C}^y = (\hat{C}^-)^+$ erzeugen die zugehörige $SU(2)$ -Lie-Algebra und kommutieren mit dem Hamilton-Operator und mit den Spinoperatoren (2.8).

Aus der Spinrotations- und der Ladungsrotationsinvarianz folgt die $SO(4)$ -Symmetrie von (2.1).

Spezielle Teilchen-Loch-Symmetrie: Die Teilchen-Loch-Transformation

$$\begin{aligned}\tau_{\text{TLS}} : \quad \hat{c}_{l,\sigma} &\mapsto (-1)^l \hat{c}_{l,\sigma}^+ \\ \hat{c}_{l,\sigma}^+ &\mapsto (-1)^l \hat{c}_{l,\sigma}\end{aligned}\quad (2.11)$$

generiert eine Abbildung des Hamilton-Operators (2.1) auf sich selbst.

Aufgrund dieser Symmetrieeigenschaft garantiert das chemische Potential $\mu = 0$ halbe Bandfüllung für alle Temperaturen [4].

2.3 Physikalische Größen und Begriffe

In diesem Abschnitt werden die für die Untersuchung des eindimensionalen erweiterten Peierls-Hubbard-Modells relevanten Begriffe eingeführt und erläutert.

2.3.1 Isolatoren

Bei halber Bandfüllung beschreibt das Modell einen Isolator für $\delta \neq 0$ oder $U \neq 0$. Ein System wird als Isolator bezeichnet, wenn seine Gleichstromleitfähigkeit ('direct current': DC) bei der Temperatur $T = 0$ verschwindet [4],

$$\sigma_{\alpha\beta}^{DC}(T = 0) = \lim_{T \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} \text{Re}\{\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega)\} = 0. \quad (2.12)$$

Diese Definition gilt nur bei $T = 0$, da thermische Anregungen bei endlicher Temperatur stets für eine endliche Leitfähigkeit sorgen. Die Berechnung von $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega)$ als Propagator einer Zwei-Teilchen-Anregung stellt jedoch ein nichttriviales Problem dar, so daß man sich

einer leichter handhabbaren Größe zuwendet, der Lücke für stromtragende Einteilchenanregungen. In perfekt geordneten Systemen ist diese *Einteilchenlücke* über die chemischen Potentiale $\mu^-(N)$ und $\mu^+(N)$ definiert,

$$\begin{aligned}\Delta_1(N) &\equiv \mu^+(N) - \mu^-(N) \\ &= [E_0(N+1) - E_0(N)] - [E_0(N) - E_0(N-1)].\end{aligned}\quad (2.13)$$

Dabei entspricht das chemische Potential μ^- (μ^+) der minimalen Energie, die benötigt wird, um ein Elektron zum Grundzustand eines Systems mit $N-1$ (N) Elektronen hinzuzufügen. Da das in dieser Arbeit untersuchte System Teilchen-Loch-Symmetrie aufweist, gilt $E_0(N-1) = E_0(N+1)$, und zur Bestimmung der Einteilchenlücke genügt es also, $E_0(N+1)$ zu berechnen. Eine stromtragende Einteilchenanregung kann es nur für eine verschwindende Einteilchenlücke geben. Für einen Isolator gilt also

$$\Delta_1 > 0 \quad (\text{'gap criterion'}). \quad (2.14)$$

Grundsätzlich gibt es bei Temperatur Null zwei verschiedene Klassen von Isolatoren. Zum einen gibt es Isolatoren, die von der Elektron-Ion-Wechselwirkung getrieben werden, und zum anderen solche, deren Ursache die Elektron-Elektron-Wechselwirkung ist. Der *Peierls-Isolator* gehört zur ersten Isolatorenklasse. Die Elektron-Ion-Wechselwirkung ruft eine statische Gitterverzerrung hervor, so daß ein neues Potential mit einer veränderten Periodizität entsteht. Bei niedrigen Temperaturen kann der Gewinn in der kinetischen Energie der Elektronen die elastische Energie, die die Gitterverzerrung kostet, übertreffen. Die Berücksichtigung dieses Effekts durch die Dimerisierung führt zu einer endlichen Einteilchenlücke.

Der *Mott-Hubbard-Isolator* und der *Ladungsdichtewellen-Isolator*, meistens *charge-density-wave-Isolator* oder kurz *CDW-Isolator* genannt, sind von der Elektron-Elektron-Wechselwirkung getrieben und gehören damit zur zweiten Klasse von Isolatoren. Im Mott-Hubbard-Isolator verhindert die Coulomb-Abstoßung die Bewegung der Elektronen auf dem Gitter. Im Falle von Halbfüllung führt dies zu einer Lücke für Ladungsanregungen, während Spinanregungen keine Lücke haben. Im CDW-Isolator hingegen führt die Coulomb-Abstoßung zur Ausbildung einer Ladungsdichtewelle auf dem Gitter. In diesem Fall gibt es endliche Lücken im Spin- und Ladungssektor.

2.3.2 Anregungslücken

Offensichtlich ist es erforderlich, verschiedene Anregungslücken für feste Teilchenzahl zu definieren. Die *Ladungslücke* ist definiert als der Energieunterschied zwischen Grundzustand (hier ein Singulett) und dem ersten angeregten Zustand mit demselben Spin $S=0$,

$$\Delta_c \equiv E_1(N, S=0) - E_0(N, S=0). \quad (2.15)$$

Die *Spinlücke* ist durch den Energieunterschied zwischen dem Grundzustand (hier ein Singulett) und dem ersten angeregten Zustand mit Spinflip (hier ein Triplett) definiert

$$\Delta_s \equiv E_0(N, S=1) - E_0(N, S=0). \quad (2.16)$$

Optische Anregungen des Systems $|n_{\text{opt}}\rangle$ sind Elektron-Loch-Anregungen des Grundzustandes $|0\rangle$, die durch ein Lichtfeld erzeugt werden können. Optisch erlaubte Anregungen haben daher ein endliches Matrixelement $\langle n_{\text{opt}}|\hat{j}_{\text{opt}}|0\rangle \neq 0$ mit dem Stromoperator \hat{j}_{opt} . Die *optische Lücke* ist die Energiedifferenz zwischen dem Grundzustand und dem energetisch niedrigsten optisch erlaubten, angeregten Zustand. Elektron-Loch-Anregungen mit Energien oberhalb der Einteilchenlücke befinden sich im sogenannten *Elektron-Loch-Kontinuum* und sind ungebunden. Optisch angeregte Elektron-Loch-Paare mit Energien unterhalb der Einteilchenlücke sind gebunden und werden als *Exzitonen* bezeichnet. Ihre Anregungsenergie ist

$$\Delta_x = E_{1,\text{opt}}(N) - E_0(N). \quad (2.17)$$

Man unterscheidet zwischen stark und schwach gebundenen Exzitonen. Um diese zu charakterisieren, definiert man die Bindungsenergie als den Energieunterschied zwischen Einteilchenlücke und Exzitonenergie

$$E_{\text{Bind}} = \Delta_1 - \Delta_x > 0. \quad (2.18)$$

Schwach gebundene Exzitonen werden als *Wannier-Mott-Exzitonen* bezeichnet. Sie sind typisch für Bandisolatoren [11]. Im Limes schwacher Coulomb-Korrelationen darf man sich ein Wannier-Mott-Exziton vorstellen als ein Loch im Leitungsband und ein Elektron im Valenzband, die durch die attraktive Coulomb-Wechselwirkung zu einer ladungsneutralen Anregung gebunden sind. In Halbleitern wie GaAs beträgt die Bindungsenergie einige meV, bei einer Bandlücke der Größenordnung 1 eV. Folglich liegt die Größe eines Wannier-Mott-Exzitons bei ungefähr 100 Å und damit fast zwei Größenordnungen über der Gitterkonstante.

In quasi-eindimensionalen Materialien wie konjugierten Polymeren findet man hingegen *Mott-Hubbard-Exzitonen* mit deutlich höheren Bindungsenergien. In diesen Stoffen beeinflusst die Elektron-Elektron-Wechselwirkung die Entstehung der optischen Lücke und die Bildung der Exzitonen stark [1]. Man findet Bindungsenergien bei ungefähr 0.5 eV bei Polydiacetylen [8], die mit der optischen Lücke vergleichbar sind. Ihre Ausdehnung liegt im Bereich von 12 Å [8]. Einfache Bandstrukturkonzepte sind für eine angemessene Beschreibung dieser Exzitonen nicht hinreichend. Das erweiterte Peierls-Hubbard-Modell berücksichtigt sowohl die Elektron-Ion- als auch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung und sollte damit eine gute theoretische Beschreibung der konjugierten Polymere und ihrer optischen Anregungen liefern.

Der Grundzustand des erweiterten Peierls-Hubbard-Modells ist ein Singulettzustand ($S = 0$), daher ist eine optische Anregung in einen Triplettzustand ($S = 1$) spinverboten. In dem hier untersuchten Fall wird insbesondere der erste angeregte Singulettzustand betrachtet, von dem aus optische Übergänge in den Grundzustand möglich sind. Übergänge in den energetisch tiefer liegenden Triplettzustand sind zwar spinverboten, kommen aber trotzdem gelegentlich vor (*Intersystem Crossing*). Dieser Triplettzustand ist sehr langlebig, weil ein optischer Übergang zum Grundzustand wieder spinverboten ist und zum Beispiel nur aufgrund der Spin-Bahn-Wechselwirkung möglich ist. Liegt die Singulett- oder

Triplettlücke unterhalb der Einteilchenlücke, so haben die zugehörigen Anregungen exzitonischen Charakter. Die exzitonischen Anregungen liefern eine obere Schranke für die Ladungslücke bzw. die Spinlücke.

Die Berechnung der verschiedenen Anregungslücken im erweiterten Peierls-Hubbard-Modell ist nicht einfach. Im folgenden Kapitel werden Resultate für Grenzfälle zusammengestellt, die bereits untersucht worden sind.

3 Limites

In diesem Kapitel werden die verschiedenen Limites vorgestellt, in denen das halbgefüllte erweiterte Peierls-Hubbard-Modell bislang behandelt wurde.

3.1 Peierls-Modell

Ohne Coulomb-Wechselwirkung, $U = V = 0$, reduziert sich das erweiterte Peierls-Hubbard-Modell zum Peierls-Modell, $\hat{H}^P = \hat{T} + \hat{T}_\delta$ [12]. Das Modell kann durch Fouriertransformation und Halbierung der Brillouin-Zone exakt gelöst werden. Die Fouriertransformation der Elektronenoperatoren ist gegeben durch

$$\begin{aligned}\hat{c}_{l,\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikla_0} \left(\hat{c}_{k,\sigma} + (-1)^l \hat{c}_{k+\pi/a_0,\sigma} \right), \\ \hat{c}_{k,\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l=1}^L e^{-ikla_0} \hat{c}_{l,\sigma},\end{aligned}\tag{3.1}$$

wobei eine k -Summe stets die Summe über alle Impulse $-\pi/(2a_0) \leq k_j < \pi/(2a_0)$ mit $k_j = -\pi/(2a_0) + 2\pi j/(La_0)$ für $j = 0, \dots, L/2 - 1$ bezeichnet. Der kinetische Term ergibt sich zu

$$\hat{T} = \sum_{k,\sigma} \varepsilon(k) \left(\hat{c}_{k,\sigma}^+ \hat{c}_{k,\sigma} - \hat{c}_{k+\pi/a_0,\sigma}^+ \hat{c}_{k+\pi/a_0,\sigma} \right),\tag{3.2}$$

$$\hat{T}_\delta = -i \sum_{k,\sigma} \Delta(k) \left(\hat{c}_{k+\pi/a_0,\sigma}^+ \hat{c}_{k,\sigma} - \hat{c}_{k,\sigma}^+ \hat{c}_{k+\pi/a_0,\sigma} \right),\tag{3.3}$$

wobei die Dispersionsrelation $\varepsilon(k)$ und die Hybridisierungsfunktion $\Delta(k)$ durch

$$\begin{aligned}\varepsilon(k) &= -2t \cos(ka_0), \\ \Delta(k) &= 2t\delta \sin(ka_0)\end{aligned}\tag{3.4}$$

gegeben sind. Zur Diagonalisierung der kinetischen Energie führt man in der halben Brillouin-Zone $-\pi/(2a_0) \leq k < \pi/2a_0$ neue Quasiteilchenoperatoren $\hat{a}_{k,\sigma}$ und $\hat{b}_{k,\sigma}$ mittels einer kanonischen Transformation ein:

$$\begin{aligned}\hat{a}_{k,\sigma} &\equiv \alpha_k \hat{c}_{k,\sigma} + i\beta_k \hat{c}_{k+\pi/a_0,\sigma}, \\ \hat{b}_{k,\sigma} &\equiv \beta_k \hat{c}_{k,\sigma} - i\alpha_k \hat{c}_{k+\pi/a_0,\sigma}.\end{aligned}\tag{3.5}$$

Umgekehrt gilt

$$\begin{aligned}\hat{c}_{k,\sigma} &\equiv \alpha_k \hat{a}_{k,\sigma} + \beta_k \hat{b}_{k,\sigma}, \\ \hat{c}_{k+\pi/a_0,\sigma} &\equiv -i\beta_k \hat{a}_{k,\sigma} + i\alpha_k \hat{b}_{k,\sigma},\end{aligned}\quad (3.6)$$

wobei $\alpha_k^2 + \beta_k^2 = 1$ gefordert wird. Zusammen mit der zusätzlichen Bedingung, daß nicht-diagonale Terme der kinetischen Energie verschwinden, ergibt sich für α_k und β_k

$$\begin{aligned}\alpha_k &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon(k)}{E(k)} \right)}, \\ \beta_k &= \text{sgn}(\Delta(k)) \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon(k)}{E(k)} \right)}\end{aligned}\quad (3.7)$$

mit der Signum-Funktion $\text{sgn}(x \neq 0) \equiv x/|x|$ und $\alpha_{k+\pi/a_0} = -i\beta_k$ bzw. $\beta_{k+\pi/a_0} = i\alpha_k$. Ausgedrückt anhand dieser Quasiteilchenoperatoren ist die kinetische Energie des Hamilton-Operators (2.1) diagonal,

$$\hat{T} + \hat{T}_\delta = \sum_k E(k) \left(\hat{b}_{k,\sigma}^+ \hat{b}_{k,\sigma} - \hat{a}_{k,\sigma}^+ \hat{a}_{k,\sigma} \right), \quad (3.8)$$

wobei $\pm E(k)$ die Dispersionsrelation für das obere und untere Peierls-Band bezeichnet,

$$E(k) = \sqrt{\epsilon(k)^2 + \Delta(k)^2}. \quad (3.9)$$

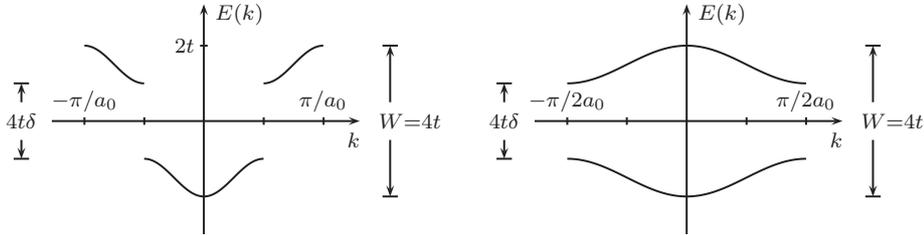


Abbildung 3.1 Dispersion der Peierls-Bänder in der reduzierten Brillouin-Zone mit der Bandbreite $W = 4t$.

Die Dispersion beider Bänder mit der gesamten Bandbreite $W = 4t$ in der vollen bzw. halben Brillouin-Zone ist in Abbildung (3.1) dargestellt. Die Peierls-Lücke zwischen den Bändern ist $\Delta^P = \delta W = 4t\delta$.

Im Grundzustand des halbgefüllten Modells ist das untere Peierls-Band vollständig gefüllt, und die Grundzustandsenergie $E_0(N)$ ist gegeben durch

$$E_0(N) = -2 \sum_k E(k). \quad (3.10)$$

Sie hängt von der Länge L des Systems und der Dimerisierung δ ab. Um die Einteilchenlücke zu erhalten, berechnet man die Grundzustandsenergie für das System mit einem zusätzlichen Teilchen. Da im Falle von Halbfüllung das untere Peierls-Band schon vollständig gefüllt ist, hat das zusätzliche Elektron die niedrigstmögliche Energie im oberen Peierls-Band, beim Impuls $p = -\pi/(2a_0)$, so daß

$$E_0(N+1) = E(p) + E_0(N). \quad (3.11)$$

Unabhängig von der Gitterlänge L ist die Einteilchenlücke damit

$$\Delta_1^P = 2(E_0(N+1) - E_0(N)) = 2E(p) = 4t\delta. \quad (3.12)$$

Da die Einteilchenlücke für $\delta \neq 0$ endlich ist und sie von der Elektron-Phonon-Wechselwirkung verursachten Dimerisierung herrührt, ist das System ein Peierls-Isolator.

Optische Anregungen werden durch den Stromoperator vermittelt, wobei der Anteil des Stromoperators für optische Anregungen gegeben ist durch [13]

$$\hat{j}_{\text{opt}} = \sum_{k,\sigma} \frac{4te^2 a_0 \delta}{E(k)} \left(\hat{b}_{k,\sigma}^+ \hat{a}_{k,\sigma} + \hat{a}_{k,\sigma}^+ \hat{b}_{k,\sigma} \right). \quad (3.13)$$

Angeregte Singulett- und Triplettzustände sind von der Form

$$\text{Singulett : } |s\rangle = \left(\hat{b}_{p,\uparrow}^+ \hat{a}_{p,\uparrow} + \hat{b}_{p,\downarrow}^+ \hat{a}_{p,\downarrow} \right) / \sqrt{2} |0\rangle, \quad (3.14)$$

$$\text{Triplett : } |t\rangle = \left(\hat{b}_{p,\uparrow}^+ \hat{a}_{p,\uparrow} - \hat{b}_{p,\downarrow}^+ \hat{a}_{p,\downarrow} \right) / \sqrt{2} |0\rangle. \quad (3.15)$$

Diese Zustände sind identisch zu den Zuständen mit minimaler Ladungs- und Spinlücke. Bestimmt man die Energiedifferenzen des ersten angeregten Singulett- und Triplettzustands vom Grundzustand, nämlich Ladungs- und Spinlücke,

$$\Delta_{c/s}^P = \langle s/t | \hat{H}^P | s/t \rangle, \quad (3.16)$$

so findet man $\Delta_{c/s}^P = \Delta_1^P$. Damit verschwindet die Bindungsenergie dieser Teilchen-Loch-Paare, es handelt sich nicht um Exzitonen. Die optische Leitfähigkeit kann explizit berechnet werden [13]. Im thermodynamischen Limes erhält man

$$\text{Re}\{\sigma(\omega > 0)\} = \frac{e^2 a_0}{2\omega^2} \frac{\delta^2 W^4}{\sqrt{(\omega^2 - (W\delta)^2)(W^2 - \omega^2)}} \quad \text{für } W\delta < \omega < W, \quad (3.17)$$

wobei $W = 4t$ die Bandbreite und e die Elementarladung bezeichnet. Die reduzierte optische Leitfähigkeit ist in Abb. (3.2) dargestellt. Fast das gesamte spektrale Gewicht liegt in einem Peak an der unteren Bandkante $\omega = \delta W$, es gibt aber noch einen schwachen Peak mit endlichem spektralen Gewicht an der oberen Bandkante W . Zur besseren Darstellung ist die Leitfähigkeit aus (3.17) mit einer Lorentzkurve der Breite $\gamma = 0.01$ gefaltet worden.

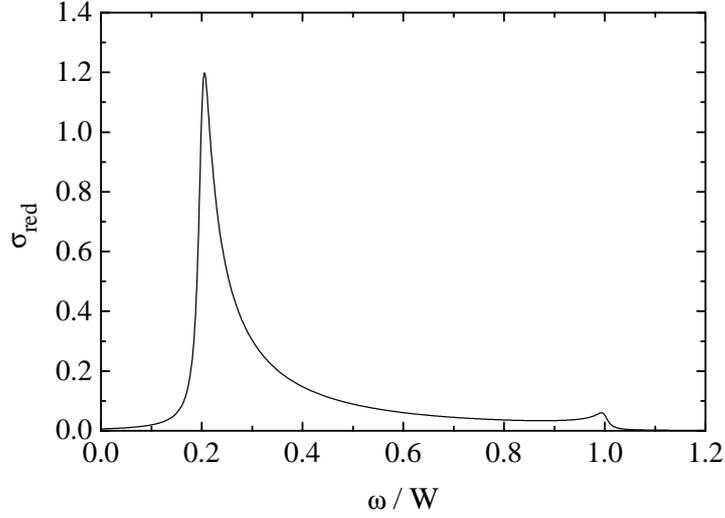


Abbildung 3.2 Reduzierte optische Leitfähigkeit des Peierls-Modells $\sigma_{\text{red}} = \omega \text{Re}\{\sigma(\omega)\}/(a_0 e^2 W)$ für $\delta = 0.2$ bei einer Verbreiterung von $\gamma = 0.01$ mit einem starken Peak an der unteren Bandkante und einem schwachen Peak an der oberen Bandkante.

3.2 Hubbard-Modell

Das eindimensionale Hubbard-Modell [14] ist ein Paradigma der Festkörpertheorie und damit eines der am intensivsten studierten Modelle. Eine ausführliche Beschreibung findet man in [4, 15, 16]. Es ist im Grenzfall $\delta = 0$ und $V = 0$ in (2.1) enthalten und lautet

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{Hub}} &= \hat{T} + U \hat{D} \\ &= -t \sum_{l=1, \sigma}^L \left(\hat{c}_{l, \sigma} \hat{c}_{l+1, \sigma}^{\dagger} + \text{h.c.} \right) + U \sum_{l=1}^L \left(\hat{n}_{l, \uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{l, \downarrow} - \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Die kinetische Energie dieses Modells ist

$$\hat{T} = \sum_{k, \sigma} \varepsilon(k) \hat{c}_{k, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{k, \sigma}. \quad (3.19)$$

In dieser Arbeit interessieren insbesondere die optischen Anregungen im eindimensionalen Hubbard-Modell, die in [17] untersucht worden sind. Für allgemeine Füllung folgt mit der speziellen Teilchen-Loch-Symmetrie

$$H(N_{\uparrow}, N_{\downarrow}, U, t) = H(L - N_{\uparrow}, L - N_{\downarrow}, U, -t) - U(L - N_{\uparrow} - N_{\downarrow}). \quad (3.20)$$

Im Falle von Halbfüllung erhält man daher

$$\mu^+ + \mu^- = U, \quad (3.21)$$

so daß für die Einteilchenlücke (2.13) $\Delta_1 = U - 2\mu^-$ gilt. Aus der exakten Lösung des Hubbard-Modells [18] für die Einteilchenlücke findet man [19]

$$\Delta_1 = \frac{16t}{U} \int_1^\infty dy \frac{\sqrt{y^2 - 1}}{\sinh(2\pi ty/U)}. \quad (3.22)$$

Da sie endlich für alle $U > 0$ ist, beschreibt das halbgefüllte Hubbard-Modell einen Mott-Isolator. Bei schwacher Kopplung öffnet sich die Lücke exponentiell

$$\Delta_1(U \leq 2t) \simeq (8t/\pi) \sqrt{U/t} \exp(-2\pi t/U). \quad (3.23)$$

Bei starker Kopplung gilt für die Einteilchenlücke

$$\Delta_1(U \geq 4t) \simeq U - 4t. \quad (3.24)$$

Die Spinlücke verschwindet, $\Delta_s = 0$ und für die Ladungslücke gilt

$$\Delta_c = \Delta_1. \quad (3.25)$$

Die Elektron-Loch-Anregungen sind ungebunden; es handelt sich somit nicht um Exzitonen.

3.3 Erweitertes Hubbard-Modell

3.3.1 Limes schwacher Wechselwirkung

Das erweiterte Hubbard-Modell mit Kopplung an nächste und übernächste Nachbarn ist gegeben durch

$$\hat{H}_{\text{EHM}} = \hat{T} + U\hat{D} + \hat{V}_1 + \hat{V}_2 \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} &= -t \sum_{l=1, \sigma}^L (\hat{c}_{l, \sigma} \hat{c}_{l+1, \sigma}^\dagger + \text{h.c.}) + U \sum_{l=1}^L \left(\hat{n}_{l, \uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{l, \downarrow} - \frac{1}{2} \right) \\ &\quad + V_1 \sum_{l=1}^L (\hat{n}_l - 1) (\hat{n}_{l+1} - 1) + V_2 \sum_{l=1}^L (\hat{n}_l - 1) (\hat{n}_{l+2} - 1). \end{aligned} \quad (3.27)$$

In [17] sind die optischen Anregungen dieses Modells im Limes kleiner Mott-Lücken, d.h. im Limes schwacher Kopplung $U, V_1, V_2 \ll t$, analytisch untersucht worden. In diesem Limes lassen sich die elementaren Ladungsanregungen ('Holonen' und 'Antiholonen') im Gittermodell durch eine effektive Feldtheorie, das *Sine-Gordon-Modell* [20], beschreiben, für das viele exakte Ergebnisse bekannt sind [21, 22, 23].

Das Sine-Gordon-Modell ist vollständig durch die Einteilchenlücke Δ_1 und die Kopplungskonstante

$$\beta^2 = \frac{4\pi v_F}{4\pi v_F + \sqrt{(2a_0(U + 6V_1 + 2V_2))^2 - (2a_0(U - 2V_1 + 2V_2))^2}} \quad (3.28)$$

charakterisiert [24]. Bei schwacher Kopplung skaliert $\Delta_1/2$ wie

$$\frac{\Delta_1}{2} \approx \frac{8t}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{g(1+x)} \left(\frac{1-x}{1+x} \right)^{(gx+2)/4gx} \quad (3.29)$$

mit

$$\begin{aligned} x &= \left(1 - \frac{U - 2V_1 + 2V_2}{U + 6V_1 + 2V_2} \right)^{1/2} \\ g &= \frac{U + 6V_1 + 2V_2}{2\pi t}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Für $1/2 < \beta^2 < 1$ haben die massiven Ladungsanregungen eine relativistische Dispersion,

$$E(P) = \sqrt{(\Delta_1/2)^2 + v_c^2 P^2}, \quad (3.31)$$

mit der Einteilchenlücke Δ_1 und der Ladungsgeschwindigkeit v_c [23, 25]. Einteilchenlücke und optische Lücke sind gleich, $\Delta_{\text{opt}} = \Delta_1$.

Für $\beta^2 < 1/2$ kann es gebundene Soliton-Antisoliton-Paare, auch *Breather* genannt, geben, die Exzitonen im Gittermodell entsprechen. Dabei ist ein (Anti-)Soliton im Ladungssektor ein (Anti-)Holon. Es handelt sich um gebundene spinlose Anregungen mit entgegengesetzter Ladung aus ‘Doppelbesetzung’ und ‘Loch’. Im Breather-Regime lassen sich die Anzahl N_b und die Exzitonlücken M_n der Anregungen anhand von

$$N_b = \left[\frac{1 - \beta^2}{\beta^2} \right], \quad (3.32)$$

$$M_n = \Delta_1 \sin \left(\frac{n\pi}{2N_b} \right) \quad (3.33)$$

bestimmen, wobei [...] die Gauß-Klammer ist. Man sieht sofort, daß es im reinen Hubbard-Modell keine Exzitonen gibt, da $\beta^2 = 1$ gilt.

Die Anwendung der Resultate der Feldtheorie auf das Gitterproblem ist auf den Bereich kleiner Mott-Lücken, d.h. $U, V_1, V_2 \ll t$, beschränkt. Es zeigt sich, daß die feldtheoretischen Ergebnisse auch außerhalb dieses Regimes gültig bleiben. Dies wurde in [24, 26] mithilfe der Dichtematrix-Renormierungsgruppe nachgewiesen.

Wie man an (3.28) sieht, bewirken V_1 und V_2 eine Verkleinerung von β . Um Exzitonen im erweiterten Hubbard-Modell zu finden, muß man im Parameterraum ein Regime mit kleiner Mott-Lücke und kleiner Kopplungskonstante $0 < \beta^2 < 1/2$ erreichen. Dies ist in diesem Limes nur möglich für $V_2 \neq 0$. Numerische Arbeiten für $\Delta_1 \sim W$ zeigen, daß man $V_2 = 0$ setzen kann, um Exzitonen im erweiterten Hubbard-Modell zu erhalten, wenn die Nächst-Nachbar-Wechselwirkung $V_1 > 2t$ gewählt wird [24].

3.3.2 Limes starker Kopplung

Im Limes starker Kopplung $W/U \rightarrow 0$ und bei Temperaturen $T \ll t^2/U$ (uniformer Spinhintergrund) läßt sich das erweiterte Hubbard-Modell auf das Harris-Lange-Modell

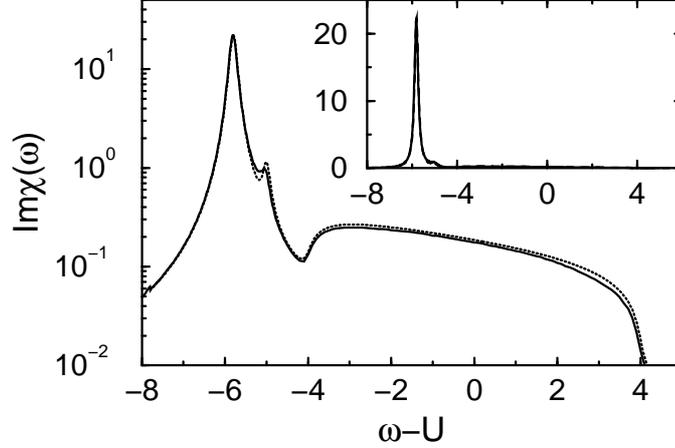


Abbildung 3.3 Imaginärteil der Strom-Strom-Korrelationsfunktion, $\text{Im}\{\chi(\omega)\} = \omega \text{Re}\{\sigma(\omega)\}$, im Limes starker Kopplung für $V_1 = 5t$, $V_2 = 0$ und einer Verbreiterung von $\gamma = 0.1t$ [24]. Die durchgezogene Linie ist das Resultat der Dynamischen DMRG für $L = 128$ Gitterplätze und offene Randbedingungen. Die gestrichelte Linie ist das analytische Resultat (3.34), gefaltet mit einer Lorentzkurve der Breite $\gamma = 0.1t$. Der Bildeinschub vergleicht die Ergebnisse auf einer linearen Skala.

abbilden [13]. Dieses Modell ist in einer Dimension exakt lösbar [27]. Im Falle niedriger Temperaturen gibt es jedoch keine exakte Lösung dieses Modells.

Eine approximative Lösung des Problems ist die sogenannte *no-recoil*-Näherung [13]. Im Limes starker Coulomb-Wechselwirkung und im Falle von Halbfüllung ist im Grundzustand jeder Gitterplatz einfach besetzt. Vernachlässigt man Korrekturen der Ordnung t/U , so sind Übergänge von Elektronen auf Prozesse beschränkt, bei denen die Anzahl der Löcher und Doppelbesetzungen erhalten bleibt; Spin- und Ladungssektor sind voneinander getrennt. Durch optische Absorption kann ein Loch aus dem unteren und eine Doppelbesetzung aus dem oberen Hubbard-Band mit einem Impulsübertrag q ($-q$) in den Spinsektor (Ladungssektor) angeregt werden. In der *no-recoil*-Näherung wird angenommen, daß nur Prozesse stattfinden, für deren Impulsübertrag $q = 0$ oder $q = \pi$ gilt. Die Anregungen des Systems sind Doppelbesetzungen und Löcher, die gebunden sein können, und damit exzitonisch sind [13], falls $V_1 > 2t$ für $V_2 = 0$.

Das analytische Resultat der optischen Leitfähigkeit in der *no-recoil*-Näherung ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \omega \text{Re}\{\sigma(\omega > 0)\} = & \pi g_\pi t^2 e^2 \delta(\omega - \omega_2) + g_0 t^2 e^2 \left\{ \Theta(V_1 - 2t) \pi (1 - (2t/V_1)^2) \delta(\omega - \omega_1) \right. \\ & \left. + \Theta(4t - |\omega - U|) \frac{2t^2 \sqrt{1 - ((\omega - U)/4t)^2}}{(\omega - \omega_1)V_1} \right\}, \end{aligned} \quad (3.34)$$

mit $\omega_1 = U - V_1 - 4t^2/V_1$, $\omega_2 = U - V_1$, der Stufenfunktion $\Theta(x)$ und $a_0 \equiv 1$.

Den Vergleich mit den numerischen Ergebnissen der dynamischen DMRG für $g_\pi = 0.08$ und $g_0 = 2.65$ zeigt Abbildung (3.3). Die Übereinstimmung der beiden Methoden ist sehr gut. Die störungstheoretische Entwicklung um den Limes großer U/t gilt nur im Bereich sehr starker Coulomb-Abstoßung, wie DMRG-Resultate für mittlere Kopplung zeigen [17, 26].

3.4 Erweitertes Peierls-Hubbard-Modell

3.4.1 Bisherige Ergebnisse

Für das erweiterte Peierls-Hubbard-Modell gibt es analytische Ergebnisse nur im Limes starker Coulomb-Abstoßung U/W . Dort stimmen die Ergebnisse der dynamischen DMRG hervorragend mit denen der no-recoil-Näherung überein [17, 24, 26]. Im Bereich mittleren Mott-Lücken sind diese analytischen Resultate allerdings nicht mehr anwendbar und können daher keine Beschreibung für reale Materialien liefern.

Für sehr kleine Coulomb-Wechselwirkung wurde das erweiterte Peierls-Hubbard-Modell in Wannier-Theorie untersucht [2]. Numerische DMRG-Resultate [9] zeigen jedoch, daß die Wannier-Theorie nur bei sehr kleiner Coulomb-Abstoßung quantitativ anwendbar ist. Bei Coulomb-Wechselwirkungen, die bei realen Materialien relevant sind, sind Korrekturen quadratischer Ordnung nicht vernachlässigbar. Zudem ist unklar, ob störungstheoretische Zugänge überhaupt verwendet werden dürfen.

Numerische Untersuchungen mittels der DMRG sind sehr Computer-intensiv und daher zeitaufwendig. Daher muß man sich im allgemeinen darauf beschränken, einige Punkte im Parameterraum (δ, U, V) zu betrachten und die Form des langreichweitigen Coulomb-Potentials beizubehalten. Dies reduziert die Einsetzbarkeit des numerischen Zugangs erheblich.

3.4.2 Aufgabenstellung

Bisher gibt es keine zufriedenstellende Analyse des erweiterten Peierls-Hubbard-Modells im Limes schwacher Coulomb-Korrelationen. Nur für den Fall, daß der Peierls-Term die Physik dominiert, ist eine Anwendung und Weiterentwicklung der Störungstheorie sinnvoll. Im nächsten Kapitel wird der Nachweis erbracht, daß eine Störungsentwicklung in der Coulomb-Wechselwirkung in der Tat möglich ist.

Im Kapitel 5 wird die Störungstheorie bis zur zweiten Ordnung in (U, V) durchgeführt. Der Vergleich mit den DMRG-Resultaten für ausgewählte Parametersätze in Kapitel 6 zeigt, daß man mit dieser Methode in Parameterbereiche vordringen kann, die reale Materialien beschreiben.

4 Feldtheorie

Eine Feldtheorie beschreibt ein Modell für Elektronen auf einem Gitter im Kontinuumsli-
mes [28, 29, 30]. Dabei beschränkt man sich auf die niederenergetischen Moden des Systems
und damit auf große Zeitskalen. Die Länge des Gitters ℓ bei L Gitterplätzen ist gegeben
durch

$$\ell = La_0 \quad (4.1)$$

mit der Gitterkonstanten a_0 . Der Kontinuumsli-
mes ist definiert durch eine verschwindend
kleine Gitterkonstante, $a_0 \rightarrow 0$, bei konstanter Gitterlänge ℓ [16]. Dieser Limes ist gültig
für niedrige Dichten von Anregungen und kleine Energieüberträge und ist im allgemeinen
erfüllt, wenn große Abstände im Vergleich zur Gitterkonstanten betrachtet werden.

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels wird das Peierls-Hubbard-Modell mit Nächst-Nach-
bar-Wechselwirkung auf das zugehörige effektive feldtheoretische Modell gekoppelter *Sine-
Gordon-Terme* [20] abgebildet und bosonisiert [25, 31]. In den zwei folgenden Abschnitten
wird dieses Modell im Rahmen eines semiklassischen Ansatzes [21] und der Renormie-
rungsgruppe [32] untersucht.

4.1 Ableitung des feldtheoretischen Modells

In diesem Abschnitt wird gezeigt, wie sich das Peierls-Hubbard-Modell auf ein effekti-
ves feldtheoretisches Modell gekoppelter Sine-Gordon-Modelle niederenergetischer Anre-
gungen abbilden läßt. Der Übersichtlichkeit halber wird das Peierls-Hubbard-Modell mit
Nächst-Nachbar-Wechselwirkung betrachtet,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{T} + \hat{T}_\delta + U\hat{D} + V\hat{V}_1 \\ &= -t \sum_{\sigma} \sum_{l=1}^L \left(1 + (-1)^l \delta\right) \left(\hat{c}_{l,\sigma}^+ \hat{c}_{l+1,\sigma} + \hat{c}_{l+1,\sigma}^+ \hat{c}_{l,\sigma}\right) \\ &\quad + U \sum_{l=1}^L \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l,\downarrow} + V \sum_{l=1}^L (\hat{n}_{l,\uparrow} + \hat{n}_{l,\downarrow}) (\hat{n}_{l+1,\uparrow} + \hat{n}_{l+1,\downarrow}) + \text{const.} \end{aligned} \quad (4.2)$$

Hierbei beschreibt \hat{T} die Bewegung freier Elektronen auf einem ungestörten Gitter und \hat{T}_δ
den Einfluß der Peierls-Verzerrung.

4.1.1 Linearisierung

Im Grundzustand des freien Hamilton-Operators \hat{T} sind alle Einteilchen-Zustände besetzt,
deren Impuls im Intervall $[-k_F, k_F]$ liegt. Damit sind alle Zustände mit Bloch-Impulsen

der Kosinus-Dispersion

$$\epsilon(k) = -2t \cos(ka_0) \quad (4.3)$$

für alle negativen Werte gefüllt.

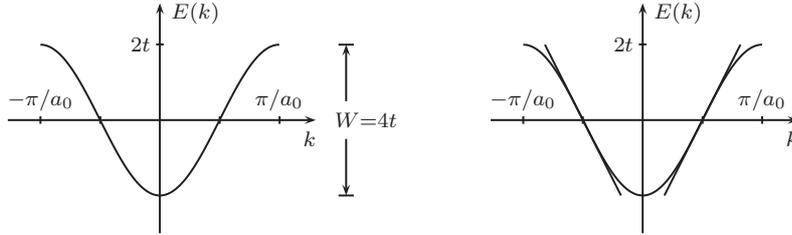


Abbildung 4.1 Dispersionsrelation (links) und Linearisierung an den Fermipunkten $\pm\pi/(2a_0)$ (rechts).

Zur Konstruktion des Feldtheorie-Limes behält man nur die Moden niedriger Energie in der Umgebung der Fermipunkte $\pm k_F = \pm\pi/(2a_0)$ bei, siehe Abb. (4.1). Dazu wird die Dispersion der freien Bewegung in der Umgebung der Fermipunkte linearisiert. Dann beschreibt das freie Modell \hat{T} nichtwechselwirkende, masselose, relativistische Fermionen mit der Fermigeschwindigkeit

$$v_F = \left. \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial k} \right|_{k=k_F} = 2ta_0 \sin(k_F a_0) = 2ta_0. \quad (4.4)$$

Die Elektron-Operatoren werden anhand von *chiralen*, d.h. sich nach rechts und links bewegendem Feldern $\hat{R}_\sigma(x)$ und $\hat{L}_\sigma(x)$ ausgedrückt [28],

$$\hat{c}_{l,\sigma} \rightarrow \sqrt{a_0} \left(\exp(ik_F x) \hat{R}_\sigma(x) + \exp(-ik_F x) \hat{L}_\sigma(x) \right). \quad (4.5)$$

Dabei ist $x = la_0$. Die chiralen Felder sind langsam variierend auf der Skala der Gitterkonstanten a_0 und haben Dimension $(\text{Länge})^{-1/2}$. Der Vorfaktor $\sqrt{a_0}$ sorgt für die Erhaltung der kanonischen Antikommutationsrelationen der Fermi-Operatoren $\hat{c}_{l,\sigma}$.

Ausgedrückt durch diese Operatoren ergibt sich der Hamilton-Operator des Peierls-Hubbard-Modells mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkung \hat{V}_1 als

$$\hat{T} = v_F \sum_\sigma \int dx \left(\hat{L}_\sigma^+(x) i \partial_x \hat{L}_\sigma(x) - \hat{R}_\sigma^+(x) i \partial_x \hat{R}_\sigma(x) \right), \quad (4.6)$$

$$\hat{T}_\delta = 2it\delta \sum_\sigma \int dx \left(\hat{R}_\sigma^+(x) \hat{L}_\sigma(x) - \hat{L}_\sigma^+(x) \hat{R}_\sigma(x) \right), \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned}
U\hat{D} + V\hat{V}_1 = \int dx \{ & (g_{4\perp} + g_{4\perp}^V) \left(\hat{R}_\uparrow^+(x)\hat{R}_\uparrow(x)\hat{R}_\downarrow^+(x)\hat{R}_\downarrow(x) + \hat{L}_\uparrow^+(x)\hat{L}_\uparrow(x)\hat{L}_\downarrow^+(x)\hat{L}_\downarrow(x) \right) \\
& + (g_{2\perp} + g_{2\perp}^V) \left(\hat{R}_\uparrow^+(x)\hat{R}_\uparrow(x)\hat{L}_\downarrow^+(x)\hat{L}_\downarrow(x) + \hat{L}_\uparrow^+(x)\hat{L}_\uparrow(x)\hat{R}_\downarrow^+(x)\hat{R}_\downarrow(x) \right) \\
& + (g_{1\perp} - g_{1\perp}^V) \left(\hat{R}_\uparrow^+(x)\hat{L}_\uparrow(x)\hat{L}_\downarrow^+(x)\hat{R}_\downarrow(x) + \hat{L}_\uparrow^+(x)\hat{R}_\uparrow(x)\hat{R}_\downarrow^+(x)\hat{L}_\downarrow(x) \right) \\
& + (g_{3\perp} - g_{3\perp}^V) \left(\hat{R}_\uparrow^+(x)\hat{L}_\uparrow(x)\hat{R}_\downarrow^+(x)\hat{L}_\downarrow(x) + \hat{L}_\uparrow^+(x)\hat{R}_\uparrow(x)\hat{L}_\downarrow^+(x)\hat{R}_\downarrow(x) \right) \\
& + (g_{2\parallel} + g_{2\parallel}^V) \left(\hat{R}_\uparrow^+(x)\hat{R}_\uparrow(x)\hat{L}_\uparrow^+(x)\hat{L}_\uparrow(x) + \hat{R}_\downarrow^+(x)\hat{R}_\downarrow(x)\hat{L}_\downarrow^+(x)\hat{L}_\downarrow(x) \right) \\
& + (g_{1\parallel} - g_{1\parallel}^V) \left(\hat{R}_\uparrow^+(x)\hat{L}_\uparrow(x)\hat{L}_\uparrow^+(x)\hat{R}_\uparrow(x) + \hat{R}_\downarrow^+(x)\hat{L}_\downarrow(x)\hat{L}_\downarrow^+(x)\hat{R}_\downarrow(x) \right) \\
& + g_{4\parallel}^V \left(\hat{R}_\uparrow^+(x)\hat{R}_\uparrow(x)\hat{R}_\uparrow^+(x)\hat{R}_\uparrow(x) + \hat{L}_\uparrow^+(x)\hat{L}_\uparrow(x)\hat{L}_\uparrow^+(x)\hat{L}_\uparrow(x) \right. \\
& \left. + \hat{R}_\downarrow^+(x)\hat{R}_\downarrow(x)\hat{R}_\downarrow^+(x)\hat{R}_\downarrow(x) + \hat{L}_\downarrow^+(x)\hat{L}_\downarrow(x)\hat{L}_\downarrow^+(x)\hat{L}_\downarrow(x) \right) \}, \quad (4.8)
\end{aligned}$$

wobei die $g_{n\gamma}$ gegeben sind als

$$\begin{aligned}
g_{n\perp} &= Ua_0, & g_{n\perp}^V &= 2Va_0 & \text{für } n &= 1, 2, 3, 4, \\
g_{n\parallel} &= 0, & g_{n\parallel}^V &= 2Va_0 & \text{für } n &= 1, 2, 4
\end{aligned} \quad (4.9)$$

und ∂_x als Abkürzung für $\partial/\partial x$ steht. Da die $g_{n\parallel}$ später in der Renormierungsgruppe eine Rolle spielen, sind die Terme hier bereits angegeben. Die möglichen Streuprozesse im Limes kleiner Anregungsenergien fallen in vier verschiedene Kategorien, wie in Abb. 4.2 gezeigt. Dabei beschreiben die sogenannten *g-ology*-Kopplungskonstanten [33] folgende Streuprozesse:

- g_1 : backward-scattering,
- g_2 : forward-scattering (R^+L, L^+R),
- g_3 : Umklapp-scattering,
- g_4 : forward-scattering (R^+R, L^+L).

Die g_2 - und g_4 -Prozesse unterscheiden sich dadurch, daß bei g_4 nur Elektronen aus der Umgebung eines der beiden Fermipunkte gestreut werden, während der g_2 -Prozeß beide Fermipunkte involviert. Der g_3 -Term beschreibt Streuprozesse mit einem dem reziproken Gittervektor entsprechenden Impulsübertrag von $2\pi/a_0$.

4.1.2 Bosonisierung

Die Methode der *Bosonisierung* [28, 31] basiert darauf, daß die fermionischen chiralen Felder anhand von bosonischen Operatoren ausgedrückt werden können, so daß die fermionischen Antikommutationsrelationen erhalten bleiben. Die Anregungen im erweiterten

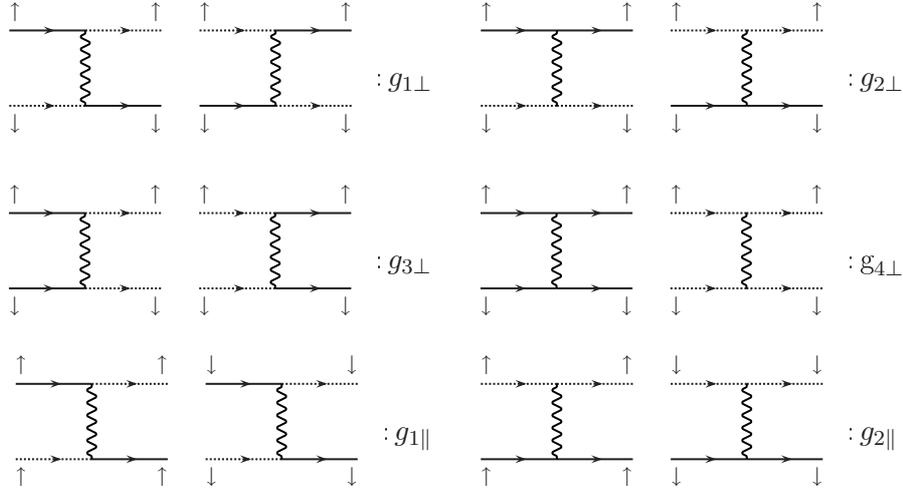


Abbildung 4.2 Auftretende Streuprozesse: g_1 backward-scattering, g_2 forward-scattering, g_3 Umklapp-scattering, g_4 forward-scattering.

Peierls-Hubbard-Modell sind Elektron-Loch-Paare, welche stets durch quadratische Kombinationen der Fermi-Felder beschrieben werden. Daher haben sie bosonischen Charakter, der im Rahmen der Bosonisierung ausgenutzt wird. Der Vorteil dieser Methode besteht in der einfachen Darstellung des Modells, dessen Ausdruck (4.8) im Limes niedriger Energien recht kompliziert erscheint. Eine gute Einführung in die Bosonisierung findet sich in [31, 34, 35], die hier benutzte Notation stammt jedoch aus [16].

Für das halbgefüllte Modell gelten die Bosonisierungsgleichungen für die Rechtsläufer

$$\begin{aligned}\hat{R}_\sigma(x) &= \frac{\eta_\sigma}{\sqrt{2\pi a_0}} \exp\left(\frac{-if_\sigma\pi}{4} - \frac{i}{\sqrt{2}}\varphi_\sigma\right) \\ &= \frac{\eta_\sigma}{\sqrt{2\pi a_0}} \exp\left(\frac{-if_\sigma\pi}{4} - \frac{i}{4}(\Phi_c + \Theta_c + f_\sigma(\Phi_s + \Theta_s))\right)\end{aligned}\quad (4.10)$$

und

$$\begin{aligned}\hat{R}_\sigma^+(x) &= \frac{\eta_\sigma}{\sqrt{2\pi a_0}} \exp\left(\frac{if_\sigma\pi}{4} + \frac{i}{\sqrt{2}}\varphi_\sigma\right) \\ &= \frac{\eta_\sigma}{\sqrt{2\pi a_0}} \exp\left(\frac{if_\sigma\pi}{4} + \frac{i}{4}(\Phi_c + \Theta_c + f_\sigma(\Phi_s + \Theta_s))\right).\end{aligned}\quad (4.11)$$

Für die Linksläufer gilt analog

$$\begin{aligned}\hat{L}_\sigma(x) &= \frac{\eta_\sigma}{\sqrt{2\pi a_0}} \exp\left(\frac{-if_\sigma\pi}{4} + \frac{i}{\sqrt{2}}\bar{\varphi}_\sigma\right) \\ &= \frac{\eta_\sigma}{\sqrt{2\pi a_0}} \exp\left(\frac{-if_\sigma\pi}{4} + \frac{i}{4}(\Phi_c - \Theta_c + f_\sigma(\Phi_s - \Theta_s))\right)\end{aligned}\quad (4.12)$$

und

$$\begin{aligned}\hat{L}_\sigma^+(x) &= \frac{\eta_\sigma}{\sqrt{2\pi a_0}} \exp\left(\frac{if_\sigma\pi}{4} - \frac{i}{\sqrt{2}}\bar{\varphi}_\sigma\right) \\ &= \frac{\eta_\sigma}{\sqrt{2\pi a_0}} \exp\left[\frac{if_\sigma\pi}{4} - \frac{i}{4}(\Phi_c - \Theta_c + f_\sigma[\Phi_s - \Theta_s])\right].\end{aligned}\quad (4.13)$$

Hierbei sind η_σ die sogenannten *Kleinfaktoren*, die $\{\eta_a, \eta_b\}_+ = 2\delta_{a,b}$ erfüllen. Außerdem gilt $f_\uparrow = 1 = -f_\downarrow$. Die kanonischen Bose-Felder $\Phi_{c/s}$ und die zugehörigen Dualfelder $\Theta_{c/s}$ hängen über die Beziehung

$$\partial_x \Theta_{c/s} = -\frac{1}{v_{c/s}} \partial_t \Phi_{c/s} \quad (4.14)$$

zusammen. Die sogenannten chiralen Felder $\phi_{c/s}$ und $\bar{\phi}_{c/s}$ sind gegeben durch

$$\Phi_c = \frac{1}{\sqrt{2}} ((\varphi_\uparrow + \varphi_\downarrow) + (\bar{\varphi}_\uparrow + \bar{\varphi}_\downarrow)) \equiv \phi_c + \bar{\phi}_c, \quad (4.15)$$

$$\Phi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} ((\varphi_\uparrow - \varphi_\downarrow) + (\bar{\varphi}_\uparrow - \bar{\varphi}_\downarrow)) \equiv \phi_s + \bar{\phi}_s, \quad (4.16)$$

$$\Theta_c = \frac{1}{\sqrt{2}} ((\varphi_\uparrow + \varphi_\downarrow) - (\bar{\varphi}_\uparrow + \bar{\varphi}_\downarrow)) \equiv \phi_c - \bar{\phi}_c, \quad (4.17)$$

$$\Theta_s = \frac{1}{\sqrt{2}} ((\varphi_\uparrow - \varphi_\downarrow) - (\bar{\varphi}_\uparrow - \bar{\varphi}_\downarrow)) \equiv \phi_s - \bar{\phi}_s. \quad (4.18)$$

welche die folgenden Kommutationsrelationen erfüllen

$$[\phi_c, \bar{\phi}_c] = 2\pi i = [\phi_s, \bar{\phi}_s]. \quad (4.19)$$

Die Normierung wird so gewählt, daß für verschwindende Abstände $|x-y| \rightarrow 0$ die folgende Operator-Entwicklung gilt,

$$\begin{aligned}\exp(i\alpha\Phi_a(x)) \exp(i\beta\Phi_b(y)) &= \exp(-\alpha\beta \langle \Phi_a(x)\Phi_b(x) \rangle) \exp(i\alpha\Phi_a(x) + i\beta\Phi_a(y)) \\ &\longrightarrow \left| \frac{x-y}{a_0} \right|^{4\alpha\beta} \exp(i\alpha\Phi_a(x) + i\beta\Phi_a(y)).\end{aligned}\quad (4.20)$$

Im Anhang A ist dargestellt, wie man das Peierls-Hubbard-Modell mithilfe dieser bosonischen Operatoren darstellen kann. Mit den Abkürzungen

$$G_{4c/s} = g_{4\perp} + g_{4\perp}^V \pm g_{4\parallel}^V \quad (4.21)$$

und

$$G_{2c/s} = g_{2\perp} + g_{2\perp}^V \pm (g_{2\parallel} + g_{2\parallel}^V - g_{1\parallel} + g_{1\parallel}^V) \quad (4.22)$$

ergeben sich die bosonisierten Energiedichten als

$$\mathcal{T} = \frac{v_F}{16\pi} \left[(\partial_x \Phi_c(x))^2 + (\partial_x \Theta_c(x))^2 + (\partial_x \Phi_s(x))^2 + (\partial_x \Theta_s(x))^2 \right], \quad (4.23)$$

$$\mathcal{T}_\delta = \frac{4t\delta}{\pi a_0} \cos(\Phi_c/2) \cos(\Phi_s/2), \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} UD + V\mathcal{V}_1 = & \frac{v_F}{16\pi} \left[\frac{1}{2\pi v_F} \left\{ (G_{4c} + G_{2c}) (\partial_x \Phi_c)^2 + (G_{4c} - G_{2c}) (\partial_x \Theta_c)^2 \right. \right. \\ & \left. \left. - (G_{4s} + G_{2s}) (\partial_x \Phi_s)^2 - (G_{4s} - G_{2s}) (\partial_x \Theta_s)^2 \right\} \right] \\ & + \frac{2}{(2\pi a_0)^2} \left\{ (g_{1\perp} - g_{1\perp}^V) \cos(\Phi_s) - (g_{3\perp} - g_{3\perp}^V) \cos(\Phi_c) \right\}. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Die Renormierung der Felder $\Phi_{c/s}$ und ihrer Dualfelder $\Theta_{c/s}$ durch Einführung sogenannter *Kompaktifizierungsradien* $K_{c/s}$ für Ladungs- und Spinsektoren

$$K_c = \sqrt{\frac{2\pi v_F + G_{4c} - G_{2c}}{2\pi v_F + G_{4c} + G_{2c}}}, \quad (4.26)$$

$$K_s = \sqrt{\frac{2\pi v_F - (G_{4s} - G_{2s})}{2\pi v_F - (G_{4s} + G_{2s})}} \quad (4.27)$$

und den Ladungs- und Spingeschwindigkeiten $v_{c/s}$

$$v_c = \frac{1}{2\pi} \sqrt{(2\pi v_F + G_{4c})^2 - G_{2c}^2}, \quad (4.28)$$

$$v_s = \frac{1}{2\pi} \sqrt{(2\pi v_F - G_{4s})^2 - G_{2s}^2} \quad (4.29)$$

führt zu einer starken Vereinfachung der Hamilton-Dichte

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{v_c}{16\pi} \left(\frac{1}{K_c} (\partial_x \Phi_c)^2 + K_c (\partial_x \Theta_c)^2 \right) + \frac{v_s}{16\pi} \left(\frac{1}{K_s} (\partial_x \Phi_s)^2 + K_s (\partial_x \Theta_s)^2 \right) \\ & + \frac{2}{(2\pi a_0)^2} \left[(g_{1\perp} - g_{1\perp}^V) \cos[\Phi_s] - (g_{3\perp} - g_{3\perp}^V) \cos(\Phi_c) \right] \\ & + \frac{4t\delta}{\pi a_0} \cos(\Phi_c/2) \cos(\Phi_s/2). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Da die Kopplungskonstanten $g_3 - g_3^V$ bzw. $g_1 - g_1^V$ den Ladungs- bzw. Spinsektor beschreiben, werden sie in Ladungs- bzw. Spinkopplungskonstanten umbenannt

$$g_{c\perp} \equiv g_3 - g_3^V, \quad g_{s\perp} \equiv g_1 - g_1^V. \quad (4.31)$$

Die Hamilton-Dichte besteht also aus drei Anteilen, nämlich einem wechselwirkenden Ladungssektor, einem wechselwirkenden Spinsektor und dem Peierls-Term, der beide Sektoren koppelt. Nach Reskalierung der Felder $\tilde{\Phi}_{c/s} = \Phi_{c/s}/\sqrt{K_{c/s}}$ und $\tilde{\Theta}_{c/s} = \sqrt{K_{c/s}}\Theta_{c/s}$ ergibt sich

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_{cs} \quad (4.32)$$

mit

$$\mathcal{H}_c = \mathcal{H}_{c0} - \frac{2g_{c\perp}}{(2\pi a_0)^2} \cos(\sqrt{K_c} \tilde{\Phi}_c), \quad (4.33)$$

$$\mathcal{H}_s = \mathcal{H}_{s0} + \frac{2g_{s\perp}}{(2\pi a_0)^2} \cos(\sqrt{K_s} \tilde{\Phi}_s), \quad (4.34)$$

$$\mathcal{H}_{cs} = \frac{4t\delta}{\pi a_0} \cos\left(\sqrt{K_c} \tilde{\Phi}_c/2\right) \cos\left(\sqrt{K_s} \tilde{\Phi}_s/2\right) \quad (4.35)$$

und den freien Anteilen

$$\mathcal{H}_{c/s0} = \frac{v_{c/s}}{16\pi} \left((\partial_x \tilde{\Phi}_c)^2 + (\partial_x \tilde{\Theta}_c)^2 \right). \quad (4.36)$$

Das feldtheoretische Modell (4.32) ist ein Modell gekoppelter Sine-Gordon-Modelle, das bislang noch nicht exakt gelöst werden konnte. Ein Näherungsverfahren ist die *semiklassische* Methode [36, 37], die im Abschnitt 4.2 dargestellt wird. Zunächst werden einige Ergebnisse für das Sine-Gordon-Modell zusammengestellt, das in (4.33) und (4.34) auftritt.

4.1.3 Sine-Gordon-Modell

Im Falle des erweiterten Hubbard-Modells, $\delta = 0$, reduziert sich das bosonisierte Modell (4.32) zu zwei getrennten Sine-Gordon-Modellen für Ladungs- und Spinsektor ('Spin-Ladungstrennung'). Das einfache Sine-Gordon-Modell [20]

$$\mathcal{H}_{\text{SG}} = \frac{1}{16\pi} \left((\partial_x \Phi)^2 + (\partial_x \Theta)^2 \right) + \lambda \cos(\beta\Phi) \quad (4.37)$$

ist exakt lösbar [22]. Es ist eines der grundlegenden Modelle für $(1+1)$ -dimensionale Systeme [23, 25, 28]. Wie die exakte Lösung des Modells zeigt [22], kann der Störterm $\lambda \cos(\beta\Phi)$ *relevant* sein, d.h. zu qualitativ neuer Physik führen; er kann aber auch *irrelevant* sein, so daß das Modell für endliches λ qualitativ dieselbe Physik beschreibt wie das freie System für $\lambda = 0$.

Es gibt ein Theorem (siehe [28]), das es erlaubt zu entscheiden, ob der Störterm relevant oder irrelevant ist. Hierzu muß die *Skalendimension* und der *konforme Spin* des Störoperators bekannt sein. Die Skalendimension Δ eines lokalen Operators $\mathcal{O}(z, \bar{z})$ beschreibt dessen Verhalten unter einer Dilatation

$$\mathcal{O}'(\alpha z, \alpha \bar{z}) = \alpha^{-\Delta} \mathcal{O}(z, \bar{z}). \quad (4.38)$$

Dabei sind z und \bar{z} die chiralen Koordinaten

$$\begin{aligned} z &= -i(x - v_{\text{F}}t) \\ \bar{z} &= i(x + v_{\text{F}}t) \end{aligned} \quad (4.39)$$

Der konforme Spin s ergibt sich aus dem Verhalten des Operators unter einer Drehung $\exp(\pm i\theta)$

$$\mathcal{O}'(e^{i\theta}z, e^{-i\theta}\bar{z}) = e^{is\theta}\mathcal{O}(z, \bar{z}). \quad (4.40)$$

Im Falle eines Störterms der Art $\lambda\cos(\beta\Phi)$ ist die Skalendimension $\Delta = 2\beta^2$ und der konforme Spin $s = 0$. Das Theorem besagt nun, daß eine Störung mit konformem Spin $s = 0$ und einer Skalendimension Δ *relevant* ist, wenn

$$\Delta < D \quad (4.41)$$

gilt, und *irrelevant* ist, wenn

$$\Delta > D \quad (4.42)$$

gilt, wobei D die Dimension des Systems ist, also $D = 1 + 1 = 2$. Für den Fall $\Delta = D$ nennt man die Störung *marginal*. Auf die potentielle Auswirkung einer marginalen Störung weist der Parameter λ hin:

$$\begin{aligned} \Delta = D \quad \wedge \quad \lambda < 0 & \quad \text{marginal relevant,} \\ \Delta = D \quad \wedge \quad \lambda > 0 & \quad \text{marginal irrelevant.} \end{aligned} \quad (4.43)$$

Eine endgültige Aussage über das Verhalten der marginalen Störung läßt sich jedoch nur über die Untersuchung der Entwicklung der Kopplungskonstante im Fluß der zugehörigen Renormierungsgruppengleichungen treffen, die im Abschnitt 4.3 eingeführt werden.

Für $\beta < 1$ hat das Modell ein massives, stark β -abhängiges Spektrum mit Anregungen der Masse M_n , die das Pauli-Prinzip berücksichtigen: ein Zustand mit festem Impuls kann nur einfach besetzt sein. Im Bereich $1/2 < \beta^2 < 1$ bestehen diese fermionischen Anregungen aus Dirac-Fermionen, den *Kinks*, und ihren Antiteilchen, den *Antikinks*. Im Bereich $\beta^2 < 1/2$ sind die Anregungen gebundene Kink-Antikink-Zustände, die auch als *Breather* bezeichnet werden.

4.2 Semiklassische Untersuchung des effektiven feldtheoretischen Modells

In dem hier zu untersuchenden feldtheoretischen Modell (4.32) gibt es drei konkurrierende Störterme. Je nach Vorzeichen von $g_{c\perp} = g_{s\perp} = \pm|g_{c\perp}|$ ist der $g_{c\perp}$ -Term relevant (marginal relevant) und der $g_{s\perp}$ -Term marginal relevant (marginal irrelevant). Im kompliziertesten dieser Störterme, dem δ -Term, sind Ladungs- und Spinsektor gekoppelt. Das Wechselspiel dieser drei Störungen soll untersucht werden.

Eine mögliche Herangehensweise an das Problem mehrerer teilweise gekoppelter Störterme ist die sogenannte *semiklassische* Methode [21, 36]. Dabei betrachtet man den Hamilton-Operator (4.32) als phänomenologisches Landau-Ginzburg-Energie-Funktional mit effektiven Kopplungskonstanten, die man nach dem Ausintegrieren energetisch hochliegender Anregungen erhält [37]. Ausgehend von (4.32)–(4.35) identifiziert man die hier zu

untersuchende effektive Potential-Dichte als

$$\begin{aligned}
 U_{\text{eff}}(\tilde{\Phi}_c, \tilde{\Phi}_s) &= \mathcal{H}_c - \mathcal{H}_{c0} + \mathcal{H}_s - \mathcal{H}_{s0} + \mathcal{H}_{cs} \\
 &= -\frac{g_{c\perp}}{2\pi^2 a_0^2} \cos(\sqrt{K_c} \tilde{\Phi}_c) + \frac{g_{s\perp}}{2\pi^2 a_0^2} \cos(\sqrt{K_s} \tilde{\Phi}_s) \\
 &\quad + \frac{4t\delta}{\pi a_0} \cos(\sqrt{K_c} \tilde{\Phi}_c/2) \cos(\sqrt{K_s} \tilde{\Phi}_s/2)
 \end{aligned} \tag{4.44}$$

mit $g_{c\perp} = g_{s\perp} = U - 2V_1$. Für den Fall verschwindender Dimerisierung, $\delta = 0$, und $U > 2V_1$ ($U < 2V_1$) ist der Spinterm (4.34) marginal irrelevant (marginal relevant) und der Spinsektor damit lückenlos (hat eine endliche Spinlücke), während der Ladungsterm (4.33) marginal relevant (relevant) ist. Es ist daher sinnvoll, eine Fallunterscheidung für $U > 2V_1$ (Mott-Hubbard-Regime) und $U < 2V_1$ (Ladungsdichtewelle-Regime) durchzuführen.

4.2.1 Mott-Hubbard-Regime

Zunächst wird hier das reine Peierls-Hubbard-Modell untersucht. Die Ergebnisse lassen sich direkt auf den Fall des erweiterten Peierls-Hubbard-Modells mit ($U > 2V_1$) übertragen.

Für den Fall verschwindender Dimerisierung, $\delta = 0$, beschreibt das Hubbard-Modell einen Mott-Hubbard-Isolator und hat damit eine endliche Lücke im Ladungssektor $\Delta_c \neq 0$ und keine Lücke im Spinsektor $\Delta_s = 0$. Der Spinsektor wird also durch eine freie bosonische Theorie mit masselosen Streuzuständen ohne Ladung mit Spin 1/2, auch *Spinonen* genannt, beschrieben. Der Ladungssektor ist durch ein Sine-Gordon-Modell mit dem relevanten Kosinus-Term $\cos(\sqrt{K_c} \Phi_c)$ gegeben. Die Ladungsanregungen sind damit ungebundene, spinlose, massive Kinks und Antikinks mit Ladung, sogenannte *Holonen* und *Antiholonen*.

Was passiert nun mit dem Peierls-Term bei endlicher Dimerisierung? Welchen Einfluß nimmt er auf Spin- und Ladungssektor? Die Idee der semiklassischen Untersuchung besteht darin, eine Entwicklung um die Minima des effektiven Potentials durchzuführen. Hierbei legt man die Felder an einem dieser Minima fest ('Pinning') und erreicht eine Entkopplung von Ladungs- und Spinsektor, deren Fluktuationen getrennt untersucht werden können ('feldtheoretische Mean-Field-Analyse').

4.2.1.1 Semiklassische Untersuchung der effektiven Potentialdichte

Die relevante Potential-Dichte entspricht dem zugehörigen phänomenologischen Landau-Ginzburg-Energie-Funktional und lautet

$$\begin{aligned}
 U_{\text{eff}}(\tilde{\Phi}_c, \tilde{\Phi}_s) &= \mathcal{H}_c - \mathcal{H}_{c0} + \mathcal{H}_{cs} \\
 &= -\frac{|g_{c\perp}|}{2\pi^2 a_0^2} \cos(\sqrt{K_c} \tilde{\Phi}_c) + \frac{4t\delta}{\pi a_0} \cos(\sqrt{K_c} \tilde{\Phi}_c/2) \cos(\sqrt{K_s} \tilde{\Phi}_s/2),
 \end{aligned} \tag{4.45}$$

wobei die Kopplungskonstanten $g_{c\perp} = U$ bzw. $g_{c\perp} = U - 2V_1$ positiv sind. Der Spinanteil $\mathcal{H}_s - \mathcal{H}_{s0}$ durfte weggelassen werden, weil er irrelevant ist.

Die Minima der Potential-Dichte befinden sich (modulo 4π) bei

$$\begin{aligned} (\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c, \sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s) &= \{(0, \text{fluktuierend}), (2\pi, \text{fluktuierend})\} && \text{für } \delta = 0, \\ (\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c, \sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s) &= \{(0, 2\pi), (2\pi, 0)\} && \text{für } (U - 2V_1) = 0, \\ (\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c, \sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s) &= \{(0, 2\pi), (2\pi, 0)\} && \text{für } \delta, (U - 2V_1) \neq 0. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Sobald die Dimerisierung δ endlich ist, wird die Entartung der Minima im Spinsektor aufgehoben. Der Ordnungsparameter der Peierls-isolierenden Phase

$$\mathcal{O}_{\text{PI}} = (-1)^l (\hat{c}_{l\uparrow}^+ \hat{c}_{l\uparrow} + \hat{c}_{l\downarrow}^+ \hat{c}_{l\downarrow}) \sim \cos(\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c/2) \cos(\sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s/2) \quad (4.47)$$

bekommt an einem beliebigen Minimum einen endlichen Erwartungswert

$$\langle \cos(\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c(x)/2) \cos(\sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s(x)/2) \rangle \neq 0. \quad (4.48)$$

Der Erwartungswert eines Operators ist definiert als das Funktionalintegral

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\int D\Phi_c D\Phi_s \exp(-S[\Phi_s, \Phi_c]) \mathcal{O}[\Phi_s, \Phi_c]}{\int D\Phi_c D\Phi_s \exp(-S[\Phi_s, \Phi_c])}. \quad (4.49)$$

Hierbei ist die gesamte Wirkung $S[\Phi_s, \Phi_c]$ durch

$$S[\Phi_s, \Phi_c] = S[\Phi_s] + S[\Phi_c] + S_{\text{int}}[\Phi_s, \Phi_c] \quad (4.50)$$

gegeben, wobei $S[\Phi_c]$ bzw. $S[\Phi_s]$ durch die Hamilton-Dichten (4.33) bzw. (4.34) und $S_{\text{int}}[\Phi_s, \Phi_c]$ durch (4.35) bestimmt sind und die Wirkung durch

$$S[\Phi_s, \Phi_c] = \int dx dt \mathcal{L} = \int dx dt (\mathcal{L}_0 - \mathcal{H}_{\text{int}}) \quad (4.51)$$

gegeben ist. Die Felder werden an einem beliebigen Minimum auf einen endlichen Wert festgelegt; hier wird $(\tilde{\Phi}_c, \tilde{\Phi}_s) = (0, 2\pi)$ gewählt. Im Rahmen der semiklassischen Analyse ergeben sich für die Spin- und Ladungserwartungswerte damit

$$\langle \cos(\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c(x)/2) \rangle \equiv h_c > 0, \quad (4.52)$$

$$\langle \cos(\sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s(x)/2) \rangle \equiv h_s < 0. \quad (4.53)$$

In einem ersten Lösungsansatz werden die Fluktuationen um die semiklassische Lösung im Spin- und Ladungssektor in den nächsten beiden Abschnitten getrennt voneinander untersucht.

4.2.1.2 Analyse des Spinsektors

Startpunkt ist die Annahme, daß der Erwartungswert

$$\left\langle \cos(\sqrt{K_c} \tilde{\Phi}_c(x)/2) \right\rangle \equiv h_c > 0 \quad (4.54)$$

endlich ist. Daher kann man die Ladungsfreiheitsgrade in der Zustandssumme ausintegrieren und erhält für den betreffenden Term

$$\exp(-S_{\text{eff}}[\Phi_s]) = \int D\Phi_c \exp(-S_0[\Phi_s] + S_0[\Phi_c] + S_{\text{int}}[\Phi_s, \Phi_c]) / Z_c \quad (4.55)$$

mit der Zustandssumme $Z_c = \int D\Phi_c \exp[-S_0[\Phi_c]]$ der Ladungsfreiheitsgrade. Hierzu entwickelt man nach dem Wechselwirkungsterm und erhält näherungsweise

$$\begin{aligned} \exp(-S_{\text{eff}}[\Phi_s]) &\approx \frac{\exp(-S_0[\Phi_s])}{Z_c} \left(1 - \frac{4t\delta}{\pi a_0} \int D\Phi_c \exp(-S_0[\Phi_c]) \right. \\ &\quad \left. \int d^2x \cos(\sqrt{K_c} \tilde{\Phi}_c(x)/2) \cos(\sqrt{K_s} \tilde{\Phi}_s(x)/2) \right) \\ &\approx \exp(-S_0[\Phi_s]) \left(1 - \frac{4t\delta}{\pi a_0} \int d^2x \cos(\sqrt{K_s} \tilde{\Phi}_s(x)/2) \right. \\ &\quad \left. \int D\Phi_c \exp(-S_0[\Phi_c]) \left\langle \cos(\sqrt{K_c} \tilde{\Phi}_c(x)/2) \right\rangle \right) \\ &= \exp(-S_0[\Phi_s]) \left[1 - \frac{4t\delta h_c}{\pi a_0} \int d^2x \cos(\sqrt{K_s} \tilde{\Phi}_s(x)/2) \right] \\ &\approx \exp \left(-S_0[\Phi_s] - \frac{4t\delta h_c}{\pi a_0} \cos(\sqrt{K_s} \tilde{\Phi}_s(x)/2) \right). \end{aligned} \quad (4.56)$$

Hieraus liest man die renormierte Hamilton-Dichte des Spinsektors ab,

$$\mathcal{H}_s^{\text{eff}} = \frac{v_s}{16\pi} \left[\left(\partial_x \tilde{\Phi}_s(x) \right)^2 + \left(\partial_x \tilde{\Theta}_s(x) \right)^2 \right] - \frac{4th_c\delta}{\pi a_0} \cos(\sqrt{K_s} \tilde{\Phi}_s(x)/2). \quad (4.57)$$

Wegen $\beta^2 = K_s/4 < 1/2$ gibt es in diesem effektiven Sine-Gordon-Modell gebundene und ungebundene Soliton-Antisoliton-Anregungen. Die Anzahl N_b der verschiedenen (gebundenen) Anregungen ergibt sich aus [24] nach

$$N_b = \left[\frac{1 - \beta^2}{\beta^2} \right] = 3, \quad (4.58)$$

wobei $[x]$ die nächstkleinere oder gleich große ganze Zahl bezeichnet, mit den zugehörigen Anregungslücken M_n

$$M_n = 2M \sin \left(\frac{n\pi}{6} \right) \quad n = 1, 2, 3 \quad (4.59)$$

mit der Einteilchenlücke $\Delta_s = 2M$ im Spinsektor. Man erhält drei Anregungen mit den zugehörigen Lücken

$$M_1 = M, \quad M_2 = \sqrt{3}M, \quad M_3 = 2M. \quad (4.60)$$

Neben zwei gebundenen Breather-Zuständen mit Anregungslücken M und $\sqrt{3}M$ gibt es auch ungebundene Solitonen und Antisolitonen deren Anregungslücke M_3 gerade der Einteilchenlücke $2M$ entspricht.

Diese Analyse zeigt, daß sich bei endlicher Dimerisierung δ eine Spinlücke öffnet und es gebundene Spinon-Antispinon-Zustände gibt, die zu Brethern gebunden werden und als Magnonen interpretiert werden können.

4.2.1.3 Analyse des Ladungssektors

Aufgrund des Peierls-Terms ist die Spinlücke endlich, und man kann eine Mean-Field-Analyse des Ladungssektors durchführen. Wegen der endlichen Spinlücke gilt

$$\langle \cos(\sqrt{K_s} \tilde{\Phi}_s/2) \rangle \equiv h_s < 0. \quad (4.61)$$

Analog zum vorherigen Abschnitt werden die Spinfreiheitsgrade im Funktionalintegral Mean-Field-entkoppelt. Die getrennte Behandlung der beiden Sektoren im Rahmen der Mean-Field-Analyse ist möglich, da sich die Energieskalen der Anregungen um Größenordnungen unterscheiden ($2\Delta_s \ll \Delta_1$). Diese Aussage wird für das Peierls-Hubbard-Modell durch DMRG-Untersuchungen unterstützt [38].

Im Gegensatz zum Spinsektor ergibt sich hier ein *Double-Sine-Gordon-Modell* für den Ladungssektor

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_c^{\text{eff}} = & \frac{v_c}{16\pi} \left[\left(\partial_x \tilde{\Phi}_c(x) \right)^2 + \left(\partial_x \tilde{\Theta}_c(x) \right)^2 \right] \\ & - \frac{g_{c\perp}}{2\pi^2 a_0^2} \cos(\sqrt{K_c} \tilde{\Phi}_c(x)) + \frac{4th_s \delta}{\pi a_0} \cos(\sqrt{K_c} \tilde{\Phi}_c(x)/2). \end{aligned} \quad (4.62)$$

Dieses Modell kann ebenfalls nur semiklassisch analysiert werden.

Wie in Abschnitt 3.3.1 ausgeführt, gibt es für das erweiterte Hubbard-Modell Breather-Anregungen im resultierenden Sine-Gordon-Modell [24]: sie sind gebundene Zustände aus Holonen und Antiholonen mit entgegengesetzter Ladung. Sie sind ladungsneutral und tragen keinen Spin, sie haben also die Quantenzahlen von Exzitonen.

Betrachtet man das effektive Potential unter Berücksichtigung des Peierls-Terms, so erkennt man, daß sich jedes zweite Minimum nach oben verschiebt und sich damit die Anzahl der Minima durch das Einschalten der Dimerisierung halbiert. Dadurch ergibt sich *Confinement* der Solitonen des Ladungssektors, zwei Solitonen des erweiterten Hubbard-Modells verbinden sich zu einer Elementaranregung der doppelten Länge im erweiterten Peierls-Hubbard-Modell. Dieses Szenario wird durch Ergebnisse der sogenannten Formfaktor-Störungstheorie [39] für das Double-Sine-Gordon-Modell unterstützt [36].

Die Resultate dieses Abschnitts lassen sich wie folgt zusammenfassen. Der Mott-Hubbard-Isolator ist instabil unter der Peierls-Dimerisierung. Der Peierls-Term ist die dominante Störung und beherrscht die Physik des Systems:

1. Für beliebig kleine Dimerisierung ist die Spin-Lücke endlich, während sie im reinen Hubbard-Modell verschwindet. Die gebundenen Breather-Anregungen können als Magnonen interpretiert werden.
2. Die Ladungslücke bleibt bei endlicher Dimerisierung endlich, aber die Anzahl der Minima des effektiven Potentials im Ladungssektor halbiert sich bei Anwesenheit der Peierls-Dimerisierung. Daher verändert sich die Struktur der Anregungen drastisch im Vergleich zum erweiterten Hubbard-Modell. Es gibt Confinement zweier Solitonen des erweiterten Hubbard-Modells, die Elementaranregung bei endlicher Dimerisierung hat die doppelte Länge.
3. Der Dimerisierungsterm hebt die Spin-Ladungstrennung im Niederenergiesektor auf. Es gibt sowohl Anregungen im Ladungs- als auch Anregungen im Spinsektor sowie gemischte, aus reinen Spin- und Ladungssolitonen (Spinonen und Holonen) zusammengesetzte Anregungen, welche die Quantenzahlen von Elektronen haben. Damit gibt es elektronische Elementaranregungen wie im Peierls-Modell.

4.2.2 Ladungsdichtewelle-Regime

Im Fall $U < 2V_1$ verhält sich das erweiterte Peierls-Hubbard-Modell ohne Dimerisierung wie ein *charge-density-wave*-Isolator (CDWI). Für starke Dimerisierung δ ist das System hingegen ein Peierls-Isolator (PI). In diesem Zusammenhang ist es interessant zu untersuchen, wie sich das Einschalten der Dimerisierung auf die Ladungsdichtewelle auswirkt. Bleibt das System für kleine Dimerisierung ein CDWI, gibt es einen gemischten CDWI-PI-Zustand oder wird es sofort Peierls-isolierend? Mit der semiklassischen Methode wird dieser Frage nachgegangen.

4.2.2.1 Semiklassische Analyse der effektiven Potentialdichte

Die effektive Potentialdichte des erweiterten Peierls-Hubbard-Modells ist gegeben durch das phänomenologische Landau-Ginzburg-Energie-Funktional

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{\text{eff}}(\tilde{\Phi}_c, \tilde{\Phi}_s) = & \alpha_1 |g_{c\perp}| \cos(\sqrt{K_c} \tilde{\Phi}_c) - \alpha_1 |g_{s\perp}| \cos(\sqrt{K_s} \tilde{\Phi}_s) \\ & + \alpha_2 \delta \cos(\sqrt{K_c} \tilde{\Phi}_c / 2) \cos(\sqrt{K_s} \tilde{\Phi}_s / 2), \end{aligned} \quad (4.63)$$

wobei $\alpha_1 \equiv 2/(2\pi a_0)^2$ und $\alpha_2 \equiv 4t/(\pi a_0)$. Im Falle $\delta = 0$ hat der Spinsektor eine Lücke. Auch der Ladungsterm ist relevant, da $K_c \simeq 1 - (U + 6V_1)/(2\pi v_F) < 1$ gilt, wenn man die Anfangswerte $g_{n\gamma} = Ua_0$ und $g_{n\gamma}^V = 2Va_0$ in (4.26) einsetzt. Die Minima des effektiven Potentials sind abhängig von dem Wert $\alpha_2 \delta / (\alpha_1 |g_{c\perp}|)$. Man gewinnt sie aus den

Bedingungen

$$\begin{aligned} \sin(\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c/2) \left(\cos(\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c/2) + \frac{1}{4} \frac{\alpha_2\delta}{\alpha_1|g_{c\perp}|} \cos(\sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s/2) \right) &= 0, \\ \sin(\sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s/2) \left(\cos(\sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s/2) - \frac{1}{4} \frac{\alpha_2\delta}{\alpha_1|g_{s\perp}|} \cos(\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c/2) \right) &= 0 \end{aligned} \quad (4.64)$$

und erhält (modulo 4π)

$$\begin{aligned} \left(\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c, \sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s \right) &\in \{(\pi, 0), (3\pi, 0), (\pi, 2\pi), (3\pi, 2\pi)\} && \text{für } \delta = 0, \\ \left(\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c, \sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s \right) &\in \{(\phi_0, 0), (2\pi - \phi_0, 0), (\phi_0, 2\pi), (2\pi - \phi_0, 2\pi)\} && \text{für } \delta < \frac{|g_{c\perp}|}{2\pi}, \\ \left(\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c, \sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s \right) &\in \{(0, 2\pi), (2\pi, 0)\} && \text{für } \delta > \frac{|g_{c\perp}|}{2\pi} \end{aligned} \quad (4.65)$$

mit $\phi_0 = 2 \arccos(2\pi\delta/|g_{c\perp}|)$. An dem Punkt $\delta_{\text{crit}} = |g_{c\perp}|/(2\pi)$ ändert sich die Struktur der Minima im *Ladungssektor* grundlegend: Ist $\delta = 0$, so gibt es für $\Phi_c \in [0, 4\pi]$ und $\Phi_s = 0$ zwei globale Minima. In diesem Limes ist das System ein CDWI. Liegt δ nun im Bereich $0 \leq \delta < \delta_{\text{crit}}$, so verändert sich zwar nicht die Anzahl, aber die Lage der Minima: jeweils zwei benachbarte Minima (rechts und links um 2π) bewegen sich bei größer werdendem δ aufeinander zu. Da die Höhe des dazwischenliegenden Maximums abnimmt, geht das Potential in ein *Double-Well*-Potential über. Daraus kann man folgern, daß sich das System in einem CDWI-PI-Mischzustand befindet. Am Punkt δ_{crit} vereinigen sie sich zu einem Minimum, dessen Position sich für weiter wachsendes δ *nicht* mehr verändert. Dieses Minimum befindet sich an derselben Stelle wie im reinen Peierls-Modell, in dem das System Peierls-isolierend ist. Daraus läßt sich schließen, daß sich das erweiterte Peierls-Hubbard-Modell im Falle $\delta > \delta_{\text{crit}}$ ebenfalls wie ein PI verhält, in dem die elementaren Anregungen Solitonen sind. Position und Anzahl der Minima im *Spinsektor* sind unabhängig von der Größe von δ . Der Spinanteil des Spektrums ändert sich folglich stetig von der CDW- zur Peierls-Phase. Das ist ganz offensichtlich nicht der Fall für den Ladungssektor. Das Szenario eines Quanten-Phasenübergangs wurde im Rahmen einer DMRG-Untersuchung bestätigt [40].

Die zugehörigen Ordnungsparameter \mathcal{O}_{CDW} (charge density wave) und \mathcal{O}_{PI} (bond order wave) sind gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{\text{CDW}} &= (-1)^l (n_{l\uparrow} + n_{l\downarrow}) \sim \sin\left(\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c/2\right) \cos\left(\sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s/2\right), \\ \mathcal{O}_{\text{PI}} &= (-1)^l \sum_{\sigma} \left(c_{l,\sigma}^+ c_{l+1,\sigma} + \text{h.c.} \right) \sim \cos\left(\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c/2\right) \cos\left(\sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s/2\right). \end{aligned} \quad (4.66)$$

Im Peierls-isolierenden Regime für $\delta > \delta_{\text{crit}}$ verschwindet der CDW-Ordnungsparameter \mathcal{O}_{CDW} , da das Minimum im Ladungssektor für festes Spinfeld $\sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s = 0$ bei $\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c = 2\pi$ liegt (modulo 4π). Der PI-Ordnungsparameter ist hingegen stets endlich.

Interessanter dagegen ist der Fall $0 < \delta < \delta_{\text{crit}}$, in dem beide Ordnungsparameter einen endlichen Wert annehmen,

$$\mathcal{O}_{\text{CDW}} \propto \sin(\phi_0) = \sin\left(\arccos\left[\frac{\delta}{\delta_{\text{crit}}}\right]\right) \approx 1 - \frac{1}{2}\left(\frac{\delta}{\delta_{\text{crit}}}\right)^2, \quad (4.67)$$

$$\mathcal{O}_{\text{PI}} \propto \cos\left(\arccos\left[\frac{\delta}{\delta_{\text{crit}}}\right]\right) = \frac{\delta}{\delta_{\text{crit}}}. \quad (4.68)$$

Dabei ist der CDW-Ordnungsparameter dominant für kleine Dimerisierung δ : die massiven Spin- und Ladungssolitonen, *Spinonen* und *Holonen*, bleiben stabil. Dieses Verhalten wird auch im Rahmen der DMRG-Analyse in [40] beobachtet.

4.2.2.2 Analyse des Spinsektors für kleine Dimerisierung

Wie im vorherigen Abschnitt 4.2.1 zielt die tieferegehende Mean-Field-Analyse darauf ab, eine effektive Hamilton-Dichte für den Spinsektor zu gewinnen. Im Falle $\delta = 0$ befindet sich das Minimum im Ladungssektor bei $\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c = \pi$ (modulo 2π). Damit verschwindet der Term erster Ordnung in δ

$$\left\langle \cos\left(\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c(x)\right) \right\rangle = 0. \quad (4.69)$$

Erst die zweite Ordnung trägt bei. Im Funktionalintegral ergibt sich in zweiter Ordnung in $S_{\text{int}}[\Phi_s, \Phi_c]$ der Term

$$\begin{aligned} & \int d^2x d^2y \left\langle \cos\left(\frac{\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c(x)}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{K_c}\tilde{\Phi}_c(y)}{2}\right) \right\rangle \cos\left(\frac{\sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s(x)}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s(y)}{2}\right) \\ & \approx a_0^2 \tilde{h}_c \int d^2x \left(\cos\left(\sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s(x)\right) - \frac{a_0^2}{2 \cdot 4} \left(\sqrt{K_s}\partial_x \tilde{\Phi}_s(x)\right)^2 \right), \end{aligned} \quad (4.70)$$

wobei \tilde{h}_c eine nichtuniverselle, positive Konstante ist und berücksichtigt wurde, daß die auftretenden Korrelationsfunktionen exponentiell als Funktion des Abstandes $|x - y|$ abfallen, so daß Terme höherer Ordnung vernachlässigt werden können. Damit wird die Spinkopplungskonstante $g_{s\perp}$ aus (4.63) in zweiter Ordnung in δ renormiert

$$\bar{g}_{s\perp} = g_{s\perp} + \tilde{h}_c \frac{a_0^2 (2\pi a_0)^2}{ta_0} \left(\frac{4t\delta}{\pi a_0}\right)^2. \quad (4.71)$$

Da $g_{s\perp} = U - 2V_1 < 0$, gilt $g_{s\perp} < \bar{g}_{s\perp}$. Wegen des perturbativen Zugangs gilt jedoch weiterhin $\bar{g}_{s\perp} < 0$. Damit wird der Spinsektor durch das folgende Sine-Gordon-Modell beschrieben,

$$\mathcal{H}_s^{\text{eff}} = \frac{v_F}{16\pi} \left(\left(\partial_x \tilde{\Phi}_s(x)\right)^2 + \left(\partial_x \tilde{\Theta}_s(x)\right)^2 \right) + \frac{2\bar{g}_{s\perp}}{(2\pi a_0)^2} \cos\left(\sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s(x)\right), \quad (4.72)$$

dessen elementare Anregungen massive, ungebundene Solitonen und Antisolitonen sind ($\bar{g}_{s\perp} < 0$ und $\beta^2 > 1/2$).

4.2.2.3 Analyse des Ladungssektors für kleine Dimerisierung

Unabhängig von der Größe der Dimerisierung δ befindet sich das Minimum im Spinsektor bei $\sqrt{K_s}\tilde{\Phi}_s = 0$. Folglich trägt schon die erste Ordnung in δ bei

$$\left\langle \cos \left(\sqrt{K_s} \tilde{\Phi}_s / 2 (x) \right) \right\rangle \equiv h_s > 0. \quad (4.73)$$

Der Ladungssektor ist durch ein Double-Sine-Gordon-Modell [36] bestimmt,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_c^{\text{eff}} = & \frac{v_F}{16\pi} \left(\left(\partial_x \tilde{\Phi}_c(x) \right)^2 + \left(\partial_x \tilde{\Theta}_c(x) \right)^2 \right) \\ & + \frac{2|g_{c\perp}|}{(2\pi a_0)^2} \cos \left(\sqrt{K_c} \tilde{\Phi}_c(x) \right) + h_s \frac{4t\delta}{\pi a_0} \cos \left(\sqrt{K_c} \tilde{\Phi}_c(x) / 2 \right). \end{aligned} \quad (4.74)$$

Die Ladungsanregungen sind massive Holonen und Antiholonen für alle δ . Im Gegensatz zum Mott-Hubbard-Fall ergibt sich durch die Hinzunahme des Dimerisierungsterms kein *Confinement* für die Anregungen: da die Minima des effektiven Potentials nur leicht verschoben werden aber entartet bleiben, bleiben Solitonen und Antisolitonen weiterhin stabile Anregungen. Der Effekt des Peierls-Terms liegt in einer Veränderung der Massen der Anregungen, die durch die Verschiebung der Maxima des effektiven Potentials verursacht wird [41]. Die Ergebnisse dieser Analyse werden von DMRG-Resultaten bestätigt [40].

4.2.3 Ordnungsparameter im Ladungsdichtewelle-Regime

Wie im vorherigen Abschnitt gezeigt wurde, gibt es im CDW-Regime eine CDWI-PI-Mischphase. Die Ordnungsparameter dieser Phasen liefern tiefere Einblicke in deren Struktur. Wie bisher werden die Ordnungsparameter der CDW- und der Peierls-isolierenden Phase (4.66) störungstheoretisch in der Dimerisierung δ entwickelt. Im Gegensatz zur semiklassischen Untersuchung im vorherigen Abschnitt wird nunmehr eine Mean-Field-Analyse durchgeführt.

4.2.3.1 PI-Ordnungsparameter

Zunächst wird der PI-Ordnungsparameter \mathcal{O}_{PI} betrachtet. Um die Notation möglichst einfach zu halten, wird an dieser Stelle wieder $\Phi_{c/s} = \sqrt{K_{c/s}} \tilde{\Phi}_{c/s}$ eingeführt. In führender Ordnung erhält man

$$\mathcal{O}_{\text{PI}}^{(0)}(z) = \langle \cos(\Phi_c(z)/2) \cos(\Phi_s(z)/2) \rangle. \quad (4.75)$$

Dieser Beitrag verschwindet, weil das Ladungsfeld Φ_c im Falle $\delta = 0$ bei einem ungeraden Vielfachen von π gepinnt und damit $\langle \cos(\Phi_c(z)/2) \rangle = 0$ gilt. In erster Ordnung ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{\text{PI}}^{(1)}(z) & \sim \delta \int d^2x \langle \cos(\Phi_c(z)/2) \cos(\Phi_s(z)/2) \cos(\Phi_c(x)/2) \cos(\Phi_s(x)/2) \rangle \\ & = \delta \int d^2x \langle \cos(\Phi_c(z)/2) \cos(\Phi_c(x)/2) \rangle \langle \cos(\Phi_s(z)/2) \cos(\Phi_s(x)/2) \rangle. \end{aligned} \quad (4.76)$$

In führender Ordnung erhält man im Spinsektor einen Beitrag von der direkten Entkoppelung

$$\langle \cos(\Phi_s(z)/2) \cos(\Phi_s(x)/2) \rangle = \langle \cos(\Phi_s/2) \rangle^2 \neq 0, \quad (4.77)$$

da das Spinfeld Φ_s bei Null gepinnt ist und der Erwartungswert $\langle \cos(\Phi_s/2) \rangle$ nicht verschwindet. Die Struktur dieses Erwartungswertes erhält man über eine Dimensionsanalyse

$$[\langle \cos(\Phi_s(z)/2) \rangle] = 1 = \left[\sqrt{\frac{\Delta_s a_0}{v_s}} \right]. \quad (4.78)$$

Für den Spinsektor ergibt sich also

$$\langle \cos(\Phi_s(z)/2) \rangle^2 = C_s \frac{\Delta_s a_0}{v_s} \quad (4.79)$$

mit einer Konstanten C_s . Im Gegensatz zum Spinsektor verschwindet der direkt entkoppelte Term wegen des Pinnings des Ladungsfeldes bei $\Phi_c = \pi$. Der erste endliche Beitrag ist damit

$$\langle \cos(\Phi_c(z)/2) \cos(\Phi_c(x)/2) \rangle, \quad (4.80)$$

der nicht direkt berechnet werden kann. Da der Ladungssektor massiv ist, verschwindet diese Korrelationsfunktion exponentiell als Funktion von $|x - z|$, wobei die Korrelationslänge ξ proportional zur inversen Lücke ist, $\xi \propto v_c/\Delta_c$. In dieser Näherung läßt sich der Ausdruck (4.80) auswerten,

$$\langle \cos(\Phi_c(z)/2) \cos(\Phi_c(x)/2) \rangle \sim \int dx^2 e^{-|x|/\xi} = 2\pi \int dr r e^{-r/\xi} = C_c \frac{v_c^2}{\Delta_c^2 a_0^2}. \quad (4.81)$$

Insgesamt erhält man für den PI-Ordnungsparameter bis zur ersten Ordnung in δ

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{\text{PI}}^{(1)}(z) &\sim \delta \int d^2x \langle \cos(\Phi_c(z)/2) \cos(\Phi_s(z)/2) \cos(\Phi_c(x)/2) \cos(\Phi_s(x)/2) \rangle \\ &= \delta C_s C_c \frac{v_c^2}{v_s} \frac{\Delta_s}{\Delta_c^2 a_0}. \end{aligned} \quad (4.82)$$

Wie bereits im Rahmen der semiklassischen Näherung abgeleitet wurde (4.68), ist der Ordnungsparameter im langreichweitigen Limes proportional zur Dimerisierung. Der vollständige Entwicklungsparameter ist offenbar $\delta(\Delta_s/v_s)(v_c/\Delta_c)^2$. Der Vorfaktor ist von der Größenordnung Eins, da die Ladungs- und Spinlücken in diesem Limes durch den CDW-Isolator dominiert sind, $\Delta_{c/s} \approx v_{c/s}$.

4.2.3.2 CDW-Ordnungsparameter

Für den CDW-Ordnungsparameter \mathcal{O}_{CDW} gibt es in führender Ordnung in δ einen endlichen Beitrag

$$\mathcal{O}_{\text{CDW}}^{(0)} = \langle \sin(\Phi_c(z)/2) \cos(\Phi_s(z)/2) \rangle = \langle \sin(\Phi_c(z)/2) \rangle \langle \cos(\Phi_s(z)/2) \rangle \neq 0, \quad (4.83)$$

da beide Sektoren eine Lücke aufweisen und die Felder für $\delta = 0$ bei $\Phi_c = \pi$ und $\Phi_s = 0$ gepinnt sind. Der Beitrag erster Ordnung,

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{\text{CDW}}^{(1)} &\sim \delta \int d^2x \langle \sin(\Phi_c(z)/2) \cos(\Phi_s(z)/2) \cos(\Phi_c(x)/2) \cos(\Phi_s(x)/2) \rangle \\ &= \delta \int d^2x \langle \sin(\Phi_c(z)/2) \cos(\Phi_c(x)/2) \rangle \langle \cos(\Phi_s(z)/2) \cos(\Phi_s(x)/2) \rangle = 0, \end{aligned} \quad (4.84)$$

verschwindet wegen der Teilchen-Loch-Symmetrie des Modells

$$\mathcal{H}(\Phi_s, \Phi_c) = \mathcal{H}(-\Phi_s, -\Phi_c). \quad (4.85)$$

Bei gepinnten Spin- und Ladungsfeldern, $\Phi_s = 0$ und $\Phi_c = \pi$, übersetzt sich das für den obigen Erwartungswert zu $\mathcal{O}_{\text{CDW}}^{(1)}(\Phi_s, \Phi_c - \pi) = \mathcal{O}_{\text{CDW}}^{(1)}(-\Phi_s, -(\Phi_c - \pi))$, wobei berücksichtigt wurde, daß Φ_c modulo 2π bestimmt ist. Im Ladungssektor erhält man also für den Erwartungswert

$$\langle \cos(\Phi_c(z)/2) \sin(\Phi_c(x)/2) \rangle \Big|_{\Phi_c \rightarrow -\Phi_c} = - \langle \cos(\Phi_c(z)/2) \sin(\Phi_c(x)/2) \rangle = 0. \quad (4.86)$$

In zweiter Ordnung ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{\text{CDW}}^{(2)}(z) &\sim \delta^2 \int d^2x d^2y \langle \sin(\Phi_c(z)/2) \cos(\Phi_s(z)/2) \cos(\Phi_c(x)/2) \cos(\Phi_s(x)/2) \\ &\quad \cos(\Phi_c(y)/2) \cos(\Phi_s(y)/2) \rangle \\ &\approx \delta^2 \langle \cos(\Phi_s/2) \rangle^3 \int d^2x d^2y \langle \sin(\Phi_c(z)/2) \cos(\Phi_c(x)/2) \cos(\Phi_c(y)/2) \rangle \neq 0, \end{aligned} \quad (4.87)$$

wobei im letzten Schritt schon die führende Ordnung im Spinsektor eingesetzt wurde, die wegen der Lücke im Spinsektor und des Pinnings bei $\Phi_s = 0$ endlich bleibt. Die analytische Berechnung der Dreipunktsfunktion im Ladungssektor ist äußerst kompliziert, so daß man sich an dieser Stelle mit dem obigen qualitativen Ansatz (4.81) für den räumlichen Zerfall der Korrelationsfunktionen begnügen muß,

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{\text{CDW}}^{(2)}(z) &\sim \delta^2 \langle \cos(\Phi_s/2) \rangle^3 \int d^2x d^2y \exp(-|x-y|/\xi) \exp(-|x-z|/\xi) \exp(-|y-z|/\xi) \\ &\sim \delta^2 \left(\frac{a_0 \Delta_s}{v_s} \right)^{3/2} \left(\frac{v_c}{a_0 \Delta_c} \right)^4. \end{aligned} \quad (4.88)$$

Die Mean-Field-Analyse bestätigt das qualitative Resultat der semiklassischen Rechnung (4.67). Der Ordnungsparameter der Ladungsdichtewelle nimmt quadratisch mit der Dimerisierung ab. Der vollständige Entwicklungsparameter ist offenbar $\delta^2 (a_0 \Delta_s / v_s) (v_c / a_0 \Delta_c)^4$.

Die Mean-Field-Resultate folgen qualitativ dem Verlauf der mithilfe der DMRG in [40] berechneten Ordnungsparameter.

4.3 Renormierungsgruppengleichungen

In diesem Abschnitt werden die *Renormierungsgruppengleichungen* (RG-Gleichungen) für das Peierls-Hubbard-Modell mit Nächst-Nachbar-Wechselwirkung aufgestellt. Diese gekoppelten Differentialgleichungen beschreiben das Verhalten der Störungen unter schrittweiser Ausintegration von Freiheitsgraden hoher Energien im Limes niederenergetischer Anregungen [32, 42, 43]. Diese Methode geht ebenfalls aus vom feldtheoretischen Limes des erweiterten Peierls-Hubbard-Modells (4.32). Im Gegensatz zur semiklassischen und zur Mean-Field-Analyse betrachtet man die führenden Instabilitäten des nichtwechselwirkenden Systems als Funktion effektiver Kopplungskonstanten, die mithilfe der RG-Gleichungen systematisch berechnet werden können.

Um diese Gleichungen bis zur zweiten Ordnung in den Kopplungskonstanten zu erhalten, werden im ersten Abschnitt die sogenannten Operator-Produkt-Entwicklungen für die auftretenden Produkte zweier Operatoren berechnet. In dem darauf folgenden Abschnitt werden die RG-Gleichungen zunächst für die Mean-Field-entkoppelten Spin- und Ladungssektoren im CDW-Limes aufgestellt und qualitativ analysiert; im Mott-Hubbard-Regime ergeben sich die bekannten Resultate, weil die Dimerisierung die Physik stets dominiert. Zum Schluß werden die vollen RG-Gleichungen behandelt. In beiden Fällen werden die Resultate der semiklassischen und Mean-Field-Analyse bestätigt.

4.3.1 Hamilton-Dichte im RG-Zugang

Die Hamilton-Dichte des Peierls-Hubbard-Modells mit Nächst-Nachbar-Wechselwirkung ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \sum_{a=c,s} \frac{v_a}{16\pi} \left(\frac{1}{K_a} (\partial_x \Phi_a(z, \bar{z}))^2 + K_a (\partial_x \Theta_a(z, \bar{z}))^2 \right) + \frac{2g_{s\perp}}{(2\pi a_0)^2} \cos(\Phi_s(z, \bar{z})) \\ - \frac{2g_{c\perp}}{(2\pi a_0)^2} \cos(\Phi_c(z, \bar{z})) + \frac{4t\delta}{\pi a_0} \cos(\Phi_c(z, \bar{z})/2) \cos(\Phi_s(z, \bar{z})/2) , \end{aligned} \quad (4.89)$$

wie im Abschnitt 4.1 gezeigt wurde. Dies kann man schreiben als

$$\begin{aligned} \mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_{0c} + \frac{v_c}{16\pi} \left(\left(\frac{1}{K_c} - 1 \right) (\partial_x \Phi_c(z, \bar{z}))^2 + (K_c - 1) (\partial_x \Theta_c(z, \bar{z}))^2 \right) \\ + \mathcal{H}_{0s} + \frac{v_s}{16\pi} \left(\left(\frac{1}{K_s} - 1 \right) (\partial_x \Phi_s(z, \bar{z}))^2 + (K_s - 1) (\partial_x \Theta_s(z, \bar{z}))^2 \right) \\ + \frac{2}{(2\pi a_0)^2} \{ g_{s\perp} \cos(\Phi_s(z, \bar{z})) - g_{c\perp} \cos(\Phi_c(z, \bar{z})) \} \\ + \frac{4t\delta}{\pi a_0} \cos(\Phi_c(z, \bar{z})/2) \cos(\Phi_s(z, \bar{z})/2) , \end{aligned} \quad (4.90)$$

wobei $g_{c/s\perp} \equiv g_{s/c}$ gilt, z und \bar{z} die chiralen Koordinaten (4.39) sind und die Kompaktifizierungsradien $K_{c/s}$ und die Ladungs- und Spingeschwindigkeiten $v_{c/s}$ durch (4.26)–(4.29)

definiert sind. Entwickelt man die Kompaktifizierungsradien $K_{c/s}$ für schwache Kopplung, so ergibt sich

$$\begin{aligned}
K_c &= 1 - \frac{1}{2\pi v_F} \left(g_{2\perp} + g_{2\perp}^V + (g_{2\parallel} + g_{2\parallel}^V - g_{1\parallel} + g_{1\parallel}^V) \right) \equiv 1 - \frac{1}{2\pi v_F} g_{c\parallel}, \\
K_c^{-1} &= 1 + \frac{1}{2\pi v_F} \left(g_{2\perp} + g_{2\perp}^V + (g_{2\parallel} + g_{2\parallel}^V - g_{1\parallel} + g_{1\parallel}^V) \right) \equiv 1 + \frac{1}{2\pi v_F} g_{c\parallel}, \\
K_s &= 1 + \frac{1}{2\pi v_F} \left(g_{2\perp} + g_{2\perp}^V - (g_{2\parallel} + g_{2\parallel}^V - g_{1\parallel} + g_{1\parallel}^V) \right) \equiv 1 + \frac{1}{2\pi v_F} g_{s\parallel}, \\
K_s^{-1} &= 1 - \frac{1}{2\pi v_F} \left(g_{2\perp} + g_{2\perp}^V - (g_{2\parallel} + g_{2\parallel}^V - g_{1\parallel} + g_{1\parallel}^V) \right) \equiv 1 - \frac{1}{2\pi v_F} g_{s\parallel}. \quad (4.91)
\end{aligned}$$

Der Hamilton-Dichte ist dann näherungsweise gegeben durch

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \mathcal{H}_{0c} + \frac{v_c}{16\pi} \left(\frac{g_{c\parallel}}{2\pi v_F} (\partial_x \Phi_c(z, \bar{z}))^2 + \frac{(-g_{c\parallel})}{2\pi v_F} (\partial_x \Theta_c(z, \bar{z}))^2 \right) \\
&\quad + \mathcal{H}_{0s} + \frac{v_s}{16\pi} \left(\frac{(-g_{s\parallel})}{2\pi v_F} (\partial_x \Phi_s(z, \bar{z}))^2 + \frac{g_{s\parallel}}{2\pi v_F} (\partial_x \Theta_s(z, \bar{z}))^2 \right) \\
&\quad + \frac{2}{(2\pi a_0)^2} (g_{s\perp} \cos(\Phi_s(z, \bar{z})) - g_{c\perp} \cos(\Phi_c(z, \bar{z}))) \\
&\quad + \frac{4t\delta}{\pi a_0} \cos(\Phi_c(z, \bar{z})/2) \cos(\Phi_s(z, \bar{z})/2) \\
&= \mathcal{H}_{0c} + \frac{v_c}{8\pi^2 v_F} g_{c\parallel} [\partial_z \Phi_c(z, \bar{z}) \partial_{\bar{z}} \Phi_c(z, \bar{z})] \\
&\quad + \mathcal{H}_{0s} - \frac{v_s}{8\pi^2 v_F} g_{s\parallel} [\partial_z \Phi_s(z, \bar{z}) \partial_{\bar{z}} \Phi_s(z, \bar{z})] \\
&\quad + \frac{2}{(2\pi a_0)^2} \{g_{s\perp} \cos(\Phi_s(z, \bar{z})) - g_{c\perp} \cos(\Phi_c(z, \bar{z}))\} \\
&\quad + \frac{4t\delta}{\pi a_0} \cos(\Phi_c(z, \bar{z})/2) \cos(\Phi_s(z, \bar{z})/2). \quad (4.92)
\end{aligned}$$

Die Mean-Field-entkoppelten Spin- und Ladungssektoren des Peierls-Hubbard-Modells mit Nächst-Nachbar-Wechselwirkung im CDW-Limes ($g_{c\perp} = g_{s\perp} = U - 2V_1 < 0$) sind gegeben durch (4.72) und (4.74)

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_c^{\text{eff}} &= \frac{v_c}{16\pi} \left(\frac{1}{K_c} (\partial_x \Phi_c(z, \bar{z}))^2 + K_c (\partial_x \Theta_c(z, \bar{z}))^2 \right) \\
&\quad - \frac{2\bar{g}_{c\perp}}{(2\pi a_0)^2} \cos(\Phi_c(z, \bar{z})) + \frac{4\bar{g}_{c\delta} h_s}{\pi a_0^2} \cos(\Phi_c(z, \bar{z})/2), \\
\mathcal{H}_s^{\text{eff}} &= \frac{v_s}{16\pi} \left(\frac{1}{K_s} (\partial_x \Phi_s(z, \bar{z}))^2 + K_s (\partial_x \Theta_s(z, \bar{z}))^2 \right) \\
&\quad + \frac{2\bar{g}_{s\perp}}{(2\pi a_0)^2} \cos(\Phi_s(z, \bar{z})) \quad (4.93)
\end{aligned}$$

mit

$$\bar{g}_{s\perp} = g_{s\perp} + 32\tilde{h}_c (t\delta)^2 < 0 \quad (4.94)$$

und $\bar{g}_{c\perp} \equiv g_{c\perp}$ und $\bar{g}_{c\delta} \equiv ta_0\delta$. Setzt man auch hier die Entwicklung von $K_{c/s}$ ein, so erhält man in führender Ordnung

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_c^{\text{eff}} = & \mathcal{H}_{0c} + \frac{v_c}{8\pi^2 v_F} g_{c\parallel} (\partial_z \Phi_c(z, \bar{z}) \partial_{\bar{z}} \Phi_c(z, \bar{z})) \\ & - \frac{2\bar{g}_{c\perp}}{(2\pi a_0)^2} \cos(\Phi_c(z, \bar{z})) + \frac{4\bar{g}_{c\delta} h_s}{\pi a_0^2} \cos(\Phi_c(z, \bar{z})/2), \end{aligned} \quad (4.95)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_s^{\text{eff}} = & \mathcal{H}_{0s} - \frac{v_s}{8\pi^2 v_F} g_{s\parallel} (\partial_z \Phi_s(z, \bar{z}) \partial_{\bar{z}} \Phi_s(z, \bar{z})) \\ & + \frac{2\bar{g}_{s\perp}}{(2\pi a_0)^2} \cos(\Phi_s(z, \bar{z})). \end{aligned} \quad (4.96)$$

Zur Aufstellung der RG-Gleichungen benötigt man die Operator-Produkt-Entwicklung, die im folgenden Abschnitt durchgeführt wird.

4.3.2 Operator-Produkt-Entwicklung

Korrelationsfunktionen, die ein Produkt zweier oder mehrerer Operatoren $\mathcal{O}_i(z_1)\mathcal{O}_j(z_2)$ enthalten, können im Rahmen der feldtheoretischen Betrachtung zurückgeführt werden auf Korrelationsfunktionen, die die Summe einzelner Operatoren enthalten. In diesem Limes ist die Operator-Produkt-Entwicklung (OPE) gegeben durch [42]

$$\mathcal{O}_i(z_1)\mathcal{O}_j(z_2) \sim \sum_k \left| \frac{a_0}{z_1 - z_2} \right|^{\Delta_i + \Delta_j - \Delta_k} c_{ij}^k \mathcal{O}_k \left(\frac{z_1 + z_2}{2} \right), \quad (4.97)$$

wobei das Argument von \mathcal{O}_k aus Symmetriegründen in dieser Form gewählt wird; es könnte genauso gut auch z_1 oder z_2 verwendet werden [42]. Dieser Ausdruck ist eine Ersetzungsregel für die Berechnung von Mehr-Punkt-Korrelationsfunktionen, in denen Erwartungswerte für Produkte von lokalen Operatoren bestimmt werden. Dabei interessiert man sich speziell für den Limes kurzer Distanzen, in dem $|z_1 - z_2| \ll |z_1 - z_l|, |z_2 - z_l|$ gilt, wenn z_l die Argumente aller anderen Operatoren sind. Die Potenz Δ_i ist die Skalendimension des Operators \mathcal{O}_i , siehe Gleichung (4.38). Die c_{ij}^k sind die Kopplungsparameter der OPE, die in die RG-Gleichungen definierend eingehen.

In der Berechnung der RG-Gleichungen des Peierls-Hubbard-Modells mit Nächst-Nachbar-Wechselwirkung und dessen Mean-Field-Theorie gibt es vier verschiedene Typen von Störoperatoren

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{1a} &= a_0^2 \partial_z \Phi_a(z, \bar{z}) \partial_{\bar{z}} \Phi_a(z, \bar{z}) & \Delta_{1a} &= 2, \\ \mathcal{O}_{2a} &= \cos(\Phi_a(z, \bar{z})) & \Delta_{2a} &= 2, \\ \mathcal{O}_{3a} &= \cos(\Phi_a(z, \bar{z})/2) & \Delta_{3a} &= \frac{1}{2}, \\ \mathcal{O}_{4a} &= \cos(\Phi_c(z, \bar{z})/2) \cos(\Phi_s(z, \bar{z})/2) & \Delta_{4a} &= 1 \end{aligned} \quad (4.98)$$

mit $a = c, s$, die im Rahmen der Normierung (4.20) dimensionslos sind. An dieser Stelle werden nur diejenigen Kopplungsparameter der OPE bestimmt, die einen endlichen Beitrag zu den RG-Gleichungen liefern.

4.3.2.1 Operator-Produkt-Entwicklung für $\mathcal{O}_{1a}\mathcal{O}_{2a}$ und $\mathcal{O}_{1a}\mathcal{O}_{3a}$

Um diese Operator-Produkt-Entwicklung zu bestimmen, ist es zweckmäßig, folgenden Zusammenhang zu betrachten

$$\begin{aligned}
a_0 \partial_{z_1} \Phi_a(z_1, \bar{z}_1) \exp[i\beta \Phi_a(z_2, \bar{z}_2)] &= a_0 \partial_{z_1} \Phi_a(z_1, \bar{z}_1) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\beta \Phi_a(z_2, \bar{z}_2))^n}{n!} \\
&\sim i a_0 \beta \partial_{z_1} \langle \Phi_a(z_1, \bar{z}_1) \Phi_a(z_2, \bar{z}_2) \rangle \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(i\beta \Phi_a(z_2, \bar{z}_2))^{(n-1)}}{(n-1)!} \\
&= i a_0 \beta \partial_{z_1} \left(-4 \ln \left| \frac{z_1 - z_2}{a_0} \right| \right) \exp(i\beta \Phi_a(z_2, \bar{z}_2)) \\
&= -2i\beta \frac{a_0}{z_1 - z_2} \exp(i\beta \Phi_a(z_2, \bar{z}_2)). \tag{4.99}
\end{aligned}$$

Analog erhält man

$$a_0 \partial_{\bar{z}_1} \Phi_a(z_1, \bar{z}_1) \exp(i\beta \Phi_a(z_2, \bar{z}_2)) = -2i\beta \frac{a_0}{\bar{z}_1 - \bar{z}_2} \exp(i\beta \Phi_a(z_2, \bar{z}_2)). \tag{4.100}$$

Damit ergibt sich mit $\beta = \pm 1$

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}_{1a}(z_1, \bar{z}_1) \mathcal{O}_{2a}(z_2, \bar{z}_2) &= a_0^2 \partial_{z_1} \Phi_a(z_1, \bar{z}_1) \partial_{\bar{z}_1} \Phi_a(z_1, \bar{z}_1) \cos(\Phi_a(z_2, \bar{z}_2)) \\
&\sim \left(\frac{-2ia_0}{\bar{z}_1 - \bar{z}_2} \right) \left(\frac{-2ia_0}{z_1 - z_2} \right) \cos(\Phi_a(z_2, \bar{z}_2)) \\
&= -4 \left| \frac{a_0}{z_1 - z_2} \right|^2 \mathcal{O}_{2a}(z_2, \bar{z}_2). \tag{4.101}
\end{aligned}$$

Daher ist $c_{1a2a}^{2a} = -4$.

Analog erhält man

$$\mathcal{O}_{1a}(z_1, \bar{z}_1) \mathcal{O}_{3a}(z_2, \bar{z}_2) = - \left| \frac{a_0}{z_1 - z_2} \right|^2 \cos(\Phi_a(z_2, \bar{z}_2)/2) = - \left| \frac{a_0}{z_1 - z_2} \right|^2 \mathcal{O}_{3a}(z_2, \bar{z}_2). \tag{4.102}$$

Daher ist $c_{1a3a}^{3a} = -1$.

4.3.2.2 Operator-Produkt-Entwicklung für $\mathcal{O}_{ia}\mathcal{O}_{ja}$ für $i, j \in \{2, 3\}$

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}_{ia}(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_{ja}(z_2, \bar{z}_2) &\sim \frac{1}{4} \sum_{\sigma, \tau = \pm} \left\{ \exp[i\sigma(\beta_i\Phi_a(z_1, \bar{z}_1) + \tau\beta_j\Phi_a(z_2, \bar{z}_2))] \right. \\
&\quad \left. \exp[-\beta_i\beta_j\langle\Phi_a(z_1, \bar{z}_1)\Phi_a(z_2, \bar{z}_2)\rangle] \right\} \\
&= \frac{1}{2} \left\{ \cos[\beta_i\Phi_a(z_1, \bar{z}_1) + \beta_j\Phi_a(z_2, \bar{z}_2)] \exp\left(4\beta_i\beta_j \ln \left|\frac{z_1 - z_2}{a_0}\right|\right) \right. \\
&\quad \left. + \cos[\beta_i\Phi_a(z_1, \bar{z}_1) - \beta_j\Phi_a(z_2, \bar{z}_2)] \exp\left(-4\beta_i\beta_j \ln \left|\frac{z_1 - z_2}{a_0}\right|\right) \right\} \\
&= \frac{1}{2} \left\{ \left|\frac{a_0}{z_1 - z_2}\right|^{-4\beta_i\beta_j} \cos[\beta_i\Phi_a(z_1, \bar{z}_1) + \beta_j\Phi_a(z_2, \bar{z}_2)] \right. \\
&\quad \left. + \left|\frac{a_0}{z_1 - z_2}\right|^{4\beta_i\beta_j} \cos[\beta_i\Phi_a(z_1, \bar{z}_1) - \beta_j\Phi_a(z_2, \bar{z}_2)] \right\}. \quad (4.103)
\end{aligned}$$

Ab dieser Stelle kommt es nun auf die $\beta_{i/j}$ an, so daß bei der weiteren Entwicklung der Kosinusterme eine Fallunterscheidung durchgeführt wird. Im Falle $\beta_i = \beta_j$ gibt es auch Beiträge durch den ersten Kosinusterm in (4.103).

- ($\beta_i = \beta_j = 1/2$) und ($\beta_i = \beta_j = 1$)

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}_{ia}(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_{ia}(z_2, \bar{z}_2) &\sim \frac{1}{2} \left|\frac{a_0}{z_1 - z_2}\right|^{-4\beta_i^2} \cos(2\beta_i\Phi_a(z_1, \bar{z}_1)) \\
&\quad - \frac{\beta_i^2}{2} \left|\frac{a_0}{z_1 - z_2}\right|^{4\beta_i^2 - 2} a_0^2 \partial_z \Phi_a(z_1, \bar{z}_1) \partial_{\bar{z}} \Phi_a(z_1, \bar{z}_1), \quad (4.104)
\end{aligned}$$

wobei nur Terme beibehalten werden, die einen Beitrag zu den c_{ij}^k liefern. Neue Störungen werden nicht generiert. Der erste Term in (4.104) ergibt nur für $\beta_i = 1/2$ einen Beitrag zu c_{33}^2 , da der Operator $\cos(2\Phi_a)$ im Falle von $\beta = 1$ irrelevant ist. Somit erhält man $c_{2a2a}^{1a} = -1/2$, $c_{3a3a}^{1a} = -1/8$ und $c_{3a3a}^{2a} = 1/2$.

- ($\beta_i = 1/2$ und $\beta_j = 1$) und ($\beta_i = 1$ und $\beta_j = 1/2$)

An dieser Stelle wird ausschließlich der zweite Term in (4.103) beibehalten, da der erste nur einen irrelevanten Beitrag liefert. Für $\beta_i = 1$ und $\beta_j = 1/2$ findet man

$$\mathcal{O}_{2a}(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_{3a}(z_2, \bar{z}_2) \sim \frac{1}{2} \left|\frac{a_0}{z_1 - z_2}\right|^2 \mathcal{O}_{3a}(z_2, \bar{z}_2) \quad (4.105)$$

und damit ist $c_{2a3a}^{3a} = 1/2$. Analog ist $c_{3a2a}^{3a} = 1/2$.

4.3.2.3 Operator-Produkt-Entwicklung für $\mathcal{O}_{1a}\mathcal{O}_4$ für $a = c, s$

An dieser Stelle wird $a = c$ gewählt. Das Ergebnis läßt sich direkt auf den Fall $a = s$ übertragen.

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{1c}(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_4(z_2, \bar{z}_2) &= \cos(\Phi_s(z_2, \bar{z}_2)/2)\mathcal{O}_{1c}(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_{3c}(z_2, \bar{z}_2) \\ &\sim -\left|\frac{a_0}{z_1 - z_2}\right|^2 \cos(\Phi_s(z_2, \bar{z}_2)/2) \cos(\Phi_c(z_2, \bar{z}_2)/2) \\ &= -\left|\frac{a_0}{z_1 - z_2}\right|^2 \mathcal{O}_4(z_2, \bar{z}_2), \end{aligned} \quad (4.106)$$

wobei im vorletzten Schritt (4.102) benutzt wurde. Analog erhält man

$$\mathcal{O}_{1s}(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_4(z_2, \bar{z}_2) \sim -\left|\frac{a_0}{z_1 - z_2}\right|^2 \mathcal{O}_4(z_2, \bar{z}_2). \quad (4.107)$$

Damit ist $c_{1a4}^4 = -1$.

4.3.2.4 Operator-Produkt-Entwicklung für $\mathcal{O}_{2a}\mathcal{O}_4$ für $a = c, s$

Genauso wie in (4.106) erhält man

$$\mathcal{O}_{2c}(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_4(z_2, \bar{z}_2) = \frac{1}{2}\left|\frac{a_0}{z_1 - z_2}\right|^2 \mathcal{O}_4(z_2, \bar{z}_2). \quad (4.108)$$

Damit ist $c_{2c4}^4 = 1/2$.

4.3.2.5 Operator-Produkt-Entwicklung für $\mathcal{O}_4\mathcal{O}_4$

Abschließend ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_4(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_4(z_2, \bar{z}_2) &\sim \mathcal{O}_{3c}(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_{3c}(z_2, \bar{z}_2)\mathcal{O}_{3s}(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_{3s}(z_2, \bar{z}_2) \\ &\sim \left|\frac{a_0}{z_1 - z_2}\right|^0 \left\{ \frac{1}{4} \left(\mathcal{O}_{2c}(z_2, \bar{z}_2) + \mathcal{O}_{2s}(z_2, \bar{z}_2) \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{16} \left(\mathcal{O}_{1c}(z_2, \bar{z}_2) + \mathcal{O}_{1s}(z_2, \bar{z}_2) \right) \right\}. \end{aligned} \quad (4.109)$$

Damit ist $c_{44}^{2a} = 1/4$ und $c_{44}^{1a} = -1/16$.

4.3.2.6 Tabelle der endlichen OPE

Zusammenfassend ergibt sich für die endlichen OPE, die von Null verschiedene Koeffizienten c_{ij}^k liefern

$$\mathcal{O}_{1a}(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_{2a}(z_2, \bar{z}_2) \sim -4 \left| \frac{a_0}{z_1 - z_2} \right|^2 \mathcal{O}_{2a}(z_2, \bar{z}_2), \quad (4.110)$$

$$\mathcal{O}_{1a}(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_{3a}(z_2, \bar{z}_2) \sim - \left| \frac{a_0}{z_1 - z_2} \right|^1 \mathcal{O}_{3a}(z_2, \bar{z}_2), \quad (4.111)$$

$$\mathcal{O}_{1a}(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_4(z_2, \bar{z}_2) \sim - \left| \frac{a_0}{z_1 - z_2} \right|^1 \mathcal{O}_4(z_2, \bar{z}_2), \quad (4.112)$$

$$\mathcal{O}_{2a}(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_{2a}(z_2, \bar{z}_2) \sim -\frac{1}{2} \left| \frac{a_0}{z_1 - z_2} \right|^2 \mathcal{O}_{1a}(z_2, \bar{z}_2), \quad (4.113)$$

$$\mathcal{O}_{2a}(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_{3a}(z_2, \bar{z}_2) \sim \frac{1}{2} \left| \frac{a_0}{z_1 - z_2} \right|^2 \mathcal{O}_{3a}(z_2, \bar{z}_2), \quad (4.114)$$

$$\mathcal{O}_{2a}(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_4(z_2, \bar{z}_2) \sim \frac{1}{2} \left| \frac{a_0}{z_1 - z_2} \right|^2 \mathcal{O}_4(z_2, \bar{z}_2), \quad (4.115)$$

$$\mathcal{O}_{3a}(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_{3a}(z_2, \bar{z}_2) \sim -\frac{1}{8} \left| \frac{a_0}{z_1 - z_2} \right|^{-1} \mathcal{O}_{1a}(z_2, \bar{z}_2) \quad (4.116)$$

$$+ \frac{1}{2} \left| \frac{a_0}{z_1 - z_2} \right|^{-1} \mathcal{O}_{2a}(z_2, \bar{z}_2), \quad (4.117)$$

$$\mathcal{O}_4(z_1, \bar{z}_1)\mathcal{O}_4(z_2, \bar{z}_2) \sim -\frac{1}{16} \left| \frac{a_0}{z_1 - z_2} \right|^0 \left(\mathcal{O}_{1c}(z_2, \bar{z}_2) + \mathcal{O}_{1s}(z_2, \bar{z}_2) \right) \quad (4.118)$$

$$+ \frac{1}{4} \left| \frac{a_0}{z_1 - z_2} \right|^0 \left(\mathcal{O}_{2c}(z_2, \bar{z}_2) + \mathcal{O}_{2s}(z_2, \bar{z}_2) \right). \quad (4.119)$$

An diesen Gleichungen lassen sich die Kopplungsparameter c_{ij}^k leicht ablesen.

4.3.3 Renormierungsgruppenzugang

Die RG-Gleichungen beschreiben den Fluß der verschiedenen Störungen um einen Fixpunkt, der von der Wirkung eines ungestörten Systems $S_0[\Phi]$ bestimmt ist; Φ steht hier stellvertretend für die Felder des Systems. Hierzu betrachtet man das freie Modell mit einigen Störungen, die mit der Stärke der Kopplungskonstanten g_k koppeln [42, 43]

$$S[\Phi] = S_0[\Phi] + \sum_k g_k \int \frac{dx d\tau}{a_0^2} \mathcal{O}_k(x, \tau). \quad (4.120)$$

Die lokalen Operatoren \mathcal{O}_k sind Funktionen der Felder Φ .

Bei der Untersuchung des erweiterten Peierls-Hubbard-Modells interessiert man sich für den Bereich niedriger Energien in der Umgebung der Fermipunkte. Im Rahmen der

Linearisierung (4.5) beschränkt man sich auf die Freiheitsgrade niedriger Energie, was der Einführung eines Cut-Offs bei kurzen Distanzen entspricht, der die Bereiche höherer Energien abschneidet. Physikalische Größen mögen zwar von diesem Cut-Off abhängen, werden aber von einer geringen Änderung des Cut-Offs nicht zu stark beeinflusst. Der RG-Prozeß basiert auf dieser Vorstellung und untersucht, wie sich die Kopplungskonstanten des Systems im Ortsraum unter geringer Änderung des Cut-Offs kurzer Distanzen verhalten.

Dazu entwickelt man die Zustandssumme bis zur zweiten Ordnung in den Kopplungen und erhält

$$\begin{aligned} \exp(-S_{\text{eff}}[\tilde{\Phi}]) \simeq \exp(-S_0[\tilde{\Phi}]) \left\{ 1 - \sum_k g_k \int \frac{dz}{a_0^2} \langle \mathcal{O}_k(z) \rangle_{>} \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sum_{i,j} g_i g_j \int \frac{dz_1 dz_2}{a_0^4} \langle \mathcal{O}_i(z_1) \mathcal{O}_j(z_2) \rangle_{>} + \dots \right\}, \end{aligned} \quad (4.121)$$

wobei die Erwartungswerte bezüglich der Fixpunkt-Wirkung $S_0[\Phi]$ zu bestimmen sind. Das Integral der ersten Ordnung löst man anhand einer Dimensionsanalyse und bekommt

$$\begin{aligned} \sum_k g_k \int dz \langle \mathcal{O}_k(z) \rangle_{>} &= \sum_k g_k \sum_{\mathbf{X}} \int d\mathbf{x} \langle \mathcal{O}_k(\mathbf{X} + \mathbf{x}) \rangle_{>} \\ &= \sum_k g_k \sum_{\mathbf{X}} \mathcal{O}_k(\mathbf{X}) a_0^{D-\Delta_k}, \end{aligned} \quad (4.122)$$

wobei a_0 der Cut-Off kurzer Distanzen, d.h. die Gitterkonstante, und Δ_k die Skalendimension des Operators \mathcal{O}_k ist. Führt man nun eine infinitesimale Reskalierung des Cut-Offs a_0 durch

$$a_0 \rightarrow (1 + \delta l) a_0 \quad \text{mit} \quad \delta l \ll 1, \quad (4.123)$$

so läßt sich deren Effekt durch Reskalieren der Kopplungen g_k kompensieren

$$g_k \rightarrow (1 + \delta l)^{D-\Delta_k} g_k \sim g_k + (D - \Delta_k) g_k \delta l. \quad (4.124)$$

Die zweite Ordnung läßt sich mit Hilfe der OPE vereinfachen. Nach dem Reskalieren des Cut-Offs $a_0 \rightarrow (1 + \delta l) a_0$ läßt sich das Integral folgendermaßen aufteilen

$$\int_{|z_1 - z_2| > (1 + \delta l) a_0} \equiv \int_{|z_1 - z_2| > a_0} - \int_{(1 + \delta l) a_0 > |z_1 - z_2| > a_0}. \quad (4.125)$$

Der erste Teil gibt wieder den ursprünglichen Beitrag, während der zweite Term mithilfe der OPE

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_k c_{ij}^k a_0^{\Delta_k - \Delta_i - \Delta_j} \int_{(1 + \delta l) a_0 > |z_1 - z_2| > a_0} \left\langle \mathcal{O}_k \left(\frac{z_1 + z_2}{2} \right) \right\rangle \quad (4.126)$$

ergibt. Das Integral liefert einen Faktor $S_D a_0^D \delta l$, wobei S_D die Fläche einer Hypersphäre mit Einheitsradius in D Dimensionen ist. Führt man nun die Beiträge erster und zweiter Ordnung zur Renormierung der Kopplungen zusammen, so erhält man

$$\frac{dg_k}{dl} = (D - \Delta_k) g_k - \sum_{i,j} c_{ij}^k g_i g_j + \dots, \quad (4.127)$$

nachdem man $g_k \rightarrow (2/S_D)g_k$ reskaliert hat. Im hier untersuchten Fall sind alle Kopplungen g_k proportional zur Fermigeschwindigkeit v_F . Für die Kopplungen $\bar{g}_k = v_F g_k$ gilt also

$$\frac{d\bar{g}_k}{dl} = (D - \Delta_k)\bar{g}_k - \frac{1}{v_F} \sum_{i,j} c_{ij}^k \bar{g}_i \bar{g}_j + \dots, \quad (4.128)$$

Abgesehen von den modellabhängigen Vorfaktoren sind die c_{ij}^k anhand der OPE schon bestimmt. Dennoch werden diese Größen im folgenden noch einmal mit allen Vorfaktoren dargestellt, da sich in ihnen die größte mögliche Fehlerquelle verbirgt. Die Aufgabe besteht dann nur noch darin, die entsprechenden Vorfaktoren zusammenzuführen und in (4.128) einzusetzen.

4.3.4 RG-Gleichungen des Mean-Field-Ansatzes

4.3.4.1 RG-Gleichungen des Mean-Field-Spinsektors

Die Störoperatoren des Mean-Field-entkoppelten Spinsektors für den Fall $U < 2V_1$ aus (4.96) sind

$$\mathcal{O}_{s\parallel}^{\text{MF}} = -\frac{v_s}{8\pi^2 v_F} \mathcal{O}_{1s}, \quad \mathcal{O}_{s\perp}^{\text{MF}} = \frac{1}{2\pi^2} \mathcal{O}_{2s} \quad (4.129)$$

mit den zugehörigen Kopplungskonstanten

$$\bar{g}_{1s} \equiv \bar{g}_{s\parallel} \quad \text{und} \quad \bar{g}_{2s} \equiv \bar{g}_{s\perp}. \quad (4.130)$$

Die entsprechenden Größen $c_{ij}^k = c_{ji}^k$ sind damit gegeben durch

$$\begin{aligned} \bar{C}_{s\parallel s\perp}^{s\perp} &= -\left(\frac{1}{2\pi^2}\right) \left(\frac{1}{2\pi^2}\right)^{-1} \frac{v_s}{8\pi^2 v_F} c_{s\parallel s\perp}^{s\perp} = \frac{v_s}{2\pi^2 v_F}, \\ \bar{C}_{s\perp s\perp}^{s\parallel} &= \left(\frac{1}{2\pi^2}\right)^2 \left(-\frac{v_s}{8\pi^2 v_F}\right)^{-1} c_{s\perp s\perp}^{s\parallel} = \frac{v_F}{\pi^2 v_s}. \end{aligned} \quad (4.131)$$

Eingesetzt in (4.128) sind die RG-Gleichungen für den Mean-Field-Spinsektor gegeben durch ($D = \Delta_{s\parallel} = 2$ und $v_s \simeq v_F$)

$$\frac{d\bar{g}_{s\parallel}(l)}{dl} = -\frac{1}{\pi^2 v_F} \bar{g}_{s\perp}(l)^2, \quad (4.132)$$

$$\frac{d\bar{g}_{s\perp}(l)}{dl} = -\frac{1}{\pi^2 v_F} \bar{g}_{s\parallel}(l) \bar{g}_{s\perp}(l), \quad (4.133)$$

wobei der Beitrag $\bar{g}_{s\parallel} \bar{g}_{s\perp}$ doppelt auftritt. Diese Gleichungen wurden zuerst von Kosterlitz und Thouless hergeleitet [44]. Da die Kopplungskonstanten im CDW-Limes ($U < 2V_1$) negativ sind, wie aus (4.31) und (4.71) bekannt ist,

$$\bar{g}_{s\parallel}^0 = g_{2\perp} + g_{2\perp}^V - \left(g_{2\parallel} + g_{2\parallel}^V - g_{1\parallel} + g_{1\parallel}^V\right) = -|U - 2V| a_0 < 0, \quad (4.134)$$

$$\bar{g}_{s\perp}^0 = g_{1\perp} - g_{1\perp}^V + 32|\tilde{h}_c|(t\delta)^2 = -|U - 2V| a_0 + 32\delta^2 |\tilde{h}_c| t a_0 < 0, \quad (4.135)$$

so folgt für die Beträge

$$\frac{d|\bar{g}_{s\parallel}(l)|}{dl} = \frac{1}{\pi^2 v_F} |\bar{g}_{s\perp}(l)|^2, \quad (4.136)$$

$$\frac{d|\bar{g}_{s\perp}(l)|}{dl} = \frac{1}{\pi^2 v_F} |\bar{g}_{s\parallel}(l)| |\bar{g}_{s\perp}(l)|. \quad (4.137)$$

Diese gekoppelten Differentialgleichungen kann man mithilfe der Invarianten $\bar{g}_{s\parallel}^2 - \bar{g}_{s\perp}^2$ lösen, da

$$\frac{d}{dl} \left(\bar{g}_{s\parallel}^2 - \bar{g}_{s\perp}^2 \right) = 0 \quad (4.138)$$

gilt. Man wählt den Ansatz

$$|\bar{g}_{s\parallel}| = C \cosh(\theta(l)), \quad |\bar{g}_{s\perp}| = C |\sinh(\theta(l))|, \quad (4.139)$$

so daß $\theta(l)$ und $C > 0$ zu bestimmen bleiben. Aus dem Vergleich von (4.133) und (4.139) folgt

$$\frac{d\theta(l)}{dl} = \frac{C}{v_F \pi^2} \sinh(\theta(l)). \quad (4.140)$$

Diese Gleichung löst man durch Separation der Variablen und erhält

$$\left| \tanh\left(\frac{\theta(l)}{2}\right) \right| = \left| \tanh\left(\frac{\theta(0)}{2}\right) \right| \exp\left(\frac{C}{v_F \pi^2} l\right). \quad (4.141)$$

Man erkennt, daß $\theta(l) > \theta(0)$, d.h. $\theta(l)$ wächst an und damit $|\bar{g}_{s\parallel}|$ und $|\bar{g}_{s\perp}|$. Wenn l zu groß wird, erhält man für die obige Differentialgleichung keine Lösung mehr. Dies stellt aber kein grundsätzliches Problem dar, da die RG-Gleichungen (4.133) nur für kleine Kopplungskonstanten gelten und $C \propto \delta \ll 1$ ist. Das wesentliche Ergebnis besteht darin, daß die Kopplungen im Spinsektor divergieren: sie sind relevant und generieren daher eine endliche Lücke im Spinsektor.

4.3.4.2 RG-Gleichungen des Mean-Field-Ladungssektors

Die vollständigen Operatoren des Mean-Field-entkoppelten Ladungssektors aus (4.95) sind

$$\tilde{\mathcal{O}}_{c\parallel}^{\text{MF}} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{v_c}{v_F} \mathcal{O}_{1c}, \quad \tilde{\mathcal{O}}_{c\perp}^{\text{MF}} = -\frac{1}{4\pi^2} \mathcal{O}_{2c}, \quad \tilde{\mathcal{O}}_{\delta}^{\text{MF}} = \frac{4|h_s|}{\pi} \mathcal{O}_{3c} \quad (4.142)$$

mit den zugehörigen Kopplungskonstanten

$$g_{1c} \equiv \bar{g}_{c\parallel}, \quad g_{2c} \equiv \bar{g}_{c\perp}, \quad g_{3c} \equiv \bar{g}_{c\delta}. \quad (4.143)$$

Die entsprechenden Kopplungsparameter \bar{C}_{ij}^k sind damit gegeben durch

$$\bar{C}_{c\parallel c\perp}^{c\perp} = -\frac{1}{2\pi^2} \frac{v_c}{v_F}, \quad \bar{C}_{c\parallel c\delta}^{c\delta} = -\frac{1}{8\pi^2} \frac{v_c}{v_F}, \quad (4.144)$$

$$\bar{C}_{c\perp c\perp}^{c\parallel} = -\frac{1}{\pi^2} \frac{v_F}{v_c}, \quad \bar{C}_{c\perp c\delta}^{c\delta} = -\frac{1}{4\pi^2}, \quad (4.145)$$

$$\bar{C}_{c\delta c\delta}^{c\parallel} = -16|h_s|^2 \frac{v_F}{v_c}, \quad \bar{C}_{c\delta c\delta}^{c\perp} = -16|h_s|^2. \quad (4.146)$$

Eingesetzt in (4.128) ergeben sich die RG-Gleichungen für den Mean-Field-Ladungssektor

$$\frac{d\bar{g}_{c\parallel}}{dl} = \frac{1}{v_F\pi^2} [\bar{g}_{c\perp}^2 + 16\pi^2|h_s|^2\bar{g}_{c\delta}^2], \quad (4.147)$$

$$\frac{d\bar{g}_{c\perp}}{dl} = \frac{1}{v_F\pi^2} [\bar{g}_{c\parallel}\bar{g}_{c\perp} + 16\pi^2|h_s|^2\bar{g}_{c\delta}^2], \quad (4.148)$$

$$\frac{d\bar{g}_{c\delta}}{dl} = \bar{g}_{c\delta} + \frac{1}{4\pi^2v_F} (2\bar{g}_{c\perp} + \bar{g}_{c\parallel}) \bar{g}_{c\delta}. \quad (4.149)$$

Da hier die RG-Gleichungen im CDW-Regime ($U < 2V_1$) untersucht werden sollen, werden sie hier für die Beträge der Kopplungskonstanten aufgestellt. Die Anfangswerte ergeben sich aus (4.31) und (4.95)

$$\bar{g}_{c\parallel}^0 = g_{2\perp} + g_{2\perp}^V + (g_{2\parallel} + g_{2\parallel}^V - g_{1\parallel} + g_{1\parallel}^V) = (U + 6V_1) a_0 > 0, \quad (4.150)$$

$$\bar{g}_{c\perp}^0 = g_{3\perp} - g_{3\perp}^V = (U - 2V_1) a_0 < 0, \quad (4.151)$$

so daß folgt

$$\frac{d|\bar{g}_{c\parallel}|}{dl} = \frac{1}{v_F\pi^2} [|\bar{g}_{c\perp}|^2 + 16\pi^2|h_s|^2|\bar{g}_{c\delta}|^2], \quad (4.152)$$

$$\frac{d|\bar{g}_{c\perp}|}{dl} = \frac{1}{v_F\pi^2} [|\bar{g}_{c\parallel}||\bar{g}_{c\perp}| - 16\pi^2|h_s|^2|\bar{g}_{c\delta}|^2], \quad (4.153)$$

$$\frac{d|\bar{g}_{c\delta}|}{dl} = |\bar{g}_{c\delta}| - \frac{1}{4\pi^2v_F} (2|\bar{g}_{c\perp}| + |\bar{g}_{c\parallel}|) |\bar{g}_{c\delta}|. \quad (4.154)$$

Diese gekoppelten Differentialgleichungen lassen sich numerisch aufintegrieren. Die RG-Gleichungen sind perturbativ und gelten nur im Limes schwacher Wechselwirkung. Falls die Anfangswerte der Kopplungskonstanten klein genug sind, kann sich der Fluß der RG-Gleichungen in eine bestimmte Richtung im Raum der Kopplungskonstanten entwickeln, bevor er das Regime schwacher Wechselwirkung verläßt. Man beobachtet, welche Kopplungskonstanten im RG-Fluß klein bleiben und damit irrelevant sind, und welche der Kopplungskonstanten gemeinsam, d.h. in fester Relation zueinander, divergieren,.

Die im Rahmen dieser Arbeit erstellten numerischen Lösung der Mean-Field-RG-Gleichungen des Ladungssektors ergibt, daß – außer bei sehr kleinen Startwerten für $g_{c\delta}$ – immer der Dimerisierungsterm zuerst divergiert. Damit bestimmt also der Peierls-Term im größten Teil des Phasenraums die Physik des Systems, außer im Bereich sehr kleiner Dimerisierung, wo der CDW-Term dominant ist. Für endliche Werte der Coulomb-Wechselwirkung darf man einen kritischen Wert δ_{crit} der Peierls-Dimerisierung erwarten, unterhalb dessen die CDW-Phase und die Peierls-Phase koexistieren. Dies ist in Übereinstimmung mit den Resultaten der semiklassischen Untersuchungen aus Abschnitt 4.2.

4.3.5 RG-Gleichungen des erweiterten Peierls-Hubbard-Modells

Die vollständigen Operatoren des hier untersuchten Modells (4.92) sind

$$\mathcal{O}_{c\parallel} = \frac{2v_c}{(4\pi)^2 v_F} \mathcal{O}_{1c}, \quad \mathcal{O}_{s\parallel} = -\frac{v_s}{(4\pi)^2 v_F} \mathcal{O}_{1s}, \quad (4.155)$$

$$\mathcal{O}_{c\perp} = -\frac{2}{(2\pi)^2} \mathcal{O}_{2c}, \quad \mathcal{O}_{s\perp} = \frac{2}{(2\pi)^2} \mathcal{O}_{2s}, \quad (4.156)$$

$$\mathcal{O}_\delta = \frac{4}{\pi} \mathcal{O}_{1c} \quad (4.157)$$

mit den zugehörigen Kopplungskonstanten

$$\bar{g}_{1c} \equiv \bar{g}_{c\parallel}, \quad \bar{g}_{1s} \equiv \bar{g}_{s\parallel}, \quad \bar{g}_{2c} \equiv \bar{g}_{c\perp}, \quad \bar{g}_{2s} \equiv \bar{g}_{s\perp}, \quad \bar{g}_4 \equiv \bar{g}_\delta \equiv t\delta a_0. \quad (4.158)$$

Die Größen \tilde{C}_{ij}^k sind damit gegeben durch

$$\tilde{C}_{c\parallel c\parallel}^{c\perp} = -\frac{v_c}{v_F} \frac{1}{2\pi^2}, \quad \tilde{C}_{s\parallel s\parallel}^{s\perp} = \frac{v_s}{v_F} \frac{1}{2\pi^2}, \quad (4.159)$$

$$\tilde{C}_{c\parallel \delta}^\delta = -\frac{v_c}{v_F} \frac{1}{8\pi^2}, \quad \tilde{C}_{s\parallel \delta}^\delta = \frac{v_s}{v_F} \frac{1}{8\pi^2}, \quad (4.160)$$

$$\tilde{C}_{c\perp c\perp}^{c\parallel} = -\frac{v_F}{v_c} \frac{1}{\pi^2}, \quad \tilde{C}_{s\perp s\perp}^{1s} = \frac{v_F}{v_s} \frac{1}{\pi^2}, \quad (4.161)$$

$$\tilde{C}_{c\perp \delta}^\delta = -\frac{1}{(2\pi)^2}, \quad \tilde{C}_{s\perp \delta}^\delta = \frac{1}{(2\pi)^2}, \quad (4.162)$$

$$\tilde{C}_{\delta\delta}^{c\parallel} = -8\frac{v_F}{v_c}, \quad \tilde{C}_{\delta\delta}^{s\parallel} = 8\frac{v_F}{v_s}, \quad (4.163)$$

$$\tilde{C}_{\delta\delta}^{c\perp} = -8, \quad \tilde{C}_{\delta\delta}^{s\perp} = 8. \quad (4.164)$$

Setzt man diese nun in (4.128) ein, erhält man die Renormierungsgruppengleichungen einschließlich der zweiten Ordnung

$$\frac{d\bar{g}_{c\parallel}}{dl} = \frac{1}{v_F \pi^2} [\bar{g}_{c\perp}^2 + 8\pi^2 \bar{g}_\delta^2], \quad (4.165)$$

$$\frac{d\bar{g}_{c\perp}}{dl} = \frac{1}{v_F \pi^2} [\bar{g}_{c\perp} \bar{g}_{c\parallel} + 8\pi^2 \bar{g}_\delta^2], \quad (4.166)$$

$$\frac{d\bar{g}_{s\parallel}}{dl} = -\frac{1}{v_F \pi^2} [\bar{g}_{s\perp}^2 + 8\pi^2 \bar{g}_\delta^2], \quad (4.167)$$

$$\frac{d\bar{g}_{s\perp}}{dl} = -\frac{1}{v_F \pi^2} [\bar{g}_{s\perp} \bar{g}_{s\parallel} + 8\pi^2 \bar{g}_\delta^2], \quad (4.168)$$

$$\frac{d\bar{g}_\delta}{dl} = \bar{g}_\delta + \frac{1}{8v_F \pi^2} [(2\bar{g}_{c\perp} + \bar{g}_{c\parallel}) \bar{g}_\delta - (2\bar{g}_{s\perp} + \bar{g}_{s\parallel}) \bar{g}_\delta]. \quad (4.169)$$

Hierbei wurden $v_c \simeq v_F$ und $v_s \simeq v_F$ gesetzt, da die Differenzen zu v_F erst zur dritten Ordnung in den Kopplungskonstanten beitragen.

Das numerische Aufintegrieren der RG-Gleichungen im CDW-Limes liefert qualitativ dasselbe Ergebnis wie in der Mean-Field-Theorie. Eine weitergehende Analyse ist also nicht erforderlich.

4.3.6 Zusammenfassung

Ausgangspunkt der feldtheoretischen Untersuchungen am erweiterten Peierls-Hubbard-Modell war die Frage, welcher Mechanismus die isolierende Phase verursacht. Die Antwort ist eindeutig: der Peierls-Mechanismus dominiert die Physik. In Anwesenheit einer Peierls-Verzerrung bildet sich stets eine Spinlücke aus, die im Mott-Hubbard-Isolator nicht auftritt. Dieses Verhalten wird in der semiklassischen Näherung und Mean-Field-Behandlung des feldtheoretischen Modells beobachtet und durch die Renormierungsgruppengleichungen bestätigt. Auch die Ladungslücke im Peierls-Mott-Isolator wird hauptsächlich durch die Dimerisierung getrieben.

Im CDW-Regime tritt der Peierls-Term in Konkurrenz zur Ladungsdichtewelle, welche durch die elektronischen Korrelationen verursacht wird. In diesem Fall zeigen semiklassische Näherung und Mean-Field-Behandlung in Übereinstimmung mit den RG-Gleichungen, daß es einen Bereich der Koexistenz beider Ordnungsparameter gibt. Erst bei einem endlichen Wert der Peierls-Dimerisierung $\delta_{\text{crit}} > 0$ wird die CDW-Phase vollständig verdrängt. Diese Ergebnisse sind in Übereinstimmung mit Resultaten der numerischen DMRG [40].

Die meisten realen Materialien sind Peierls-Mott-Isolatoren. Für diese Isolatoren spielt der Peierls-Term die Hauptrolle bei der Bildung des isolierenden Zustands. Dies bedeutet, daß eine störungstheoretische Behandlung des erweiterten Peierls-Hubbard-Modells in der Coulomb-Wechselwirkung ausgehend vom Peierls-Modell sinnvoll ist. Da in diesen Materialien die Coulomb-Parameter in der Größenordnung der Bandbreite liegen, bleibt jedoch zu klären, ob diese störungstheoretische Behandlung auch quantitativ erfolgreich sein kann. Dieser Frage wird im nächsten Kapitel nachgegangen.

5 Störungstheorie in der Coulomb-Wechselwirkung

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels wird der störungstheoretische Ansatz vorgestellt, im Rahmen dessen das erweiterte Peierls-Hubbard-Modell in den folgenden Abschnitten untersucht wird. Die auf diese Art gewonnenen analytischen Ausdrücke für die Grundzustandsenergie, die Einteilchenlücke und die optischen Anregungen werden dargestellt. Dabei wird die Störungstheorie in zweiter Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung für feste Dimerisierung durchgeführt. Neben der Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie werden die optischen Anregungen des erweiterten Peierls-Hubbard-Modells auch im Rahmen der Wannier-, der Two-Step- und der Downfolding-Störungstheorie untersucht.

5.1 Störungstheoretische Ansätze

Grundsätzlich ist die Störungstheorie ein wohlbekanntes Verfahren [45], um die Koeffizienten einer Taylor-Reihe systematisch zu bestimmen. Die Grundzustände für $N = L$ und $N = L + 1$ Teilchen sind trivial entartet, so daß die nichtentartete Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie angewendet werden kann. Da die Brillouin-Wigner-Störungstheorie nicht größenkonsistent ist, wird sie nicht weiter verfolgt.

Bei der Berechnung der optischen Anregungen führt die nichtentartete Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie nicht zu einer zufriedenstellenden Beschreibung der Exzitonen des Systems. Daher wendet man fast-entartete Störungstheorie an und startet von den exzitonischen Zuständen

$$\begin{aligned} \text{Singulett : } |s\rangle &= \sum_k w_s(k) |k\rangle_s, \\ \text{Triplett : } |t\rangle &= \sum_k w_t(k) |k\rangle_t \end{aligned} \quad (5.1)$$

mit der Normierung $\sum_k [w_{(s/t)}(k)]^2 = 1$ und

$$|k\rangle_{(s/t)} \equiv \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\hat{b}_{k,\uparrow}^+ \hat{a}_{k,\uparrow} \pm \hat{b}_{k,\downarrow}^+ \hat{a}_{k,\downarrow} \right) |\text{FS}\rangle, \quad (5.2)$$

wobei das obere (untere) Zeichen für das Singulett (Triplett) zu wählen ist. Der Grundzustand des nichtwechselwirkenden Systems ist gegeben durch

$$|\text{FS}\rangle \equiv |\text{Fermisee}\rangle = \prod_{k,\sigma} \hat{a}_{k,\sigma}^+ |\text{Vakuum}\rangle. \quad (5.3)$$

Bei verschwindender Coulomb-Abstoßung sind Triplett und Singulett reine Ein-Teilchen-Loch-Anregungen bei Impuls $p = -\pi/(2a_0)$ (mit $w_{(s/t)}(p) = 1$ und $w_{(s/t)}(k \neq p) = 0$ sonst), da dies der Zustand mit der niedrigstmöglichen Energie ist. Durch das Anschalten der Hubbard-Wechselwirkung und der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung entstehen energetisch günstigere gemischte Zustände, die in der entarteten Störungstheorie von vornherein berücksichtigt werden.

In erster Ordnung ist dieser Zugang identisch zur Wannier-Störungstheorie. Es gibt mehrere Möglichkeiten, diesen Zugang zur zweiten Ordnung fortzusetzen, die in den folgenden Abschnitten erläutert werden.

5.1.1 Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie

Der Hamilton-Operator der Störungstheorie ist das erweiterte Peierls-Hubbard-Modell

$$\hat{H} = \hat{H}^P + \hat{W}, \quad (5.4)$$

wobei das ungestörte System durch das reine Peierls-Modell mit Hüpfamplitude t und Dimerisierung δ ,

$$\hat{H}^P = -t \sum_{\sigma} \sum_{l=1}^L \left(1 + (-1)^l \delta\right) \left(\hat{c}_{l,\sigma}^+ \hat{c}_{l+1,\sigma} + \hat{c}_{l+1,\sigma}^+ \hat{c}_{l,\sigma}\right), \quad (5.5)$$

und die Störung durch

$$\hat{W} = U \sum_{\sigma} \sum_{l=1}^L \left(\hat{n}_{l,\uparrow} - \frac{1}{2}\right) \left(\hat{n}_{l,\downarrow} - \frac{1}{2}\right) + V \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} \frac{1}{2|r|} (\hat{n}_l - 1) (\hat{n}_{l+r} - 1) \quad (5.6)$$

gegeben ist. Das Eigenwertproblem von \hat{H}^P ist im Kapitel 2.1 durch die Transformation (3.5) bereits gelöst worden. Die Dispersion des ungestörten Systems ist durch $\pm E(k)$ mit

$$E(k) = \sqrt{\epsilon(k)^2 + \Delta(k)^2} = 2t \sqrt{\cos(k)^2 + \delta^2 \sin(k)^2} \quad (5.7)$$

gegeben, wobei die Gitterkonstante von jetzt an $a_0 = 1$ gesetzt wird.

Um nun die Eigenenergie E_x eines bestimmten Eigenzustandes $|x\rangle$ von \hat{H} zu berechnen, setzt man eine Potenzreihenentwicklung in den Störungen U und V an. Man erhält die üblichen Ausdrücke für die Energien in führender, erster und zweiter Ordnung [45]

$$E_x^{(0)} = \langle x | \hat{H}^P | x \rangle, \quad (5.8)$$

$$E_x^{(1)} = E_x^U + E_x^V = \langle x | \hat{W} | x \rangle, \quad (5.9)$$

$$E_x^{(2)} = E_x^{U^2} + E_x^{V^2} + E_x^{UV} = \sum_{|m\rangle} \frac{|\langle x | \hat{W} | m \rangle|^2}{E_x^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad (5.10)$$

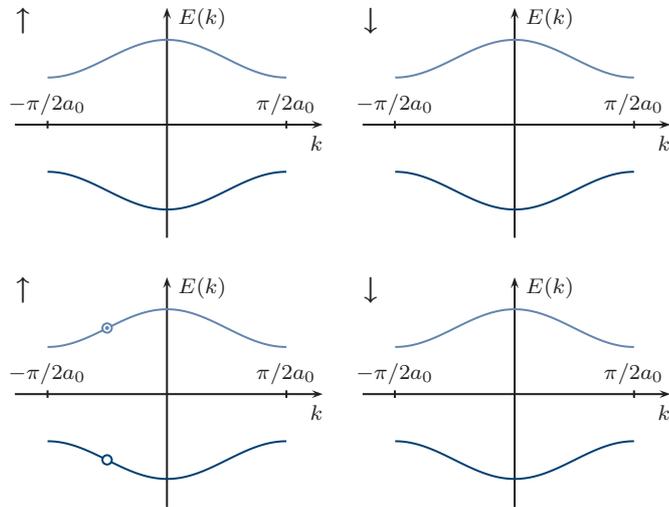


Abbildung 5.1 Beispiel für eine Null-Teilchen-Loch-Anregung (oben) und eine Ein-Teilchen-Loch-Anregung im Spin- \uparrow -Sektor (unten).

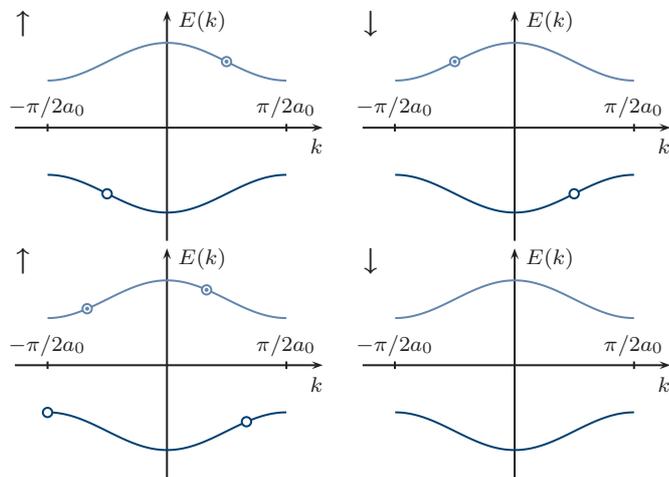


Abbildung 5.2 Beispiel für eine Zwei-Teilchen-Loch-Anregung mit entgegengesetzten (oben) und eine mit parallelen Spins (unten).

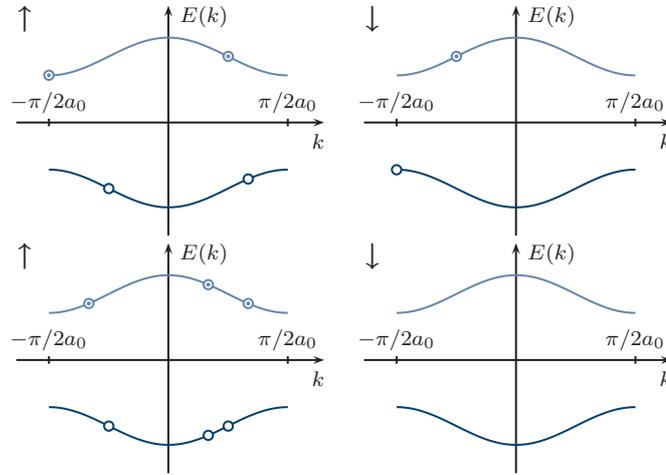


Abbildung 5.3 Beispiel für eine Drei-Teilchen-Loch-Anregung mit entgegengesetzten (oben) und eine mit parallelen Spins (unten).

wobei die Zustände $|m\rangle \neq |x\rangle$ im letzten Ausdruck alle vom Zustand $|x\rangle$ aus erreichbaren Anregungen sind. Im vorliegenden Fall können die möglichen Anregungen Null-, Ein-, Zwei- oder Drei-Teilchen-Loch-Anregungen sein, die sich auf die Spinsektoren \uparrow und \downarrow verteilen, siehe Abbildungen 5.1, 5.2 und 5.3.

Zur Vereinfachung der Schreibweise bezeichnet im folgenden ein Zustand der Art

$$|rs\rangle \quad (5.11)$$

eine Anregung mit r Teilchen-Loch-Anregungen im Spin- \uparrow -Sektor und s Teilchen-Loch-Anregungen im Spin- \downarrow -Sektor.

Schon die Berechnung der Energiebeiträge zweiter Ordnung ist sehr aufwendig, so daß die Störungsreihe nach der zweiten Ordnung abgebrochen wird. Inwieweit diese Näherung ein zufriedenstellendes Ergebnis liefert, wird im folgenden Kapitel 6 genauer untersucht.

5.1.2 Wannier-Störungstheorie für optische Anregungen

Es seien \hat{P} und \hat{Q} Projektoren mit $\hat{P} + \hat{Q} = \hat{1}$, so daß \hat{P} auf den Unterraum des zu untersuchenden Zustandes $|x_n\rangle$ projiziert, im Falle der optischen Anregungen also auf den Unterraum mit einem Exziton, d.h. einer Ein-Teilchen-Loch-Anregung. Damit kann man schreiben

$$\begin{aligned} \hat{H} &= [\hat{H}^P + \hat{P}\hat{W}\hat{P}] + [\hat{Q}\hat{W}\hat{P} + \hat{P}\hat{W}\hat{Q} + \hat{Q}\hat{W}\hat{Q}] \\ &\equiv \hat{H}_0 + \hat{H}_\perp, \end{aligned} \quad (5.12)$$

wobei \hat{H}_0 das ungestörte System und \hat{H}_\perp die Störung ist. Der Zustand $|x_n\rangle$ sei ein Eigenzustand von \hat{H}_0 , so daß

$$\hat{H}_0|x_n\rangle = \epsilon_n|x_n\rangle. \quad (5.13)$$

Dann gibt die Störungstheorie für den gesuchten, noch nicht normierten Zustand bis zur ersten Ordnung

$$|X_n\rangle = |x_n\rangle + \sum_{|m\rangle \neq |x_n\rangle} \frac{|m\rangle \langle m|\hat{H}_\perp|x_n\rangle}{\epsilon_n - E_m^{(0)}}. \quad (5.14)$$

Kennt man diesen Zustand, so läßt sich daraus die Energie bis zur zweiten Ordnung gewinnen,

$$E_n^{(2)} = \epsilon_n + \sum_{|m\rangle \neq |x_n\rangle} \frac{\langle x_n|\hat{H}_\perp|m\rangle \langle m|\hat{H}_\perp|x_n\rangle}{\epsilon_n - E_m^{(0)}}, \quad (5.15)$$

wobei $E_m^{(0)} = \langle m|\hat{H}_0|m\rangle$ ist. Dabei kann $|m\rangle$ als ein Eigenzustand des Operators der kinetischen Energie \hat{H}^P gewählt werden, denn Korrekturen sind von höherer Ordnung.

Das Verfahren der Wannier-Störungstheorie setzt sich aus zwei Schritten zusammen.

Schritt 1: Man berechnet die Eigenzustände $|x_n\rangle$ und die zugehörigen Eigenenergien ϵ_n , indem man $\hat{H}^P + \hat{W}$ bis einschließlich der ersten Ordnung auswertet und diagonalisiert, siehe (5.13).

Schritt 2: Man bestimmt die Beiträge zweiter Ordnung zur Energie $E_n^{(2)}$ durch die Auswertung von (5.15), wobei die Zustände $|m\rangle$ Null-, Zwei- und Drei-Teilchen-Loch-Anregungen und Eigenzustände der kinetischen Energie \hat{H}^P sind. In diesem Unterraum gilt $\hat{H}_\perp = \hat{W}$.

5.1.3 Two-Step-Störungstheorie für optische Anregungen

5.1.3.1 Grundprinzip

Bei dieser Methode betrachtet man, wie sich das System unter der Einwirkung zweier Störungen verhält, indem man zunächst das Problem für eine der Störungen löst und dieses Ergebnis danach für die Lösung des vollen Problems heranzieht. Der Hamilton-Operator besteht aus dem kinetischen Term und zwei Störtermen

$$\hat{H} = \hat{H}^P + \hat{W} = \hat{H}^P + \hat{V}_A + \hat{V}_B. \quad (5.16)$$

Man definiere die Projektoren \hat{P}_n und \hat{Q}_n so, daß \hat{P}_n auf den Unterraum der n -Teilchen-Loch-Anregungen projiziert ($n = 0, 1$ fest) und $\hat{P}_n + \hat{Q}_n = \hat{1}$ gilt. Ausgedrückt in diesen Projektoren ist der Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}^P + \left[\hat{P}_n \hat{W} \hat{Q}_n + \hat{Q}_n \hat{W} \hat{P}_n + \hat{Q}_n \hat{W} \hat{Q}_n \right] + \left[\hat{P}_n \hat{W} \hat{P}_n \right] \\ &\equiv \hat{H}^P + \hat{V}_A + \hat{V}_B \end{aligned} \quad (5.17)$$

mit

$$\hat{V}_A = \hat{P}_n \hat{W} \hat{Q}_n + \hat{Q}_n \hat{W} \hat{P}_n + \hat{Q}_n \hat{W} \hat{Q}_n, \quad (5.18)$$

$$\hat{V}_B = \hat{P}_n \hat{W} \hat{P}_n. \quad (5.19)$$

Wie der Name dieses störungstheoretischen Ansatzes schon besagt, besteht dieses Verfahren aus zwei Schritten.

Schritt 1: Zunächst betrachtet man

$$\hat{H}_A = \hat{H}^P + \hat{V}_A. \quad (5.20)$$

In einer störungstheoretischen Entwicklung (Rayleigh-Schrödinger) erhält man für die Eigenzustände $|n\rangle$ von \hat{H}_A

$$|n\rangle = Z_n \left\{ |n^0\rangle + \sum_{|m\rangle} \frac{|m\rangle \langle m | \hat{V}_A | n^0 \rangle}{E_{n^0}^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots \right\}, \quad (5.21)$$

wobei die Zustände $|n^0\rangle$ und $|m\rangle$ Eigenzustände von \hat{H}^P sind mit

$$E_{n^0}^{(0)} = \langle n^0 | \hat{H}^P | n^0 \rangle \quad \text{und} \quad E_m^{(0)} = \langle m | \hat{H}^P | m \rangle. \quad (5.22)$$

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Störungstheorie nur bis einschließlich der zweiten Ordnung durchgeführt. Daher folgt aus der Normierung des Zustandes $|n\rangle$

$$1 = |Z_n|^2 \left[1 + \sum_{|m\rangle} \frac{\langle n^0 | \hat{V}_A | m \rangle \langle m | \hat{V}_A | n^0 \rangle}{(E_{n^0}^{(0)} - E_m^{(0)})^2} \right]. \quad (5.23)$$

Damit ist

$$|Z_n|^2 = 1 - \sum_{|m\rangle} \frac{|\langle n^0 | \hat{V}_A | m \rangle|^2}{(E_{n^0}^{(0)} - E_m^{(0)})^2}. \quad (5.24)$$

Im ersten Schritt dieser Methode werden also die Zustände $|n\rangle$ ‘von Anregungen umgeben’, sie werden daher auch *dressed states* genannt.

Schritt 2: Nun wird die (fast-entartete) Störungstheorie für \hat{V}_B anhand der Eigenzustände $|n\rangle$ von \hat{H}_A durchgeführt. Die Matrix zu $\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{V}_B$ wird in der Basis dieser Eigenzustände diagonalisiert,

$$H(n_1, n_2) = \langle n_1 | \hat{H} | n_2 \rangle. \quad (5.25)$$

Diese Two-Step-Störungstheorie wird zur Berechnung der Energien der optischen Anregungen herangezogen. Die Anwendung dieser Methode zur Berechnung der Grundzustandsenergie liefert dasselbe Ergebnis wie die Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie, wie kurz gezeigt wird.

5.1.3.2 Berechnung der Grundzustandsenergie

Da der Grundzustand $|0\rangle$ nicht entartet ist, ist auch der Unterraum der Null-Teilchen-Loch-Anregungen nicht entartet. Damit ist

$$|n\rangle = |0\rangle = (|\text{FS}\rangle + |1\rangle) Z_0, \quad (5.26)$$

$$|n^0\rangle = |\text{FS}\rangle. \quad (5.27)$$

Daher erhält man

$$\begin{aligned} E_0 &= \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle \\ &= (|Z_0|^2 - 1) \langle \text{FS} | \hat{H}^{\text{P}} | \text{FS} \rangle + \langle \text{FS} | \hat{H}^{\text{P}} + \hat{W} | \text{FS} \rangle + \langle 1 | \hat{W} | \text{FS} \rangle + \langle \text{FS} | \hat{W} | 1 \rangle + \langle 1 | \hat{H}^{\text{P}} | 1 \rangle \\ &= \langle \text{FS} | \hat{H}^{\text{P}} + \hat{W} | \text{FS} \rangle \\ &\quad + \sum_{|m\rangle \neq |\text{FS}\rangle} \left| \langle \text{FS} | \hat{W} | m \rangle \right|^2 \left\{ \frac{-E_0^{(0)}}{\left(E_0^{(0)} - E_m^{(0)}\right)^2} + \frac{E_m^{(0)}}{\left(E_0^{(0)} - E_m^{(0)}\right)^2} + \frac{2}{\left(E_0^{(0)} - E_m^{(0)}\right)} \right\} \\ &= \langle \text{FS} | \hat{H}^{\text{P}} + \hat{W} | \text{FS} \rangle + \sum_{|m\rangle \neq |\text{FS}\rangle} \frac{\left| \langle \text{FS} | \hat{W} | m \rangle \right|^2}{E_0^{(0)} - E_m^{(0)}}. \end{aligned} \quad (5.28)$$

Dies ist derselbe Ausdruck für die Grundzustandsenergie wie in der Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie.

5.1.4 Downfolding-Störungstheorie für optische Anregungen

5.1.4.1 Grundprinzip

Die Downfolding-Störungstheorie verfolgt einen selbstkonsistenten Ansatz, der hier kurz vorgestellt wird. Die Schrödinger-Gleichung ist gegeben durch

$$\hat{H}|\Psi\rangle = (\hat{T} + \hat{W})|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle. \quad (5.29)$$

Man definiere zwei Projektoren \hat{P} und \hat{Q} , so daß $\hat{P} + \hat{Q} = \hat{1}$ gilt und

$$\begin{aligned} \hat{H}|\Psi\rangle &= \hat{H}(\hat{P} + \hat{Q})|\Psi\rangle = \hat{H}|\varphi\rangle + \hat{H}|\chi\rangle, \\ |\varphi\rangle &= \hat{P}|\Psi\rangle, \\ |\chi\rangle &= \hat{Q}|\Psi\rangle \end{aligned} \quad (5.30)$$

mit $\langle \varphi | \chi \rangle = 0$. Setzt man dies in Gleichung (5.29) ein, so ergibt sich

$$\hat{P}\hat{H}|\varphi\rangle + \hat{P}\hat{H}|\chi\rangle + \hat{Q}\hat{H}|\varphi\rangle + \hat{Q}\hat{H}|\chi\rangle = E|\varphi\rangle + E|\chi\rangle. \quad (5.31)$$

Daraus erhält man

$$\begin{aligned} E|\varphi\rangle &= \hat{P}\hat{H}|\varphi\rangle + \hat{P}\hat{H}|\chi\rangle, \\ E|\chi\rangle &= \hat{Q}\hat{H}|\varphi\rangle + \hat{Q}\hat{H}|\chi\rangle. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Aus der zweiten Gleichung ergibt sich der Ausdruck

$$|\chi\rangle = \hat{Q} (E - \hat{H})^{-1} \hat{Q} \hat{H} |\varphi\rangle, \quad (5.33)$$

der in die zweite Gleichung eingesetzt wird,

$$\hat{P} \hat{H} \hat{P} |\varphi\rangle + \hat{P} \hat{H} \hat{Q} (E - \hat{H})^{-1} \hat{Q} \hat{H} \hat{P} |\varphi\rangle = E |\varphi\rangle. \quad (5.34)$$

Das Einfügen eines vollständigen Satzes von Basiszuständen von \hat{H} führt zu

$$\hat{P} \hat{H} \hat{Q} (E - \hat{H})^{-1} \hat{Q} \hat{H} \hat{P} = \sum_{|m\rangle} \frac{\hat{P} \hat{H} \hat{Q} |m\rangle \langle m| \hat{Q} \hat{H} \hat{P}}{E - E_m}. \quad (5.35)$$

Zusammen mit

$$\hat{P} \hat{H} \hat{P} = \hat{T} + \hat{P} \hat{W} \hat{P}, \quad \hat{P} \hat{H} \hat{Q} = \hat{P} \hat{W} \hat{Q}, \quad \hat{Q} \hat{H} \hat{P} = \hat{Q} \hat{W} \hat{P} \quad (5.36)$$

ergibt sich insgesamt die Schrödinger-Gleichung

$$\hat{P} \hat{H} \hat{P} |\varphi\rangle + \sum_{|m\rangle} \frac{\hat{P} \hat{W} \hat{Q} |m\rangle \langle m| \hat{Q} \hat{W} \hat{P} |\varphi\rangle}{E_\varphi - E_m} = E_\varphi |\varphi\rangle. \quad (5.37)$$

Diesen Ausdruck erhält man auch in der Brillouin-Wigner-Störungstheorie. Wegen deren Größeninkonsistenz kann die Gleichung in dieser Form nicht für die perturbative Berechnung physikalischer Größen verwendet werden. Im folgenden Abschnitt wird sie so umgeformt, daß sie für störungstheoretische Berechnungen eingesetzt werden kann.

5.1.4.2 Störungstheorie

In einem ersten Schritt wird die Grundzustandsenergie in (5.37) von der Energie der Anregung $|\varphi\rangle$ subtrahiert. Man erhält

$$(E_\varphi - E_0) \hat{P} |\varphi\rangle = \hat{P} (\hat{H} - E_0) \hat{P} |\varphi\rangle + \sum_{|m\rangle} \frac{\hat{P} \hat{W} \hat{Q} |m\rangle \langle m| \hat{Q} \hat{W} \hat{P} |\varphi\rangle}{(E_\varphi - E_0) - (E_m - E_0)}, \quad (5.38)$$

in dem beide im Nenner auftretenden Energiedifferenzen (für alle vom Grundzustand erreichbaren Anregungen $|m\rangle$ und $|\varphi\rangle$) von der Ordnung Eins sind. Um exakte Ergebnisse zur zweiten Ordnung in der Störung \hat{W} zu erhalten, betrachtet man die Energiedifferenzen genauer,

$$\begin{aligned} E_\varphi - E_0 &\equiv e_\varphi, \\ E_m - E_0 &= E_m^{(0)} - E_0^{(0)} + \mathcal{O}(U, V). \end{aligned} \quad (5.39)$$

Damit ergibt sich bis einschließlich zur zweiten Ordnung exakt

$$e_\varphi \hat{P}|\varphi\rangle = \hat{P}(\hat{H} - E_0)\hat{P}|\varphi\rangle + \sum_{|m\rangle} \frac{\hat{P}\hat{W}\hat{Q}|m\rangle\langle m|\hat{Q}\hat{W}\hat{P}|\varphi\rangle}{e_\varphi - (E_m^{(0)} - E_0^{(0)})}. \quad (5.40)$$

Wendet man dieses Verfahren formal zur Berechnung der Grundzustandsenergie an, so ergibt sich mit $|\varphi\rangle = |\text{FS}\rangle$ und $e_\varphi = 0$ der Ausdruck

$$E_0 = \langle \text{FS} | \hat{T} + \hat{W} | \text{FS} \rangle + \sum_{|m\rangle} \frac{\langle \text{FS} | \hat{W} | m \rangle \langle m | \hat{W} | \text{FS} \rangle}{-E_m^{(0)} + E_0^{(0)}}, \quad (5.41)$$

der mit dem Ergebnis der Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie identisch ist.

Die Berechnung der Exzitonenergien e_x führt zu der Eigenwertgleichung

$$e_x |x\rangle = \hat{P}(\hat{H} - E_0)|x\rangle + \sum_{|m\rangle} \frac{\hat{P}\hat{W}|m\rangle\langle m|\hat{W}\hat{P}|x\rangle}{e_x - (E_m^{(0)} - E_0^{(0)})}. \quad (5.42)$$

Mit der Definition (5.1) reduziert sich die Berechnung der Exzitonenergien auf die Diagonalisierung der effektiven Hamilton-Matrix mit den Einträgen

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}}(e_{(s/t)}; k_1, k_2) = & \delta_{k_1, k_2} \left[{}_{(s/t)}\langle k_1 | \hat{H}^P | k_1 \rangle_{(s/t)} - \langle \text{FS} | \hat{H}^P | \text{FS} \rangle \right. \\ & + {}_{(s/t)}\langle k_1 | \hat{W} | k_1 \rangle_{(s/t)} - \langle \text{FS} | \hat{W} | \text{FS} \rangle \\ & \left. + \sum_{|m\rangle} \frac{{}_{(s/t)}\langle k_1 | \hat{W} | m \rangle_{(s/t)} {}_{(s/t)}\langle m | \hat{W} | k_1 \rangle_{(s/t)}}{e_{(s/t)} - (E_m^{(0)} - E_0^{(0)})} - E_0^{(2)} \right] \\ & + (1 - \delta_{k_1, k_2}) \left[{}_{(s/t)}\langle k_1 | \hat{W} | k_2 \rangle_{(s/t)} \right. \\ & \left. + \sum_{|m\rangle} \frac{{}_{(s/t)}\langle k_1 | \hat{W} | m \rangle_{(s/t)} {}_{(s/t)}\langle m | \hat{W} | k_2 \rangle_{(s/t)}}{e_{(s/t)} - (E_m^{(0)} - E_0^{(0)})} \right], \quad (5.43) \end{aligned}$$

wobei die angeregten Zustände $|m\rangle$ Null-, Zwei- und Drei-Teilchen-Anregungen sind. Die Selbstkonsistenzbedingung dieses Ansatzes besteht darin, den niedrigsten Eigenwert $e_{(s/t)}$ der zu Gleichung (5.43) gehörigen Eigenwertgleichung wieder in die Matrix $H_{\text{eff}}(e_{(s/t)})$ einzusetzen, bis die erneute Diagonalisierung (im Rahmen der gewünschten numerischen Genauigkeit) denselben Wert liefert.

5.2 Grundzustandsenergie

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der störungstheoretischen Berechnung der Grundzustandsenergie dargestellt. Alle berechneten Größen sind extensive Größen, d.h. proportional zur Gitterlänge L . Die Definitionen der Hilfsfunktionen und die Berechnung oft auftretender Kontraktionen befinden sich im Anhang B.

5.2.1 Beitrag führender Ordnung

Der Energiebeitrag führender Ordnung in U und V (5.8) entspricht der Summe der Elektronenenergien des unteren Peierls-Bandes. Es ergibt sich der Ausdruck

$$E_0^{(0)} = -2 \sum_k 2t \sqrt{\cos(k)^2 + \delta^2 \sin(k)^2}. \quad (5.44)$$

5.2.2 Beiträge erster Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung

5.2.2.1 Hubbard-Wechselwirkung

Der Beitrag erster Ordnung in der lokalen Coulomb-Wechselwirkung zur Grundzustandsenergie berechnet sich nach der Formel (5.9) und verschwindet wegen der Teilchen-Loch-Symmetrie, da $\langle \text{FS} | \hat{n}_{l,\sigma} | \text{FS} \rangle = 1/2$,

$$E_0^U = U \sum_{l=1}^L \langle \text{FS} | \left(\hat{n}_{l,\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{l,\downarrow} - \frac{1}{2} \right) | \text{FS} \rangle = 0. \quad (5.45)$$

5.2.2.2 Langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung

Die erste Ordnung in V liefert einen endlichen Beitrag,

$$\begin{aligned} E_0^V &= \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} V(r) \langle \text{FS} | (\hat{n}_{l,\uparrow} + \hat{n}_{l,\downarrow} - 1) (\hat{n}_{l+r,\uparrow} + \hat{n}_{l+r,\downarrow} - 1) | \text{FS} \rangle \\ &= - \sum_{l=1,\sigma}^L \sum_{r \neq 0} V(r) \left| \langle \text{FS} | \hat{c}_{l,\sigma}^+ \hat{c}_{l+r,\sigma} | \text{FS} \rangle \right|^2 \\ &= -L \sum_{\substack{-L/2 \leq r < L/2 \\ r|2=1}} 2V(r) (A_\delta(r)^2 + B_\delta(r)^2), \end{aligned} \quad (5.46)$$

wobei im letzten Schritt (B.28) eingesetzt wurde und $r|2=1$ alle ungeraden r bezeichnet.

5.2.3 Beiträge zweiter Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung

5.2.3.1 Hubbard-Wechselwirkung

Für die Hubbard-Wechselwirkung liefern nur die Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins (ZTLA $\uparrow\downarrow$) einen endlichen Beitrag. Die Berechnung der erforderlichen Kontraktionen befindet sich im Anhang C.1. Der Beitrag zweiter Ordnung in U ist

gegeben durch

$$\begin{aligned}
E_0^{U^2, \text{ZTLA}\uparrow\downarrow} &= \sum_{|11\rangle} \frac{|\langle \text{FS} | U \hat{D} | 11 \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_{|11\rangle}^{(0)}} \\
&= -U^2 \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{\left| \sum_{l=1}^L \langle \text{FS} | (\hat{n}_{l,\uparrow} - 1/2) (\hat{n}_{l,\downarrow} - 1/2) \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_4,\downarrow} | \text{FS} \rangle \right|^2}{E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4)} \\
&= -\left(\frac{U}{L}\right)^2 \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{1}{E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4)} \\
&\quad \left\{ \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, 0} [u_1(k_1, k_2, k_3, k_4)]^2 + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, \pm\pi} [u_2(k_1, k_2, k_3, k_4)]^2 \right\}.
\end{aligned} \tag{5.47}$$

5.2.3.2 Langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung

Zur zweiten Ordnung der Grundzustandsenergie in V tragen mehrere Anregungen bei. Zunächst gibt es den Beitrag der Ein-Teilchen-Loch-Anregungen (ETLA),

$$\begin{aligned}
E_0^{V^2, \text{ETLA}} &= \sum_{|rs\rangle \in \{|10\rangle, |01\rangle\}} \frac{V^2 |\langle \text{FS} | \hat{V} | rs \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_{|rs\rangle}^{(0)}} \\
&= \sum_{k_1, k_2, \sigma} \frac{|\sum_{l, r \neq 0} V(r) \langle \text{FS} | (\hat{n}_l - 1) (\hat{n}_{l+r} - 1) \hat{b}_{k_1, \sigma}^+ \hat{a}_{k_2, \sigma} | \text{FS} \rangle|^2}{-(E(k_1) + E(k_2))} \\
&= 2 \sum_k \frac{V^2 v_0(k)^2}{E(k)},
\end{aligned} \tag{5.48}$$

wobei im letzten Schritt (C.2) eingesetzt wurde. Mit (C.3) tragen die Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins (ZTLA $\uparrow\downarrow$) bei

$$\begin{aligned}
E_0^{V^2, \text{ZTLA}\uparrow\downarrow} &= \sum_{|11\rangle} \frac{V^2 |\langle \text{FS} | \hat{V} | 11 \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_{|11\rangle}^{(0)}} = \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{V^2 |\langle \text{FS} | \hat{V} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_4,\downarrow} | \text{FS} \rangle|^2}{-(E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4))} \\
&= -\left(\frac{V}{L}\right)^2 \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{1}{E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4)} \\
&\quad \left\{ \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, 0} [v_1(k_1, k_2, k_3, k_4)]^2 + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, \pm\pi} [v_2(k_1, k_2, k_3, k_4)]^2 \right\}.
\end{aligned} \tag{5.49}$$

Darüber hinaus gibt es den Beitrag der ZTLA mit parallelen Spins (ZTLA \parallel). Mit (C.5) ist

$$\begin{aligned}
E_0^{V^2, \text{ZTLA}\parallel} &= \sum_{|rs\rangle \in \{|20\rangle, |02\rangle\}} \frac{V^2 \left| \langle \text{FS} | \hat{V} | rs \rangle \right|^2}{E_0^{(0)} - E_{|rs\rangle}^{(0)}} \\
&= \sum_{k_1 < k_3, k_2 < k_4, \sigma} \frac{-V^2 \left| \langle \text{FS} | \hat{V} \hat{b}_{k_1, \sigma}^+ \hat{a}_{k_2, \sigma} \hat{b}_{k_3, \sigma}^+ \hat{a}_{k_4, \sigma} | 0 \rangle \right|^2}{E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4)} \\
&= -2 \left(\frac{V}{L} \right)^2 \sum_{k_1 < k_3, k_2 < k_4} \frac{1}{E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4)} \\
&\quad \left\{ \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, 0} [v_1(k_1, k_2, k_3, k_4) - v_1(k_1, k_4, k_3, k_2)]^2 \right. \\
&\quad \left. + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, \pm\pi} [v_2(k_1, k_2, k_3, k_4) - v_2(k_1, k_4, k_3, k_2)]^2 \right\}. \quad (5.50)
\end{aligned}$$

Die Summationsbeschränkungen können aufgehoben und durch einen Faktor 1/4 berücksichtigt werden.

5.2.3.3 Mischterme

Der einzige Beitrag zur Grundzustandsenergie proportional zu UV stammt von einer Zwei-Teilchen-Loch-Anregung mit entgegengesetzten Spins und ergibt mit (C.1) und (C.3)

$$\begin{aligned}
E_0^{UV, \text{ZTLA}\uparrow\downarrow} &= UV \sum_{|11\rangle} \frac{\langle \text{FS} | \hat{V} | 11 \rangle \langle 11 | \hat{D} | \text{FS} \rangle + \text{h.c.}}{E_0^{(0)} - E_{|11\rangle}^{(0)}} \\
&= \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{UV}{E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4)} \\
&\quad \left\{ \langle \text{FS} | \hat{V} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_4, \downarrow} | \text{FS} \rangle \langle \text{FS} | \hat{D} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_4, \downarrow} | \text{FS} \rangle^* + \text{h.c.} \right\} \\
&= \frac{2UV}{L^2} \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{1}{E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4)} \\
&\quad \left\{ \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, 0} u_1(k_1, k_2, k_3, k_4) v_1(k_1, k_2, k_3, k_4) \right. \\
&\quad \left. + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, \pm\pi} u_2(k_1, k_2, k_3, k_4) v_2(k_1, k_2, k_3, k_4) \right\}. \quad (5.51)
\end{aligned}$$

Die Beiträge aus (5.44), (5.46), (5.48), (5.47), (5.49), (5.50) und (5.51) liefern die Grundzustandsenergie bis zur zweiten Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung. Sie werden in Abschnitt 6.1 mit DMRG-Rechnungen verglichen.

5.3 Einteilchenlücke

Im Abschnitt 2.3 wurde die Einteilchenlücke (2.13) definiert

$$\Delta_1(N) = [E_0(N+1) - E_0(N)] - [E_0(N) - E_0(N-1)]. \quad (5.52)$$

Sie bestimmt den Beginn des Teilchen-Loch-Kontinuums: Elektron-Loch-Paare mit Energien größer als Δ_1 sind ungebunden. In einem Teilchen-Loch-symmetrischen Modell wie dem hier untersuchten (5.4) gilt

$$\Delta_1(N) = 2[E_0(N+1) - E_0(N)]. \quad (5.53)$$

Damit genügt es, die Grundzustandsenergie für das halbgefüllte Modell mit einem zusätzlichen Elektron zu berechnen. Dieses zusätzliche Elektron hat den Impuls $p = -\pi/2$, da das untere Peierls-Band bereits vollständig besetzt ist und die Energie des oberen Peierls-Bandes an diesem Punkt minimal ist. Somit trägt das Elektron bei p die niedrigstmögliche Energie.

Um die Energie des Grundzustandes mit $L+1$ Teilchen zu bestimmen, sind Matrixelemente der Form $M^{N+1}(p) = \langle 0 | \hat{b}_{p,\sigma} \hat{O} \hat{b}_{p,\sigma}^+ | 0 \rangle$ auszurechnen, wobei $\hat{O} \in \{\hat{D}, \hat{V}\}$. Um die entsprechenden Beiträge zur Lücke zu erhalten, zieht man die jeweiligen Matrixelemente für $N=L$ Teilchen ab. Die Berechnung dieser Matrixelemente findet sich im Anhang C.2. Im folgenden sind die Ergebnisse der Einteilchenlücke bis einschließlich der zweiten Ordnung aufgeführt, wobei hier die Annahme getroffen wird, daß das zusätzliche Elektron Spin \uparrow hat. Wegen der Invarianz des Modells unter Spinrotation hat dies keinen Einfluß auf das Ergebnis.

5.3.1 Beitrag führender Ordnung

Wie im Abschnitt 2.3 gezeigt, ist der Beitrag führender Ordnung

$$\Delta_1^{(0)} = 2E(p) = 4t\delta, \quad (5.54)$$

unabhängig von der Systemgröße L .

5.3.2 Beiträge erster Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung

5.3.2.1 Hubbard-Wechselwirkung

Die erste Ordnung in U verschwindet wegen der Teilchen-Loch-Symmetrie,

$$\Delta_1^U = U \left(\langle \text{FS} | \hat{b}_{p,\uparrow} \hat{D} \hat{b}_{p,\uparrow}^+ | \text{FS} \rangle - \langle \text{FS} | \hat{D} | \text{FS} \rangle \right) = 0. \quad (5.55)$$

5.3.2.2 Langreichweitige Wechselwirkung

Die erste Ordnung in V liefert einen endlichen Beitrag zur Energielücke

$$\begin{aligned}
\Delta_1^V &= 2V \left(\langle \text{FS} | \hat{b}_{p,\uparrow} \hat{V} \hat{b}_{p,\uparrow}^+ | \text{FS} \rangle - \langle \text{FS} | \hat{V} | \text{FS} \rangle \right) \\
&= 2 \sum_{\substack{-L/2 < r < L/2 \\ r|2=1}} 4tV(r) \left(\frac{\cos(p)}{E(p)} \cos(pr) A_\delta(r) + \frac{\delta \sin(p)}{E(p)} \sin(pr) B_\delta(r) \right) \\
&= \sum_{\substack{-L/2 < r < L/2 \\ r|2=1}} 4V(r) (-1)^{\lfloor (r-1)/2 \rfloor} B_\delta(r), \tag{5.56}
\end{aligned}$$

wobei (C.8) und (5.46) verwendet wurden und im letzten Schritt $p = -\pi/2$ eingesetzt wurde.

5.3.3 Beiträge zweiter Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung

5.3.3.1 Hubbard-Wechselwirkung

In der zweiten Ordnung in U tragen Ein- sowie Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins bei. Mit (C.6) erhält man

$$\begin{aligned}
\Delta_1^{U^2, \text{ETLA}} &= 2 \sum_{k_1, k_2, k_3} \frac{U^2 |\langle \text{FS} | \hat{b}_{p,\uparrow} \hat{D} \hat{b}_{k_1,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_2,\downarrow} \hat{b}_{k_3,\uparrow}^+ | \text{FS} \rangle|^2}{E(p) - (E(k_1) + E(k_2) + E(k_3))} \\
&= \left(\frac{U}{L} \right)^2 \sum_{k_1, k_2, k_3} \frac{2(1 - \delta_{p,k_1})}{E(p) - (E(k_1) + E(k_2) + E(k_3))} \\
&\quad \left\{ \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, 0} [u_2(k_1, k_2, k_3, p)]^2 + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, \pm\pi} [u_1(k_1, k_2, k_3, p)]^2 \right\}, \tag{5.57}
\end{aligned}$$

und mit (C.7) und (C.1)

$$\begin{aligned}
\Delta_1^{U^2, \text{ZTLA}\uparrow\downarrow} &= 2 \left(\sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{|\langle \text{FS} | \hat{b}_{p,\uparrow} U \hat{D} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_4,\downarrow} \hat{b}_{p,\uparrow}^+ | \text{FS} \rangle|^2}{- (E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4))} - E_0^{U^2, \text{ZTLA}\uparrow\downarrow} \right) \\
&= \left(\frac{U}{L} \right)^2 \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{2\delta_{p,k_1}}{E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4)} \\
&\quad \left\{ \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, 0} [u_1(k_1, k_2, k_3, k_4)]^2 + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, \pm\pi} [u_2(k_1, k_2, k_3, k_4)]^2 \right\}. \tag{5.58}
\end{aligned}$$

5.3.3.2 Langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung

In der zweiten Ordnung in V tragen Ein-Teilchen-Loch-Anregungen sowohl mit entgegengesetzten als auch mit parallelen Spins bei,

$$\begin{aligned}
\Delta_1^{V^2, \text{ETLA}} &= 2 \left(\sum_{k_1, k_2, k_3, \tau} \frac{V^2 (1 - \delta_{\tau, \uparrow} / 2) |\langle \text{FS} | \hat{b}_{p, \uparrow} \hat{V} \hat{b}_{k_1, \tau}^+ \hat{a}_{k_2, \tau} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ | \text{FS} \rangle|^2}{E(p) - (E(k_1) + E(k_2) + E(k_3))} - E_0^{V^2, \text{ETLA}} \right) \\
&= 2 \left(\left(\frac{V}{L} \right)^2 \sum_{k_1, k_2, k_3} \frac{1}{E(p) - (E(k_1) + E(k_2) + E(k_3))} \right. \\
&\quad \left\{ \Theta(k_1 - k_3) \left[\delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, 0} \left\{ \delta_{p, k_3} \delta_{k_1, k_2} Lv_0(k_1) - \delta_{p, k_1} \delta_{k_2, k_3} Lv_0(k_3) \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left. + v_2(k_3, p, k_1, k_2) - v_2(k_1, p, k_3, k_2) \right\}^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, \pm \pi} \left\{ v_1(k_3, p, k_1, k_2) - v_1(k_1, p, k_3, k_2) \right\}^2 \right] \right. \\
&\quad \left. + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, 0} \left\{ \delta_{p, k_3} \delta_{k_1, k_2} Lv_0(k_1) + v_2(k_3, p, k_1, k_2) \right\}^2 \right. \\
&\quad \left. + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, \pm \pi} \left\{ v_1(k_3, p, k_1, k_2) \right\}^2 \right\} - E_0^{V^2, \text{ETLA}} \right), \tag{5.59}
\end{aligned}$$

wobei (C.10) und (C.11) verwendet wurden. Zudem liefern die Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins nach (C.12)

$$\begin{aligned}
\Delta_1^{V^2, \text{ZTLA} \uparrow \downarrow} &= 2 \left(\sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{V^2 |\langle \text{FS} | \hat{b}_{p, \uparrow} \hat{V} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_4, \downarrow} \hat{b}_{p, \uparrow}^+ | \text{FS} \rangle|^2}{-(E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4))} - E_0^{V^2, \text{ZTLA} \uparrow \downarrow} \right) \\
&= \left(\frac{V}{L} \right)^2 \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{2\delta_{k_1, p}}{E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4)} \\
&\quad \left\{ \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, 0} [v_1(k_1, k_2, k_3, k_4)]^2 + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, \pm \pi} [v_2(k_1, k_2, k_3, k_4)]^2 \right\}. \tag{5.60}
\end{aligned}$$

Der Beitrag für die ZTLA mit parallelen Spins lautet mit (C.13)

$$\begin{aligned}
\Delta_1^{V^2, \text{ZTLA} \parallel} &= 2 \left(\sum_{k_1 < k_3, k_2 < k_4, \tau} \frac{V^2 |\langle \text{FS} | \hat{b}_{p, \uparrow} \hat{V} \hat{b}_{k_1, \tau}^+ \hat{a}_{k_2, \tau} \hat{b}_{k_3, \tau}^+ \hat{a}_{k_4, \tau} \hat{b}_{p, \uparrow}^+ | \text{FS} \rangle|^2}{-(E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4))} - E_0^{V^2, \text{ZTLA} \parallel} \right) \\
&= \left(\frac{V}{L} \right)^2 \sum_{k_1 < k_3, k_2 < k_4, \tau} \frac{2(\delta_{k_1, p} + \delta_{k_3, p})}{E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4)} \\
&\quad \left\{ \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, 0} [v_1(k_1, k_2, k_3, k_4) - v_1(k_1, k_4, k_3, k_2)]^2 \right. \\
&\quad \left. + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, \pm \pi} [v_2(k_1, k_2, k_3, k_4) - v_2(k_1, k_4, k_3, k_2)]^2 \right\}. \tag{5.61}
\end{aligned}$$

5.3.3.3 Mischterme

In der zweiten Ordnung der gemischten Coulomb-Anteile gibt es den Beitrag der ETLA mit entgegengesetzten Spins,

$$\begin{aligned}
\Delta_1^{UV, ETLA} &= 2 \sum_{k_1, k_2, k_3, \tau} \frac{UV}{E(p) - (E(k_1) + E(k_2) + E(k_3))} \\
&\quad \left\{ \langle \text{FS} | \hat{b}_{p, \uparrow} \hat{D} \hat{b}_{k_1, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_2, \downarrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ | \text{FS} \rangle \langle \text{FS} | \hat{b}_{p, \uparrow} \hat{V} \hat{b}_{k_1, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_2, \downarrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ | \text{FS} \rangle^* + \text{h.c.} \right\} \\
&= \left(\frac{4UV}{L^2} \right) \sum_{k_1, k_2, k_3} \frac{1}{E(p) - (E(k_1) + E(k_2) + E(k_3))} \\
&\quad \left\{ \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, 0} v_2(k_3, p, k_1, k_2) u_2(k_1, k_2, k_3, p) \right. \\
&\quad \left. + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, \pm \pi} v_1(k_3, p, k_1, k_2) u_1(k_1, k_2, k_3, p) \right\}, \tag{5.62}
\end{aligned}$$

nach Gleichungen (C.6) und (C.10).

Die ZTLA mit entgegengesetzten Spins liefern

$$\begin{aligned}
\Delta_1^{UV, ZTLA \uparrow \downarrow} &= 2 \left(\sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{(-UV)}{E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4)} \right. \\
&\quad \left\{ \langle \text{FS} | \hat{b}_{p, \uparrow} \hat{D} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_4, \downarrow} \hat{b}_{p, \uparrow}^+ | \text{FS} \rangle \right. \\
&\quad \left. \langle \text{FS} | \hat{b}_{p, \uparrow} \hat{V} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_4, \downarrow} \hat{b}_{p, \uparrow}^+ | \text{FS} \rangle^* + \text{h.c.} \right\} - E_0^{UV, ZTLA \uparrow \downarrow} \Big) \\
&= \left(\frac{4UV}{L^2} \right) \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{\delta_{k_1, p}}{E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4)} \\
&\quad \left\{ \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, 0} u_1(k_1, k_2, k_3, k_4) v_1(k_1, k_2, k_3, k_4) \right. \\
&\quad \left. + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, \pm \pi} u_2(k_1, k_2, k_3, k_4) v_2(k_1, k_2, k_3, k_4) \right\}, \tag{5.63}
\end{aligned}$$

wobei Gleichungen (C.7) und (C.12) verwendet wurden.

Die Terme (5.54), (5.56), (5.57), (5.58), (5.59), (5.60), (5.61), (5.62) und (5.63) ergeben zusammen die Einteilchenlücke bis einschließlich der zweiten Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung. Die Ergebnisse werden im Abschnitt 6.2 mit DMRG-Rechnungen verglichen.

5.4 Matricelemente der optischen Anregungen

Aufgrund der Gültigkeit der Störungstheorie gilt für die Spin- und die Ladungslücken Δ_s und Δ_c

$$\Delta_c \equiv E_1(N, S = 0) - E_0(N, S = 0) = E_s - E_0, \tag{5.64}$$

$$\Delta_s \equiv E_1(N, S = 1) - E_0(N, S = 0) = E_t - E_0, \tag{5.65}$$

wobei $E_{(s/t)}$ die Energie des ersten angeregten Singulett (Tripletts) bezeichnet. Im folgenden werden die Ausdrücke der Energien $E_{(s/t)}$ dargestellt. Grundsätzlich treten bei der Berechnung der Energiebeiträge zweiter Ordnung des ersten angeregten Singulett bzw. Tripletts Matrixelemente der folgenden Art auf,

$$M_{0,(s/t)}(p_1, p_2) = {}_{(s/t)}\langle p_1 | \hat{H}^P | p_2 \rangle_{(s/t)} - \delta_{p_1, p_2} E_0^{(0)}, \quad (5.66)$$

$$M_{1,(s/t)}(p_1, p_2) = {}_{(s/t)}\langle p_1 | \hat{W} | p_2 \rangle_{(s/t)} - \delta_{p_1, p_2} E_0^{(1)}, \quad (5.67)$$

$$M_{2,(s/t)}(e; p_1, p_2) = \sum_{|m\rangle} \frac{{}_{(s/t)}\langle p_1 | \hat{W} | m \rangle_{(s/t)} {}_{(s/t)}\langle m | \hat{W} | p_2 \rangle_{(s/t)}}{e - (E_m^{(0)} - E_0^{(0)})}. \quad (5.68)$$

Die Berechnung der einzelnen Matrixelemente findet sich im Anhang C.3. Im folgenden werden die Ergebnisse zusammengestellt.

5.4.1 Matrixelement in führender Ordnung

Der energetisch günstigste Triplet- oder Singulettzustand im Falle verschwindender Coulomb-Abstoßung ist eine optische Elektron-Loch-Anregung beim Impuls $p_1 = -\pi/2$, siehe Abb. 5.4, die einen diagonalen Beitrag liefert,

$$M_{0,(s/t)}(p_1, p_2) = \delta_{p_1, p_2} 2E(p_1). \quad (5.69)$$

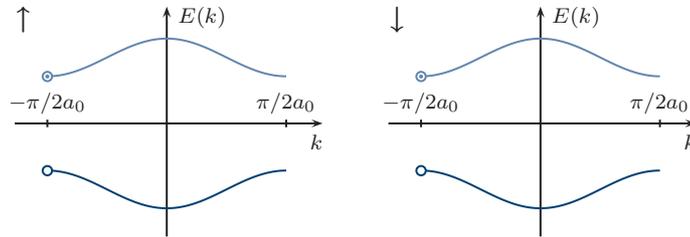


Abbildung 5.4 Ein-Teilchen-Loch-Anregung mit der niedrigstmöglichen Energie.

5.4.2 Matrixelemente erster Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung

5.4.2.1 Hubbard-Wechselwirkung

Die Matrix der ersten Ordnung der lokalen Coulomb-Wechselwirkung ergibt sich nach (C.16)

$$M_{1,(s/t)}^U(p_1, p_2) = \pm \frac{U}{L}. \quad (5.70)$$

5.4.2.2 Langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung

In der ersten Ordnung in der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung erhält man mit (C.21) und (5.46)

$$\begin{aligned}
M_{1,(s/t)}^V(p_1, p_2) = & \sum_{\substack{-L/2 < r < L/2 \\ r|2=1}} V(r) \delta_{p_1, p_2} \left[\frac{8 \cos(p_1) \cos(p_1 r)}{E(p_1)} A_\delta(r) \right. \\
& \left. + \frac{8\delta \sin(p_1) \sin(p_1 r)}{E(p_1)} B_\delta(r) \right] \\
& - \frac{2}{L} \sum_{r \neq 0} V(r) \cos((p_1 - p_2)r) [f_2^2(p_1, p_2) + (-1)^r f_1^2(p_1, p_2)] \\
& + \frac{2}{L} \sum_{r \neq 0} V(r) [1 + (1 \pm 1)(-1)^r] . \tag{5.71}
\end{aligned}$$

5.4.3 Matricelemente zweiter Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung

5.4.3.1 Hubbard-Wechselwirkung

Zur zweiten Ordnung in der lokalen Coulomb-Wechselwirkung tragen Zwei- sowie Drei-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins bei. Mit (C.17) ergibt sich für die Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen

$$\begin{aligned}
M_{2,(s/t)}^{U^2, \text{ZTLA}\uparrow\downarrow}(e; p_1, p_2) = & \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{\left\{ {}_{(s/t)} \langle p_1 | U \hat{D} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_4, \downarrow} | \text{FS} \rangle \right\} \{p_1 \rightarrow p_2\}^*}{e - (E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4))} \\
= & \left(\frac{U^2}{2L^2} \right) \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{1}{e - (E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4))} \\
& \left\{ \delta_{p_1, k_2} - \delta_{p_1, k_1} \pm [\delta_{p_1, k_4} - \delta_{p_1, k_3}] \right\} \{p_1 \rightarrow p_2\} \\
& \left\{ \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, 0} [u_2(k_1, k_2, k_3, k_4)]^2 \right. \\
& \left. + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, \pm\pi} [u_1(k_1, k_2, k_3, k_4)]^2 \right\} . \tag{5.72}
\end{aligned}$$

Die Drei-Teilchen-Loch-Anregungen (DTLA) tragen bei

$$\begin{aligned}
M_{2,(s/t)}^{U^2, \text{DTLA}}(e; p_1, p_2) = & \frac{1}{2} \sum_{k_1 < k_3, k_2 < k_4, k_5, k_6} \frac{2U^2}{e - \sum_{j=1}^6 E(k_j)} \\
& \left\{ {}_{(s/t)} \langle p_1 | \hat{D} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \hat{b}_{k_5, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_6, \downarrow} | \text{FS} \rangle \right\} \left\{ p_1 \rightarrow p_2 \right\}^* . \tag{5.73}
\end{aligned}$$

Mit (C.18) folgt

$$\begin{aligned}
M_{2,(s/t)}^{U^2, \text{DTLA}}(e; p_1, p_2) &= \left(\frac{U}{L}\right)^2 \sum_{k_1 < k_3, k_2 < k_4, k_5, k_6} \frac{1}{e - \sum_{j=1}^6 E(k_j)} \\
&\left[\delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4 + k_5 - k_6, 0} \right. \\
&\quad \left\{ \delta_{p_1, k_1} \delta_{k_1, k_2} u_1(k_3, k_4, k_5, k_6) + \delta_{p_1, k_3} \delta_{k_3, k_4} u_1(k_1, k_2, k_5, k_6) \right. \\
&\quad \left. - \delta_{p_1, k_1} \delta_{k_1, k_4} u_1(k_3, k_2, k_5, k_6) - \delta_{p_1, k_3} \delta_{k_3, k_2} u_1(k_1, k_4, k_5, k_6) \right\} \\
&\quad \left\{ p_1 \rightarrow p_2 \right\} \\
&\quad + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4 + k_5 - k_6, \pm\pi} \\
&\quad \left\{ \delta_{p_1, k_1} \delta_{k_1, k_2} u_2(k_3, k_4, k_5, k_6) + \delta_{p_1, k_3} \delta_{k_3, k_4} u_2(k_1, k_2, k_5, k_6) \right. \\
&\quad \left. - \delta_{p_1, k_1} \delta_{k_1, k_4} u_2(k_3, k_2, k_5, k_6) - \delta_{p_1, k_3} \delta_{k_3, k_2} u_2(k_1, k_4, k_5, k_6) \right\} \\
&\quad \left. \left\{ p_1 \rightarrow p_2 \right\} \right]. \tag{5.74}
\end{aligned}$$

Für die konkreten numerischen Auswertungen ($L \leq 140$) werden die auftretenden k -Summen mithilfe der Impulserhaltungen reduziert. Da die Matricelemente antisymmetrisch unter der Vertauschung von k_1 mit k_3 bzw. k_2 mit k_4 sind und die Matricelemente paarweise auftreten, können die Summationsbeschränkungen aufgehoben und mit einem Faktor $1/4$ berücksichtigt werden. Man erkennt jedoch bereits hier, warum die zweite Ordnung Störungstheorie die Machbarkeitsgrenze darstellt: in der dritten Ordnung treten Fünf-Teilchen-Loch-Anregungen auf, die analytisch und numerisch nicht mehr handhabbar sind.

5.4.3.2 Langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung

Da ein einzelnes Teilchen-Loch-Paar durch \hat{V} abgeregt werden kann, trägt auch eine Null-Teilchen-Loch-Anregung (NTLA) zur zweiten Ordnung in der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung bei. Mit (C.22) folgt

$$M_{2,(s/t)}^{V^2, \text{NTLA}}(e; p_1, p_2) = \frac{(s/t) \langle p_1 | \hat{V} | \text{FS} \rangle \langle \text{FS} | \hat{V} | p_2 \rangle_{(s/t)}}{e} = \frac{V^2 (1 \pm 1)^2 v_0(p_1) v_0(p_2)}{2e}.$$

Die Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins liefern mit (C.23)

$$M_{2,(s/t)}^{V^2, \text{ZTLA}\uparrow\downarrow}(e; p_1, p_2) = \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{\left\{ (s/t) \langle p_1 | \hat{V} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_4, \downarrow} | \text{FS} \rangle \right\} \left\{ p_1 \rightarrow p_2 \right\}}{e - (E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4))}, \tag{5.75}$$

$$\begin{aligned}
M_{2,(s/t)}^{V^2, \text{ZTLA}\uparrow\downarrow}(e; p_1, p_2) &= \frac{1}{2} \left(\frac{V}{L} \right)^2 \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{1}{e - (E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4))} \\
&\quad \left[\delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, 0} \left\{ \delta_{k_1, k_2} \delta_{k_3, k_4} L (\delta_{p_1, k_1} v_0(k_3) \pm \delta_{p_1, k_3} v_0(k_1)) \right. \right. \\
&\quad + (\delta_{p_1, k_2} - \delta_{p_1, k_1}) v_2(k_1, k_2, k_3, k_4) \\
&\quad \left. \pm (\delta_{p_1, k_4} - \delta_{p_1, k_3}) v_2(k_3, k_4, k_1, k_2) \right\} \left\{ p_1 \rightarrow p_2 \right\} \\
&\quad + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, \pm\pi} \\
&\quad \left\{ (\delta_{p_1, k_2} - \delta_{p_1, k_1}) v_1(k_1, k_2, k_3, k_4) \right. \\
&\quad \left. \pm (\delta_{p_1, k_4} - \delta_{p_1, k_3}) v_1(k_3, k_4, k_1, k_2) \right\} \left\{ p_1 \rightarrow p_2 \right\} \Big]. \quad (5.76)
\end{aligned}$$

Zwei-Teilchen-Loch-Anregung mit parallelen Spins liefern mit (C.25)

$$\begin{aligned}
M_{2,(s/t)}^{V^2, \text{ZTLA}\parallel}(e; p_1, p_2) &= \sum_{k_1 < k_3, k_2 < k_4} \frac{V^2 \left\{ (s/t) \left\langle p_1 \left| \hat{V} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \right| \text{FS} \right\rangle \right\} \left\{ p_1 \rightarrow p_2 \right\}}{e - (E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4))} \\
&= \left(\frac{V}{L} \right)^2 \sum_{k_1 < k_3, k_2 < k_4} \frac{1}{e - (E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4))} \\
&\quad \left[\delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, 0} \left\{ (\delta_{k_1, k_2} \delta_{k_3, k_4} - \delta_{k_1, k_4} \delta_{k_3, k_2}) L [\delta_{p_1, k_1} v_0(k_3) + \delta_{p_1, k_3} v_0(k_1)]^2 \right. \right. \\
&\quad + (\delta_{p_1, k_2} - \delta_{p_1, k_1}) v_2(k_1, k_2, k_3, k_4) + (\delta_{p_1, k_4} - \delta_{p_1, k_3}) v_2(k_3, k_4, k_1, k_2) \\
&\quad \left. - (\delta_{p_1, k_2} - \delta_{p_1, k_3}) v_2(k_1, k_4, k_3, k_2) - (\delta_{p_1, k_4} - \delta_{p_1, k_1}) v_2(k_3, k_2, k_1, k_4) \right\} \\
&\quad \left\{ p_1 \rightarrow p_2 \right\} + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, \pm\pi} \\
&\quad \left\{ (\delta_{p_1, k_2} - \delta_{p_1, k_1}) v_1(k_1, k_2, k_3, k_4) + (\delta_{p_1, k_4} - \delta_{p_1, k_3}) v_1(k_3, k_4, k_1, k_2) \right. \\
&\quad \left. - (\delta_{p_1, k_2} - \delta_{p_1, k_3}) v_1(k_1, k_4, k_3, k_2) - (\delta_{p_1, k_4} - \delta_{p_1, k_1}) v_1(k_3, k_2, k_1, k_4) \right\} \\
&\quad \left. \left\{ p_1 \rightarrow p_2 \right\} \right]. \quad (5.77)
\end{aligned}$$

Der Beitrag der Drei-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins

$$\begin{aligned}
M_{2,(s/t)}^{V^2, \text{DTLA}\perp}(e; p_1, p_2) &= \sum_{k_1 < k_3, k_2 < k_4, k_5, k_6} \frac{V^2}{e - \sum_{j=1}^6 E(k_j)} \\
&\quad \left\{ (s/t) \left\langle p_1 \left| \hat{V} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \hat{b}_{k_5, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_6, \downarrow} \right| \text{FS} \right\rangle \right\} \left\{ p_1 \rightarrow p_2 \right\} \quad (5.78)
\end{aligned}$$

ergibt sich zu

$$\begin{aligned}
M_{2,(s/t)}^{V^2, \text{DTLA}\perp}(e; p_1, p_2) &= \left(\frac{V}{L}\right)^2 \sum_{k_1 < k_3, k_2 < k_4, k_5, k_6} \frac{1}{e - \sum_{j=1}^6 E(k_j)} \\
&\left[\delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4 + k_5 - k_6, 0} \right. \\
&\left\{ \delta_{k_3, k_4} \delta_{p_1, k_3} v_1(k_1, k_2, k_5, k_6) + \delta_{k_1, k_2} \delta_{p_1, k_1} v_1(k_3, k_4, k_5, k_6) \right. \\
&- \delta_{k_1, k_4} \delta_{p_1, k_1} v_1(k_3, k_2, k_5, k_6) - \delta_{k_3, k_2} \delta_{p_1, k_3} v_1(k_1, k_4, k_5, k_6) \\
&\pm (\delta_{k_5, k_6} \delta_{p_1, k_5} v_1(k_1, k_2, k_3, k_4) - \delta_{k_5, k_6} \delta_{p_1, k_5} v_1(k_1, k_4, k_3, k_2)) \left. \right\} \left\{ p_1 \rightarrow p_2 \right\} \\
&+ \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4 + k_5 - k_6, \pm\pi} \\
&\left\{ \delta_{k_3, k_4} \delta_{p_1, k_3} v_2(k_1, k_2, k_5, k_6) + \delta_{k_1, k_2} \delta_{p_1, k_1} v_2(k_3, k_4, k_5, k_6) \right. \\
&- \delta_{k_1, k_4} \delta_{p_1, k_1} v_2(k_3, k_2, k_5, k_6) - \delta_{k_3, k_2} \delta_{p_1, k_3} v_2(k_1, k_4, k_5, k_6) \\
&\pm (\delta_{k_5, k_6} \delta_{p_1, k_5} v_2(k_1, k_2, k_3, k_4) - \delta_{k_5, k_6} \delta_{p_1, k_5} v_2(k_1, k_4, k_3, k_2)) \left. \right\} \left\{ p_1 \rightarrow p_2 \right\} \left. \right], \tag{5.79}
\end{aligned}$$

wobei (C.26) verwendet wurde. Die Impulserhaltungen reduzieren den numerischen Aufwand auf ein erträgliches Maß.

Mithilfe von (C.29) ergeben die Drei-Teilchen-Loch-Anregungen mit parallelen Spins den Beitrag

$$\begin{aligned}
&M_{2,(s/t)}^{V^2, \text{DTLA}\parallel}(e; p_1, p_2) \\
&= \sum_{k_1 < k_3 < k_5, k_2 < k_4 < k_6} \frac{V^2 \left\{ (s/t) \left\langle p_1 \left| \hat{V} \left(\hat{b}_{k_1, \uparrow}^+, \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+, \hat{a}_{k_4, \uparrow} \hat{b}_{k_5, \uparrow}^+, \hat{a}_{k_6, \uparrow} \right) \right| \text{FS} \right\rangle \right\} \left\{ p_1 \rightarrow p_2 \right\}}{e - \sum_{j=1}^6 E(k_j)} \\
&= \left(\frac{V}{L}\right)^2 \sum_{k_1 < k_3 < k_5, k_2 < k_4 < k_6} \frac{1}{e - \sum_{j=1}^6 E(k_j)} \sum_{f=1,2} \\
&\delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4 + k_5 - k_6, \pm(f-1)\pi} \left\{ \delta_{k_5, k_6} \delta_{p_1, k_5} (v_f(k_1, k_2, k_3, k_4) - v_f(k_3, k_2, k_1, k_4)) \right. \\
&+ \delta_{k_3, k_4} \delta_{p_1, k_3} (v_f(k_1, k_2, k_5, k_6) - v_f(k_5, k_2, k_1, k_6)) \\
&+ \delta_{k_1, k_2} \delta_{p_1, k_1} (v_f(k_3, k_4, k_5, k_6) - v_f(k_5, k_4, k_3, k_6)) \\
&- \delta_{k_1, k_4} \delta_{p_1, k_1} (v_f(k_3, k_2, k_5, k_6) - v_f(k_5, k_2, k_3, k_6)) \\
&- \delta_{k_1, k_6} \delta_{p_1, k_1} (v_f(k_3, k_4, k_5, k_2) - v_f(k_5, k_4, k_3, k_2)) \\
&- \delta_{k_3, k_2} \delta_{p_1, k_3} (v_f(k_1, k_4, k_5, k_6) - v_f(k_5, k_4, k_1, k_6)) \\
&- \delta_{k_3, k_6} \delta_{p_1, k_3} (v_f(k_1, k_2, k_5, k_4) - v_f(k_5, k_2, k_1, k_4)) \\
&- \delta_{k_5, k_2} \delta_{p_1, k_5} (v_f(k_1, k_6, k_3, k_4) - v_f(k_3, k_6, k_1, k_4)) \\
&- \delta_{k_5, k_4} \delta_{p_1, k_5} (v_f(k_1, k_2, k_3, k_6) - v_f(k_3, k_2, k_1, k_6)) \left. \right\} \left\{ p_1 \rightarrow p_2 \right\}. \tag{5.80}
\end{aligned}$$

5.4.3.3 Mischterme

Zur zweiten Ordnung der gemischten lokalen und langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkungsbeiträge steuern alle Anregungen bei, deren Beiträge zur zweiten Ordnung in der lokalen Coulomb-Wechselwirkung nicht verschwinden.

Zum ersten erhält man Beiträge der Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit unterschiedlichen Spins nach (C.17) und (C.23)

$$\begin{aligned}
& M_{2,(s/t)}^{UV, ZTLA\uparrow\downarrow}(e; p_1, p_2) \\
&= \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{UV}{e - (E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4))} \\
&\quad \left({}_{(s/t)} \langle p_1 | \hat{V} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_4, \downarrow} | \text{FS} \rangle \langle \text{FS} | \hat{a}_{k_2, \uparrow}^+ \hat{b}_{k_1, \uparrow} \hat{a}_{k_4, \downarrow}^+ \hat{b}_{k_3, \downarrow} \hat{D} | p_2 \rangle_{(s/t)} + \{p_1 \leftrightarrow p_2\}^* \right) \\
&= \left(\frac{UV}{2L^2} \right) \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{1}{e - (E(k_1) + E(k_2) + E(k_3) + E(k_4))} \\
&\quad \left(\delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, 0} \left[\left\{ (\delta_{p_2, k_2} - \delta_{p_2, k_1}) u_2(k_1, k_2, k_3, k_4) \pm (\delta_{p_2, k_4} - \delta_{p_2, k_3}) u_2(k_3, k_4, k_1, k_2) \right\} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left\{ (\delta_{p_1, k_2} - \delta_{p_1, k_1}) v_2(k_1, k_2, k_3, k_4) \pm (\delta_{p_1, k_4} - \delta_{p_1, k_3}) v_2(k_3, k_4, k_1, k_2) \right\} + \{p_1 \leftrightarrow p_2\} \right] \right. \\
&\quad \left. + \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, \pm\pi} \left\{ (\delta_{p_2, k_2} - \delta_{p_2, k_1}) u_1(k_1, k_2, k_3, k_4) \right. \right. \\
&\quad \quad \left. \left. \pm (\delta_{p_2, k_4} - \delta_{p_2, k_3}) u_1(k_3, k_4, k_1, k_2) \right\} \right. \\
&\quad \left. \left. \left\{ (\delta_{p_1, k_2} - \delta_{p_1, k_1}) v_1(k_1, k_2, k_3, k_4) \pm (\delta_{p_1, k_4} - \delta_{p_1, k_3}) v_1(k_3, k_4, k_1, k_2) \right\} + \{p_1 \leftrightarrow p_2\} \right\} \right). \tag{5.81}
\end{aligned}$$

Für die Drei-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins ist die Berechnung des nachfolgenden Matrixelements erforderlich

$$\begin{aligned}
& M_{2,(s/t)}^{UV, DTLA\perp}(e; p_1, p_2) \\
&= \sum_{k_1 < k_3, k_2 < k_4, k_5, k_6} \frac{2UV}{e - \sum_{j=1}^6 E(k_j)} \\
&\quad \left({}_{(s/t)} \langle p_1 | \hat{V} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \hat{b}_{k_5, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_6, \downarrow} | \text{FS} \rangle \langle \text{FS} | \hat{a}_{k_2, \uparrow}^+ \hat{b}_{k_1, \uparrow} \hat{a}_{k_4, \uparrow}^+ \hat{b}_{k_3, \uparrow} \hat{a}_{k_6, \downarrow}^+ \hat{b}_{k_5, \downarrow} \hat{D} | p_2 \rangle_{(s/t)} \right. \\
&\quad \left. + \{p_1 \leftrightarrow p_2\}^* \right). \tag{5.82}
\end{aligned}$$

Mit (C.18) und (C.26) ergibt sich

$$\begin{aligned}
M_{2,(s/t)}^{UV,DTLA\perp}(e;p_1,p_2) &= \left(\frac{UV}{L^2}\right) \sum_{k_1 < k_3, k_2 < k_4, k_5, k_6} \frac{1}{e^{-\sum_{j=1}^6 E(k_j)}} \sum_{f=1,2} \\
&\delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4 + k_5 - k_6, \pm(f-1)\pi} \\
&\left[\left\{ \delta_{k_3, k_4} \delta_{p_2, k_3} u_f(k_1, k_2, k_5, k_6) + \delta_{k_1, k_2} \delta_{p_2, k_1} u_f(k_3, k_4, k_5, k_6) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \delta_{k_1, k_4} \delta_{p_2, k_1} u_f(k_3, k_2, k_5, k_6) - \delta_{k_3, k_2} \delta_{p_2, k_3} u_f(k_1, k_4, k_5, k_6) \right\} \right. \\
&\left. \left\{ \delta_{k_3, k_4} \delta_{p_1, k_3} v_f(k_1, k_2, k_5, k_6) + \delta_{k_1, k_2} \delta_{p_1, k_1} v_f(k_3, k_4, k_5, k_6) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \delta_{k_1, k_4} \delta_{p_1, k_1} v_f(k_3, k_2, k_5, k_6) - \delta_{k_3, k_2} \delta_{p_1, k_3} v_f(k_1, k_4, k_5, k_6) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \pm (\delta_{k_5, k_6} \delta_{p_1, k_5} v_f(k_1, k_2, k_3, k_4) - \delta_{k_5, k_6} \delta_{p_1, k_5} v_f(k_1, k_4, k_3, k_2)) \right\} + \{p_1 \leftrightarrow p_2\} \right]. \tag{5.83}
\end{aligned}$$

5.5 Optische Anregungen

In diesem Abschnitt werden die verschiedenen Möglichkeiten vorgestellt, Exzitonen mithilfe der Matrizen M_0 , M_1 und M_2 zu berechnen. Die konkrete Auswertung der Formeln und der Vergleich mit DMRG-Resultaten findet sich im nächsten Kapitel, Abschnitt 6.3.

5.5.1 Wannier-Störungstheorie

In diesem Kapitel werden die Formeln aus Abschnitt 5.1.2 konkretisiert.

5.5.1.1 Wannier-Störungstheorie erster Ordnung

Nach Gleichung (5.13) ist in erster Ordnung der Wannier-Störungstheorie die Wannier-Matrix mit den Einträgen

$$M^W(p_1, p_2) = M_{0,(s/t)}(p_1, p_2) + M_{1,(s/t)}(p_1, p_2) \tag{5.84}$$

zu diagonalisieren [7]. Daraus erhält man die Eigenenergien $e_{(s/t)}$ und die zugehörigen Eigenzustände mit den Amplituden $w_{(s/t)}(p)$. Man erhält so die Ergebnisse in [2].

5.5.1.2 Wannier-Störungstheorie zweiter Ordnung

Um die Korrektur zweiter Ordnung auszurechnen, muß (5.15) ausgewertet werden. Die Anregungsenergie des Singulett- und Triplett-Exzitons wird korrigiert um den Beitrag zweiter Ordnung

$$e_{(s/t)}^{(2)} = \sum_{|m\rangle \neq |(s/t)\rangle} \frac{\langle (s/t) | \hat{H}_\perp | m \rangle \langle m | \hat{H}_\perp | (s/t) \rangle}{e_{(s/t)}^{(0)} - (E_m^{(0)} - E_0^{(0)})}. \tag{5.85}$$

Dabei wurde die rechte Seite von (5.15) konsequent bis zur zweiten Ordnung in der Störung entwickelt, d.h. der Nenner von (5.85) enthält nur die Beiträge der kinetischen Energie des Exzitons,

$$e_{(s/t)}^{(0)} = \sum_k [w_{(s/t)}(k)]^2 2E(k). \quad (5.86)$$

Im Prinzip ist es denkbar, die vollständige Anregungsenergie des Exzitons im Nenner von (5.85) zu verwenden. Zum einen wäre dies inkonsistent und zum anderen zeigt sich, daß dadurch keine Verbesserung der Ergebnisse erreicht werden kann. Daher wird auf diese Variante nicht weiter eingegangen.

Insgesamt berechnet sich der Energiebeitrag zweiter Ordnung zu

$$e_{(s/t)}^{(2)} = \sum_{p_1, p_2} w_{(s/t)}(p_1) w_{(s/t)}(p_2) M_{2,(s/t)}(e_{(s/t)}^{(0)}; p_1, p_2) - E_0^{(2)}. \quad (5.87)$$

5.5.2 Two-Step-Störungstheorie

Wie in Abschnitt 5.1.3 ausgeführt wurde, stimmen die Ergebnisse der Wannier-Störungstheorie mit denen der Two-Step-Störungstheorie zur ersten Ordnung überein. Zur Auswertung der zweiten Ordnung in (5.25) benötigt man eine weitere Hilfsmatrix mit den Einträgen

$$B_{(s/t)}(p_1, p_2) = \sum_{|m\rangle} {}_{(s/t)}\langle p_1 | \hat{W} | m \rangle \langle m | \hat{W} | p_2 \rangle {}_{(s/t)} \frac{E_m^{(0)} - E_0^{(0)}}{(2E(p_1) - (E_m^{(0)} - E_0^{(0)}))(2E(p_2) - (E_m^{(0)} - E_0^{(0)}))}. \quad (5.88)$$

Um die Einträge der Matrix zu berechnen, müssen lediglich die Energienenner der Ausdrücke in Abschnitt 5.4 geeignet substituiert werden.

Die Energie der exzitonischen Anregungen ergibt sich durch Diagonalisierung der Gesamtmatrix mit den Einträgen

$$A_{(s/t)}(p_1, p_2) = M_{0,(s/t)}(p_1, p_2) + M_{1,(s/t)}(p_1, p_2) + \delta_{p_1, p_2} \left(M_{2,(s/t)}(2E(p_1); p_1, p_1) - E_0^{(2)} \right) \\ (1 - \delta_{p_1, p_2}) \left(M_{2,(s/t)}(2E(p_1); p_1, p_2) + M_{2,(s/t)}(2E(p_2); p_1, p_2) \right. \\ \left. + B_{(s/t)}(p_1, p_2) \right). \quad (5.89)$$

5.5.3 Downfolding-Störungstheorie

In der Downfolding-Störungstheorie muß nach Abschnitt 5.1.4 die effektive Hamilton-Matrix mit den Einträgen

$$F_{(s/t)}(e_{(s/t)}; p_1, p_2) = M_{0,(s/t)}(p_1, p_2) + M_{1,(s/t)}(p_1, p_2) + M_{2,(s/t)}(e_{(s/t)}; p_1, p_2) - \delta_{p_1, p_2} E_0^{(2)} \quad (5.90)$$

diagonalisiert werden. Der niedrigste Eigenwert ist selbstkonsistent zu bestimmen und liefert die exzitonische Anregungsenergie im Downfolding-Formalismus.

6 Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die aus der Störungstheorie gewonnenen Resultate für die Grundzustandsenergie, die Einteilchenlücke und die optischen Anregungen dargestellt und diskutiert. In allen störungstheoretischen Ausdrücken zur Berechnung dieser Größen taucht die Gitterlänge L auf. Im Prinzip ist man an den physikalischen Eigenschaften des Systems im thermodynamischen Limes interessiert und erwartet, daß Korrekturen aufgrund der endlichen Gitterlänge ('Finite-Size-Effekte') systematisch mit steigender Systemgröße abnehmen. Um dieses Verhalten zu analysieren, wird in jedem der folgenden drei Abschnitte zunächst die Abhängigkeit der Resultate von der Gitterlänge untersucht. Für feste Gitterlänge und Dimerisierung wird anschließend die Abhängigkeit der physikalischen Größen von der Coulomb-Wechselwirkung betrachtet, zum einen für ein festes Verhältnis $U/V = 2$, zum anderen für festes $V = t$ als Funktion von U .

Das erweiterte Peierls-Hubbard-Modell ist bereits im Rahmen der Dichtematrix-Renormierungsgruppe (DMRG) untersucht worden [9]. Die DMRG ist ein variationelles Verfahren, welches die Grundzustandsenergien und die zugehörigen Wellenfunktionen berechnet [5, 6]. Diese Methode ist numerisch exakt, intrinsische Fehler liegen im Promillebereich. Sie dient hier als Referenzmethode, um die Resultate der Wannier-Störungstheorie, der Two-Step-Störungstheorie und der Downfolding-Störungstheorie qualitativ und quantitativ zu bewerten.

In einem abschließenden Abschnitt wird die Relevanz der Untersuchung für Experimente in geordneten Polymeren diskutiert.

6.1 Grundzustandsenergie: Vergleich mit DMRG

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie mit denen der DMRG verglichen.

6.1.1 Finite-Size-Effekte

In Abbildung 6.1 ist die Grundzustandsenergiedichte E_0/L als Funktion der inversen Gitterlänge ($1/L$) für festes $U = 2V = 2t$ und $\delta = 0.2$ dargestellt. Während die DMRG-Ergebnisse eine quadratische Abhängigkeit in $(1/L)$ aufweisen, ist die störungstheoretisch berechnete Grundzustandsenergie beinahe konstant, Abweichungen sind kleiner als die Strichstärke.

Der Unterschied zwischen der Störungstheorie und der DMRG ist die Wahl der Randbedingungen. Die DMRG verwendet offene Randbedingungen, die zu den erwarteten erkennbaren systematischen Korrekturen in $(1/L)^2$ zur Energiedichte E_0/L führen. Bei der

Wahl von periodischen Randbedingungen, wie sie in der Störungstheorie verwendet wurden, sind die Korrekturen in $(1/L)^2$ für $\delta = 0.2$ bereits für $U = V = 0$ verschwindend klein. Sie bleiben daher klein im Bereich der Gültigkeit der Störungstheorie. Wesentlich ist hier die Beobachtung, daß die Grundzustandsenergie sowohl in der DMRG als auch in der Störungstheorie bei $L = 100$ konvergiert ist. Bei $L = 100$ sind Unterschiede zwischen den Resultaten der DMRG und der Störungstheorie also signifikant.

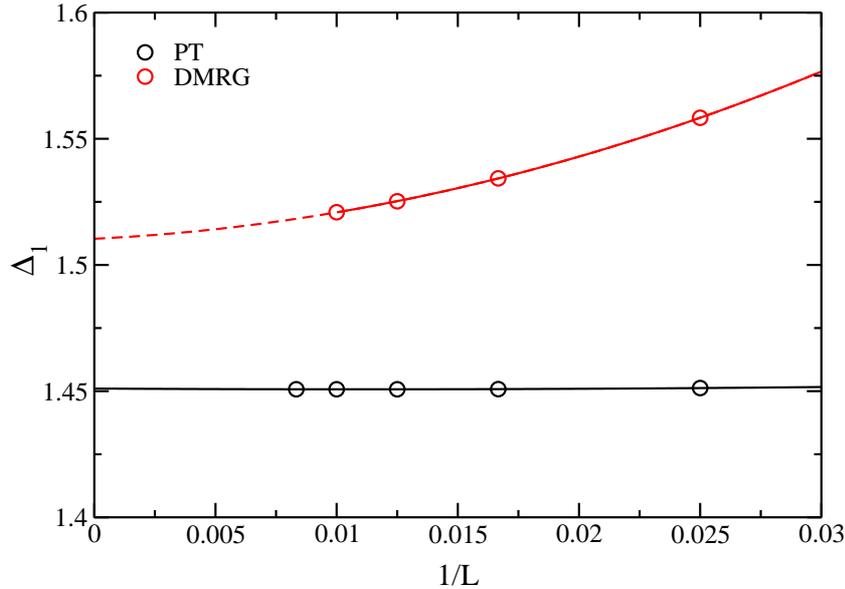


Abbildung 6.1 Abhängigkeit der Energiedichte des Grundzustandes E_0/L von der inversen Gitterlänge ($1/L$) für festes $U = 2V = 2t$ und $\delta = 0.2$ in DMRG und Störungstheorie.

6.1.2 Diskussion

Wie Abbildung 6.1 für $U = 2V = 2t$ und $\delta = 0.2$ zeigt, stimmen die Daten der Störungstheorie hervorragend mit denen der DMRG überein. Erst durch die hohe Auflösung der Ordinate, etwa $0.01t$, ist ein Unterschied überhaupt erkennbar. In Abbildung 6.2 ist die Grundzustandsenergiedichte für $L = 100$, $\delta = 0.2$ und festes Verhältnis $U/V = 2$ als Funktion von V dargestellt. Die Störungstheorie erster Ordnung (PT1) entfernt sich bereits ab $V = 0.5$ von der DMRG-Kurve. Im Gegensatz dazu ist die Störungstheorie zweiter Ordnung (PT) bis über $V = 2$ hinaus fast identisch zu den DMRG-Daten; die Abweichung zur DMRG-Kurve liegt unter einem Prozent.

Um den Einfluß der lokalen Coulomb-Abstoßung genauer zu untersuchen, wird nun U variiert. Abbildung 6.3 zeigt die Grundzustandsenergiedichte als Funktion von U für $L = 100$, $\delta = 0.2$ und $V = t$. Wieder ist eine sehr gute Übereinstimmung zu sehen; die Abweichungen liegen unter einem Prozent, obwohl U schon größer als die Bandbreite $W = 4t$ ist.

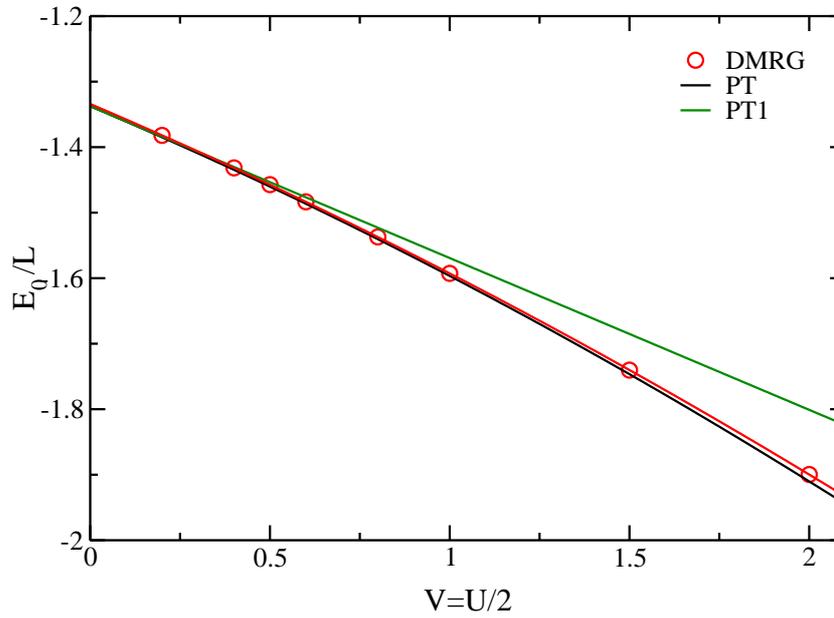


Abbildung 6.2 Abhängigkeit der Energiedichte des Grundzustands E_0/L von V für festes $U/V = 2$, $L = 100$ und $\delta = 0.2$ in DMRG und Störungstheorie.

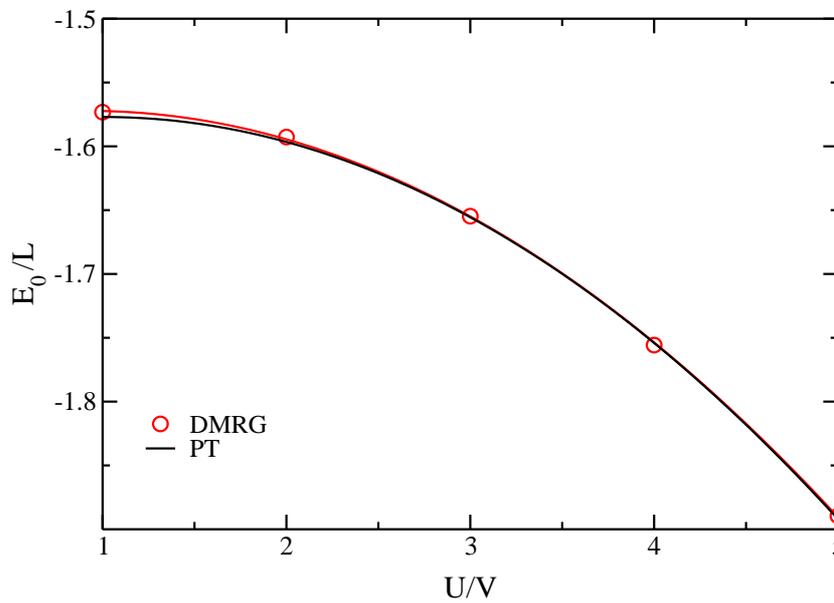


Abbildung 6.3 Abhängigkeit der Energiedichte des Grundzustands E_0/L von U für $V = t$, $L = 100$ und $\delta = 0.2$ in DMRG und Störungstheorie.

Um einen Einblick zu bekommen, in welchem Parameterbereich die ersten relevanten Abweichungen zu finden sind, ist die Grundzustandsenergiedichte als Funktion von U bei konstanten Werten $V = 2t$, $L = 100$ und $\delta = 0.2$ in Abbildung 6.4 dargestellt. Numerische und analytische Ergebnisse stehen bis zu einem Wert von $U \approx 3t$ in Einklang miteinander. Selbst bei sehr großer lokaler Coulomb-Wechselwirkung $U \approx 5t$ liegen die Abweichungen unter zehn Prozent.

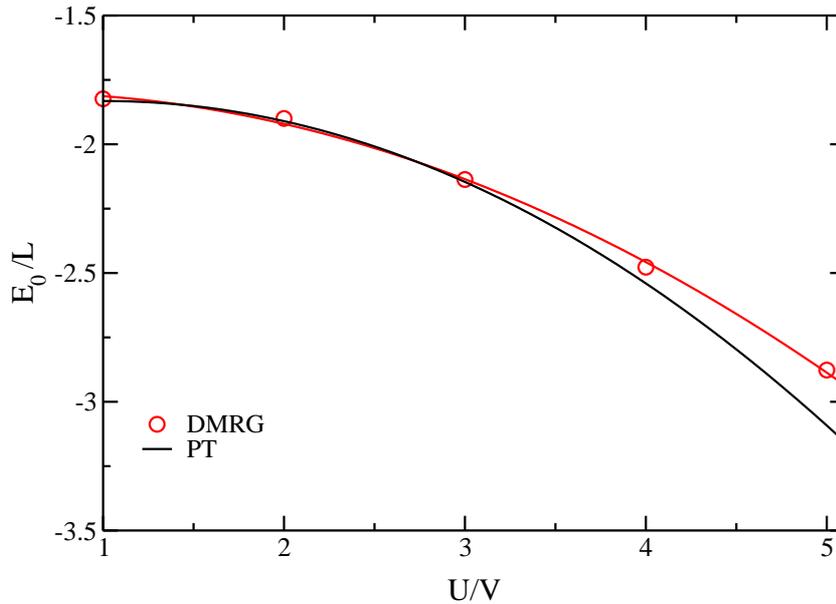


Abbildung 6.4 Abhängigkeit der Energiedichte des Grundzustands E_0/L von U für $V = 2t$, $L = 100$ und $\delta = 0.2$ in DMRG und Störungstheorie.

Die Vergleiche der Grundzustandsenergie der Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie mit den DMRG-Resultaten zeigen, daß die Störungstheorie quantitativ bis in Bereiche großer Coulomb-Parameter U und V eine hervorragende Beschreibung für die Grundzustandsenergie liefert.

6.2 Einteilchenlücke: Vergleich mit DMRG

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse für die Einteilchenlücke dargestellt und mit denen der DMRG verglichen.

6.2.1 Finite-Size-Effekte

Zunächst wird die Abhängigkeit der Einteilchenlücke von der inversen Gitterlänge für feste Dimerisierung $\delta = 0.2$ und feste Coulomb-Wechselwirkung $U = 2V = 2t$ in Abbildung 6.5 dargestellt.

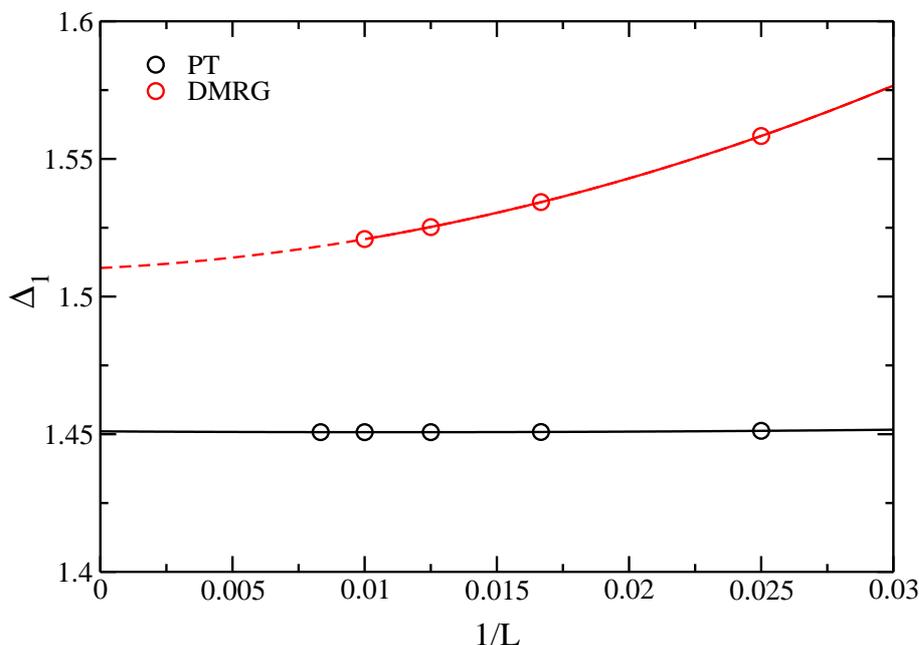


Abbildung 6.5 Abhängigkeit der Einteilchenlücke Δ_1 von der inversen Gitterlänge ($1/L$) für festes $U = 2V = 2t$ und $\delta = 0.2$ in DMRG und Störungstheorie.

Ebenso wie im Falle der Grundzustandsenergie liefert die Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie eine (fast) konstante Einteilchenlücke als Funktion der inversen Gitterlänge. Dies ist leicht verständlich, da die Einteilchenlücke für periodische Randbedingungen und für $U = V = 0$ keine $(1/L)$ -Korrektur aufweist. Finite-Size-Korrekturen bleiben daher klein im Bereich der Gültigkeit der Störungstheorie.

Das DMRG-Resultat zeigt hingegen eine quadratische Abhängigkeit aufgrund der in diesen Rechnungen verwendeten offenen Randbedingungen. Aus Abbildung 6.5 ist erkennbar, daß die Unterschiede zwischen den Resultaten für $L = 100$ und dem thermodynamischen Limes marginal sind. Daher genügt es auch bei der Einteilchenlücke, die Ergebnisse von DMRG und Störungstheorie für festes $L = 100$ zu vergleichen. Wie Abbildung 6.5 bereits zeigt, weichen Resultate der Störungstheorie nur um wenige Prozent von den DMRG-Werten ab, wie im folgenden diskutiert wird.

6.2.2 Diskussion

Das Verhalten der Einteilchenlücke als Funktion von $U/V = 2$ für festes $L = 100$ und $\delta = 0.2$ ist in Abbildung 6.6 gezeigt. Bis zu $V = 1$ verlaufen die Kurven ungefähr linear. Dieses lineare Verhalten für kleine V läßt sich durch Fluktuationen in der Ladungsdichte erklären, welche durch die Dimerisierung hervorgerufen werden. In [9] wurden bereits Ergebnisse der Störungstheorie erster Ordnung (PT1) aus [2] mit den hier dargestellten DMRG-Resultaten verglichen.

Die Störungstheorie zweiter Ordnung verbessert offenbar die Übereinstimmung zwischen Störungstheorie und DMRG nicht entscheidend, da sich die Beiträge von U^2 , V^2 und der Mischterme UV beinahe kompensieren. Jenseits von $U = 2V = 3t$ ist der relative Fehler bereits auf mehr als zehn Prozent angewachsen. Dies ist nicht erstaunlich, denn bei dieser Größe der Coulomb-Wechselwirkung hat sich der Absolutwert der Lücke um einen Faktor 2.5 vergrößert.

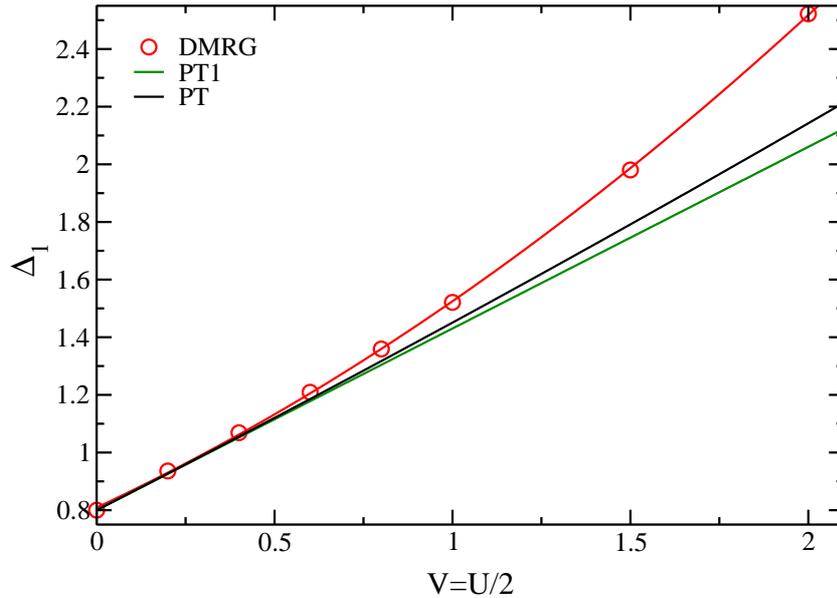


Abbildung 6.6 Abhängigkeit der Einteilchenlücke Δ_1 von V für festes $U/V = 2$, $L = 100$ und $\delta = 0.2$ in DMRG (Punkte) und Störungstheorie. Untere Kurve: Störungstheorie erster Ordnung (PT1), obere Kurve: Störungstheorie zweiter Ordnung (PT).

In Abbildung 6.7 ist das Verhalten der Einteilchenlücke bei variablem U und konstantem $V = t$ für $L = 100$ und $\delta = 0.2$ dargestellt. In der Abbildung ist deutlich zu erkennen, daß die analytischen Resultate qualitativ dasselbe Bild wie die numerischen Ergebnisse liefern. Insgesamt liegt die störungstheoretische Kurve jedoch zu niedrig. Dennoch liefert die Störungstheorie brauchbare Ergebnisse: obwohl sich die Einteilchenlücke gegenüber ihrem Wert bei $U = V = 0$ vervierfacht hat, liegen die Abweichungen immer noch unter zehn Prozent.

Der Wert der Lücke für $V = 1.5t$ und $U = 3.0t$ bei festem $L = 100$ und $\delta = 0.2$ wird als Zahlenbeispiel herausgegriffen. Man findet $\Delta_1^{\text{Abt}} = \Delta_1^{\text{PT1}} = 1.430t$ und $\Delta_1^{\text{DMRG}} = 1.8680t$, das heißt, der Wert der Störungstheorie erster Ordnung weicht um 23 Prozent ab. Die Hinzunahme der zweiten Ordnung in der Störungstheorie führt zu einem Wert der Einteilchenlücke von $\Delta_1^{\text{PT}} = 1.7229t$ und stellt daher bei einer Abweichung von acht Prozent eine wesentliche Verbesserung dar.

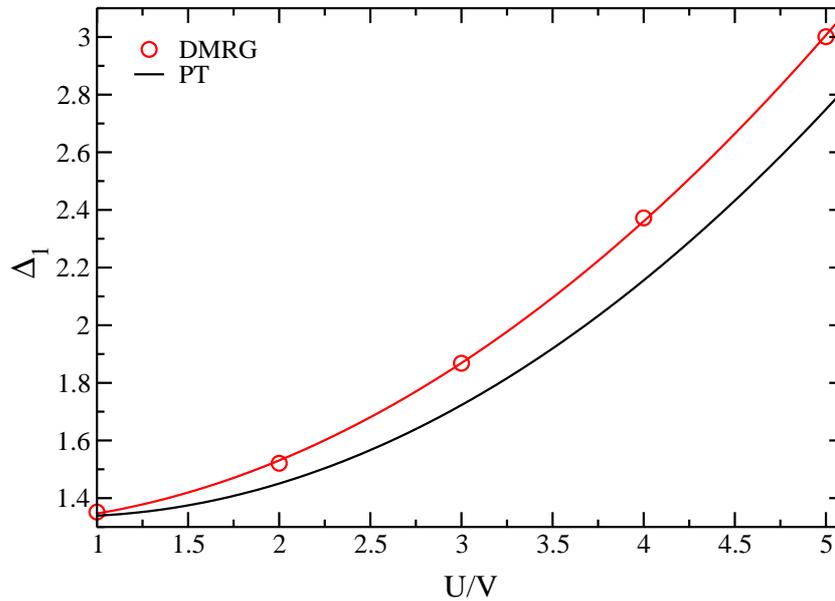


Abbildung 6.7 Abhängigkeit der Einteilchenlücke Δ_1 von U/V für $V = t$, $L = 100$ und $\delta = 0.2$ in DMRG und Störungstheorie.

6.3 Optische Anregungen: Vergleich mit DMRG

In diesem Abschnitt werden die störungstheoretischen Ergebnisse für die optischen Anregungen im erweiterten Peierls-Hubbard-Modell dargestellt und mit den Resultaten der numerisch exakten DMRG verglichen. Insbesondere wird auch die Wannier-Störungstheorie erster Ordnung einbezogen, die bereits von Abe et al. [2] untersucht worden war. In den folgenden Abschnitten sind keine Ergebnisse der Downfolding-Methode dargestellt.

Obwohl die selbstkonsistente, numerische Auswertung der Downfolding-Methode stabil läuft und unabhängig von den Startwerten konvergiert, unterschätzt sie Ladungs- und Spinlücke eklatant und liefert daher keine brauchbaren Ergebnisse. Im folgenden werden die Ladungs- und die Spinlücke ohne die Downfolding-Methode betrachtet.

6.3.1 Ladungslücke (Singulett-Exzitonen)

6.3.1.1 Finite-Size-Effekte

Die Finite-Size-Effekte der Ladungslücken der DMRG und der verschiedenen störungstheoretischen Methoden sind in Abbildung 6.8 dargestellt. Zunächst ist zu sehen, daß der DMRG-Wert quadratisch abnimmt und rasch gegen den Wert im thermodynamischen Limes konvergiert. Dies ist die Signatur für einen gebundenen Zustand [46].

Die störungstheoretischen Methoden schneiden sehr unterschiedlich ab. Die mit PT1 und PT bezeichneten Kurven zeigen eine starke und offenbar qualitativ falsche Abhän-

gigkeit von der Systemgröße. Diese Kurven sind das Ergebnis der Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie in erster und zweiter Ordnung für eine einzelne optische Singulettanregung beim Impuls $p = -\pi/2$. Das $(1/L)$ -Verhalten zeigt, daß es sich weiterhin um ungebundene Teilchen-Loch-Anregungen handelt. Offenbar liefert dieser Zugang unbefriedigende Ergebnisse. Die Wannier-Störungstheorie erster Ordnung (WPT1) und die Two-Step-Störungstheorie (Two-Step-PT) verhalten sich annähernd konstant und zeigen fast keine Abhängigkeit von der Gitterlänge. Diese beiden Zugänge liefern offenbar Exzitonen und damit die qualitativ richtige Physik. Allerdings ist die quantitative Übereinstimmung mit den DMRG Daten unbefriedigend: für $U = 2V = 2t$ ist der Fehler in der Größenordnung von zehn Prozent.

Das Ergebnis der Wannier-Störungstheorie zweiter Ordnung (WPT2) beschreibt eine sehr leicht nach oben gekrümmte Kurve. Diese Krümmung resultiert aus den Termen zweiter Ordnung, in die der Wannier-Zustand eingeht. Trotz der Störterme der zweiten Ordnung bleibt aber der exzitonische Charakter der Anregung erhalten. Insbesondere verbessert sich die Übereinstimmung mit den DMRG-Daten erheblich, für $U = 2V = 2t$ und $\delta = 0.2$ liegt der Fehler im Bereich von einigen Prozent.

Die Analyse der Finite-Size-Effekte zeigt also, daß die Störungstheorie von einer exzitonischen Beschreibung starten muß. Zudem ist der Vergleich zwischen Daten der DMRG und der Störungstheorie für $L = 100$ aussagekräftig.

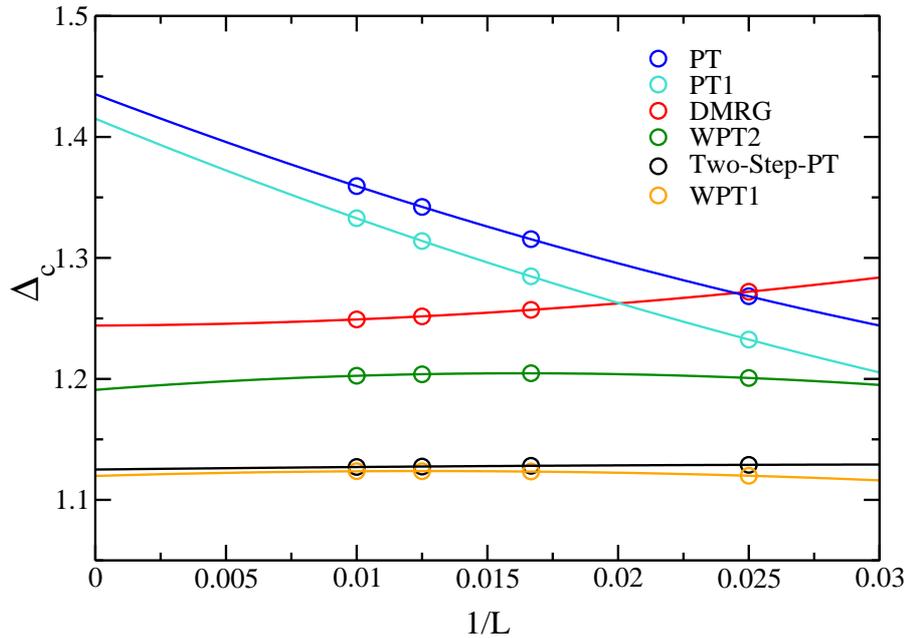


Abbildung 6.8 Abhängigkeit der Ladungslücke Δ_c von der inversen Gitterlänge ($1/L$) für festes $U = 2V = 2t$ und $\delta = 0.2$ in DMRG und Störungstheorie; siehe Text für weitere Erläuterungen.

6.3.1.2 Diskussion

Im folgenden werden die störungstheoretischen Ergebnisse mit denen der DMRG bei fester Gitterlänge $L = 100$ und Dimerisierung $\delta = 0.2$ verglichen. In Abbildung 6.9 ist das Verhalten der Ladungslücke als Funktion von V für festes $U = 2V$ dargestellt. Die DMRG-Kurve verläuft bei kleinen V zunächst linear, zeigt aber bei anwachsendem V zunehmend quadratisches Verhalten mit positiver Krümmung.

Die Übereinstimmung der störungstheoretischen Kurven mit der DMRG-Kurve bei kleinen V ist für alle Ansätze zufriedenstellend. Bei anwachsendem V entwickeln sich die verschiedenen Kurven hingegen auseinander. Die beste Übereinstimmung mit den numerischen Resultaten liefert die Wannier-Störungstheorie zweiter Ordnung (WPT2), die eine deutliche Verbesserung gegenüber der Störungstheorie erster Ordnung (WPT1) bringt. Die Ladungslücke wird etwas unterschätzt, die Abweichungen liegen jedoch selbst bei $V = 1.5t$ unter zehn Prozent. Im Vergleich dazu unterschätzt das WPT1-Ergebnis das DMRG-Resultat an diesem Punkt um 30 Prozent.

Die Kurve der Two-Step-Störungstheorie weicht schon für relativ kleine Werten $V = 0.5t$ vom numerisch exakten Resultat ab und kann dem Verlauf der DMRG-Kurve auch qualitativ nicht folgen, da ihre Krümmung negativ ist. Daher kann die Two-Step-Störungstheorie nur für Ladungslücken bei Werten unter $V = 1$ eine passable Beschreibung liefern, die Abweichung von der numerisch exakten Lösung liegen sonst über zehn Prozent.

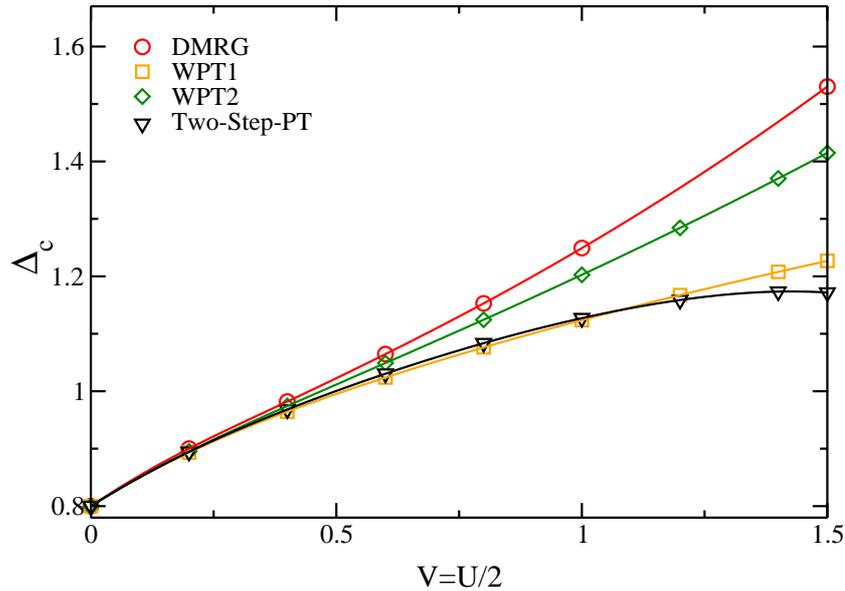


Abbildung 6.9 Abhängigkeit der Ladungslücke Δ_c von V für festes $U/V = 2$, $L = 100$ und $\delta = 0.2$ in DMRG und den verschiedenen störungstheoretischen Ansätzen.

Abbildung 6.10 stellt die Ergebnisse für die Ladungslücke in Abhängigkeit von der lokalen Coulomb-Wechselwirkung U bei konstantem $V = t$, $L = 100$ und $\delta = 0.2$ dar.

Die DMRG-Kurve zeigt ein quadratisches Verhalten, das von allen störungstheoretischen Näherungen qualitativ reproduziert wird. Wieder erweist sich die Wannier-Theorie zweiter Ordnung als die beste Methode; die Abweichungen liegen selbst bei $U = 5t$ bei etwa zehn Prozent. Etwas schlechter ist die Two-Step-Störungstheorie. Das Ergebnis der WPT1 unterschätzt das numerisch exakte Resultat deutlich.

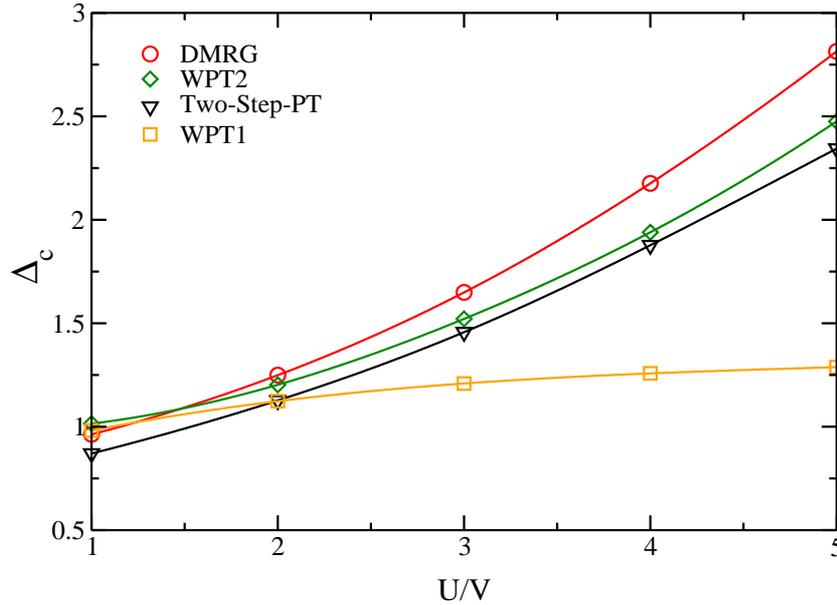


Abbildung 6.10 Abhängigkeit der Ladungslücke Δ_c von U für festes $V = t$, $L = 100$ und $\delta = 0.2$ in DMRG und den verschiedenen störungstheoretischen Ansätzen.

6.3.2 Spinlücke (Triplet-Exzitonen)

6.3.2.1 Finite-Size-Effekte

Die Finite-Size-Analyse zeigt, daß auch die niedrigste Tripletanregung exzitonischen Charakter hat.

In Abbildung 6.11 ist die Abhängigkeit der numerisch und analytisch ermittelten Spinlücken von der inversen Gitterlänge am Punkt $U = 2V = 2t$ und für festes $\delta = 0.2$ dargestellt. Wie auch bei der Ladungslücke zeigt die DMRG-Kurve eine sehr schwache Abhängigkeit von der Systemgröße und konvergiert rasch gegen ihren Wert im thermodynamischen Limes. Dieses Verhalten als Funktion der Systemgröße ist wieder ein deutliches Zeichen für eine gebundene Teilchen-Loch-Anregung, in diesem Fall ein Triplet-Exziton.

Die gewöhnliche Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie (PT) kann dieses Verhalten nicht reproduzieren und beschreibt wiederum nur eine ungebundene Teilchen-Loch-Anregung. Im Gegensatz dazu beschreiben die anderen störungstheoretischen Verfahren exziton-

sche Anregungen, wie die geringen Finite-Size-Effekte zeigen. Wie im Falle des Singulett-Exzitons liefert die Wannier-Störungstheorie zweiter Ordnung (WPT2) die beste Übereinstimmung mit den DMRG-Daten. Für $U = 2V = 2t$ und $\delta = 0.2$ betragen die Fehler nur einige Prozent, während die Two-Step-Störungstheorie die Anregungsenergie um mehr als zehn Prozent unterschätzt. Wie für alle vorherigen physikalische Größen genügt es, den Vergleich für $L = 100$ Gitterplätze durchzuführen.

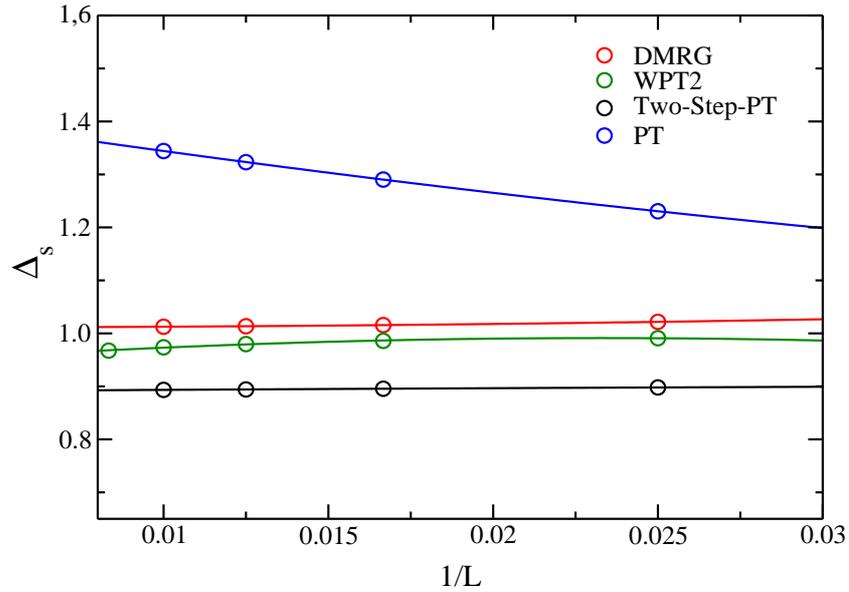


Abbildung 6.11 Abhängigkeit der Spinlücke Δ_s von der inversen Gitterlänge ($1/L$) für festes $U = 2V = 2t$ und $\delta = 0.2$ in DMRG und Störungstheorie.

6.3.2.2 Diskussion

Im folgenden werden die Gitterlänge $L = 100$, die Dimerisierung $\delta = 0.2$ und das Verhältnis $U/V = 2$ festgehalten. Die Spinlücken der Störungstheorie werden den numerisch exakten DMRG-Resultaten gegenübergestellt.

Wie man an Abbildung 6.12 sieht, steigt die DMRG-Spinlücke in Abhängigkeit von V nur sehr schwach an und nimmt ab $V = 1$ wieder langsam ab. Daran kann man erkennen, daß Korrekturen dritter Ordnung wichtig werden. Wieder ist es die Kurve aus der Wannier-Theorie zweiter Ordnung (WPT2), die den DMRG-Datenpunkten der Spinlücke am nächsten kommt. Nur für kleine Werte von V liefern auch die Wannier-Theorie erster Ordnung (WPT1) sowie die Two-Step-Störungstheorie (Two-Step-PT) akzeptable Werte für die Spinlücke. Aus dem Vergleich mit der WPT1 läßt sich schließen, daß Korrekturen zweiter Ordnung in der Spinlücke erst bei deutlich größeren V als im Falle der Ladungslücke eine Rolle spielen. Der relative Fehler ist jedoch größer als bei der Ladungslücke und liegt bereits bei $U = 2V = 3t$ bei etwa zwanzig Prozent.

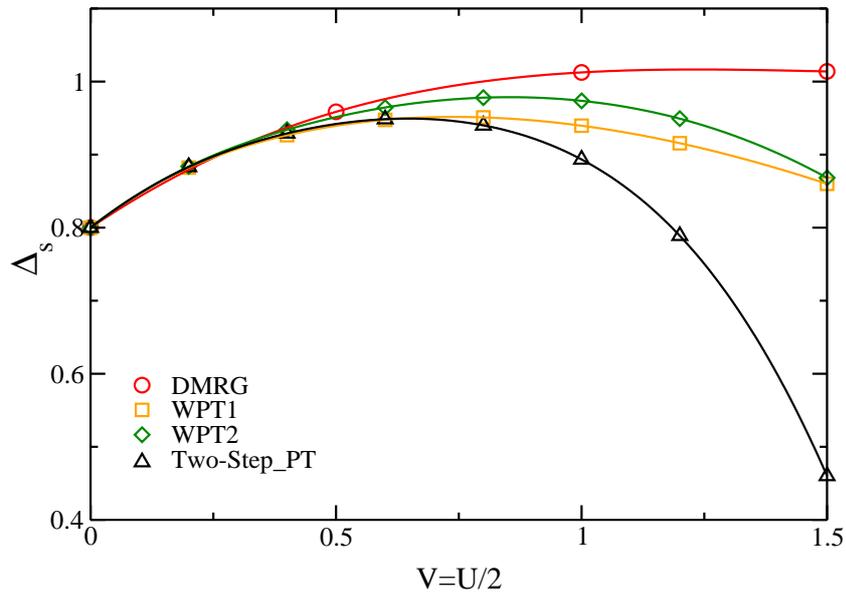


Abbildung 6.12 Abhängigkeit der Spinlücke Δ_s von V für festes $U/V = 2$, $L = 100$ und $\delta = 0.2$ in DMRG und den verschiedenen störungstheoretischen Ansätzen.

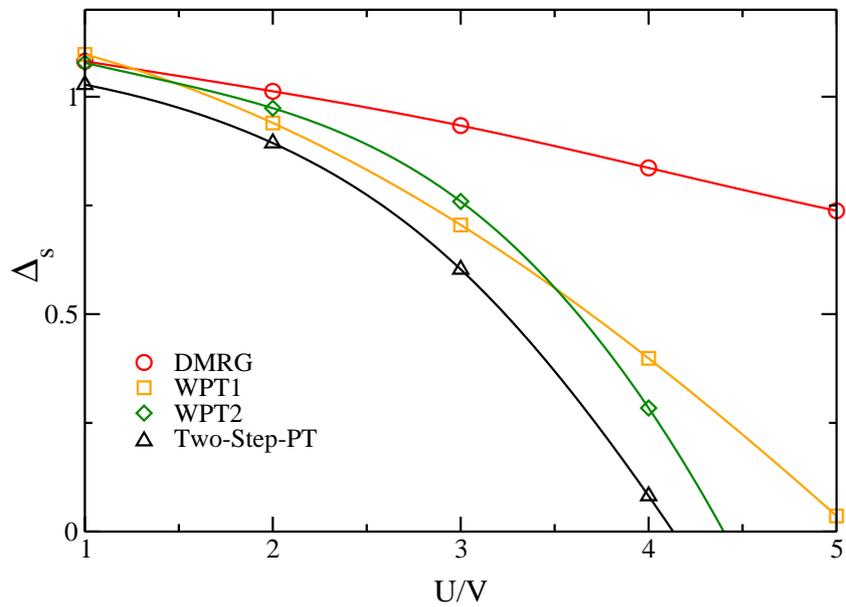


Abbildung 6.13 Abhängigkeit der Spinlücke Δ_s von U/V für festes $V = t$, $L = 100$ und $\delta = 0.2$ in DMRG und den verschiedenen störungstheoretischen Ansätzen.

Abbildung 6.13 zeigt die analytischen und die DMRG-Resultate für die Spinlücke in Abhängigkeit der Hubbard-Wechselwirkung U bei festem $V = 1$, $L = 100$ und $\delta = 0.2$. Die numerisch exakte DMRG-Kurve fällt langsam ab. Qualitativ und quantitativ sind die störungstheoretischen Ergebnisse für die Spinlücke wenig befriedigend. Bei $U = 2V = 4t$ weichen diese eklatant vom DMRG-Wert ab. Dies ist jedoch nicht erstaunlich, da sich die Spinanregungen des System für $U \geq 5$ mithilfe eines Peierls-Heisenberg-Modells quantitativ beschreiben lassen. Jegliche Störungstheorie um den Limes kleiner Coulomb-Wechselwirkung ist für diese Parameter unzulässig.

6.3.3 Zusammenhang mit dem Experiment

Das erweiterte Peierls-Hubbard-Modell ermöglicht eine genaue Untersuchung der Effekte einer statischen Verzerrung und der Coulomb-Wechselwirkung auf die elektronische Struktur. Es sollte daher eine brauchbare Beschreibung für quasi-eindimensionale Materialien mit alternierenden Bindungslängen liefern, wie beispielsweise das π -konjugierte Polymer Polyacetylen.

Die Parameter des Modells, U , V und δ , sind über experimentelle Daten festzulegen. Die exzitonischen Anregungen in Polydiacetylenen haben Bindungsenergien von 0.9 eV für den ersten angeregten Triplettzustand und 0.5 eV für den ersten angeregten Singulettzustand [8, 47]. Die Energie der Einteilchenlücke beträgt etwa 2.3 eV. Mit der dielektrischen Konstante ε , dem durchschnittlichen Atomabstand a_0 und der Elementarladung e kann das Potential V auch als $e^2/(\varepsilon a_0)$ geschrieben werden.

In [2] wird die dielektrische Konstante im Bereich von $\varepsilon \approx 5$ angesetzt. Mit $a_0 \approx 1.4 \text{ \AA}$ ergibt sich $V \approx 2 \text{ eV}$. Aus den Ergebnissen der Wannier-Störungstheorie erster Ordnung wird in [2] der Schluß gezogen, daß die Parameter für Polydiacetylen $U = 2t$, $V = t$ und $\delta = 0.2$ mit $t = 2 \text{ eV}$ passend seien. Zwar stimmen die Bindungsenergien an diesem Punkt recht gut mit den experimentellen Resultaten überein, die Ladungslücke ergibt jedoch $\Delta_1 = 1.43t = 2.86 \text{ eV}$ und liegt damit deutlich zu hoch. Da gezeigt wurde, daß die Abweichung der störungstheoretisch bestimmten Ladungslücke bei der Gitterlänge $L = 100$ und $\delta = 0.2$ an diesem Punkt unter fünf Prozent liegt, sollte man eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment erwarten dürfen.

Ursache für die Diskrepanz ist die Annahme $\delta = 0.2$. Dies führt sofort zu dem Ergebnis einer sehr hohen ‘nackten’ Einteilchenlücke $\Delta_1(U = 0, V = 0) = 0.8t = 1.6 \text{ eV}$. Korrekturen aufgrund der Wechselwirkung führen daher schon für die viel zu kleinen Werte $U = 1.2t$ und $V = 0.6t$ zu einer mit dem Experiment übereinstimmenden Einteilchenlücke von $\Delta_1^{\text{PT1}} = 1.18t = 2.36 \text{ eV}$. Der Wert von $V = 0.6t = 1.2 \text{ eV}$ entspricht einer dielektrischen Konstante von $\varepsilon > 8$, der nicht mehr mit den typischen Werten für Polymeren in Einklang gebracht werden kann; realistische Werte liegen etwa bei $\varepsilon \approx 3$. Aus dieser Beobachtung läßt sich der Schluß ziehen, daß für die Dimerisierung ein deutlich kleinerer Wert und für die Coulomb-Wechselwirkung ein größerer Wert zu wählen ist, um diese Materialien korrekt beschreiben zu können.

Die Annahme $\delta = 0.2$ ist auch aus einem weiteren Grund sehr fraglich. Diese sehr große Dimerisierung würde eine entsprechend starke Elektron-Gitter-Wechselwirkung implizie-

ren. Legt man jedoch gemessene Werte für Benzene zugrunde [1], so erhält man $\delta \approx 0.1$ nur etwa halb so groß wie von Abe et al. [2] zugrunde gelegt.

δ	U	V	Δ_1	Δ_c	Δ_s	$\Delta_{\text{Bind,S}}$	$\Delta_{\text{Bind,T}}$
0.10	1.0	1.0	1.54	1.01	1.22	0.526	0.322
0.10	2.0	1.0	1.75	1.44	1.05	0.304	0.694
0.10	3.0	1.0	2.22	1.97	0.54	0.260	1.69
0.15	1.0	1.0	2.13	1.47	1.70	0.664	0.432
0.15	2.0	1.0	2.35	1.94	1.52	0.412	0.834
0.15	3.0	1.0	2.87	2.53	1.07	0.340	1.80

Tabelle 6.1 WPT2-Resultate für Einteilchen-, Ladungs- und Spinlücke sowie die Bindungsenergie des ersten angeregten Singulett- und Triplettzustands für feste Gitterlänge $L = 100$ und $t = 2 \text{ eV}$. Alle Energien in eV.

In Tabelle 6.1 sind Ergebnisse der Wannier-Störungstheorie zweiter Ordnung für $\delta = 0.1$ und $\delta = 0.15$ dargestellt. Um den experimentellen Wert der Einteilchenlücke $\Delta_1^{\text{exp}} = 2.3 \text{ eV}$ zu erhalten, sind deutlich höhere Coulomb-Parameter zu wählen als im Fall $\delta = 0.2$: $U \approx 6 \text{ eV}$ und $V \approx 2 \text{ eV}$ bei fester Dimerisierung $\delta = 0.1$ bzw. $U \approx 4 \text{ eV}$ und $V \approx 2 \text{ eV}$ bei $\delta = 0.15$. Dies führt zu den Bindungsenergien $\Delta_{\text{Bind,S}} \approx 0.26 \text{ eV}$ und $\Delta_{\text{Bind,T}} \approx 1.69 \text{ eV}$ beziehungsweise $\Delta_{\text{Bind,S}} \approx 0.41 \text{ eV}$ und $\Delta_{\text{Bind,T}} \approx 0.83 \text{ eV}$. Es ist also sinnvoll, den Wert der Dimerisierung erheblich zu reduzieren.

In Abbildung 6.14 sind die im Rahmen der Wannier-Störungstheorie zweiter Ordnung (WPT2) berechneten Spin- und Ladungslücken und die Einteilchenlücke der Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie (PT) bei festem $V = t$, Gitterlänge $L = 100$ und Dimerisierung $\delta = 0.1$ in Abhängigkeit von U dargestellt. Abbildung 6.15 zeigt die Bindungsenergien für den niedrigsten angeregten Singulett- und Triplettzustand als Funktion von U/V bei festem $V = t$, Gitterlänge $L = 100$ und Dimerisierung $\delta = 0.1$. Da die Störungstheorie die Einteilchenlücke und die Ladungslücke stets unterschätzt, ist zu erwarten, daß diese Effekte sich grob kompensieren. Die Anpassung der experimentellen Ergebnisse für feste Dimerisierung $\delta = 0.1$ an die Einteilchenlücke führt zu recht hohen Parametern $U \approx 3.1t = 6.2 \text{ eV}$, welche am Rande des Anwendungsbereichs der WPT2 für die Ladungs- und die Spinlücke und die damit verbundenen Bindungsenergien liegen. Diese können daher nur bedingt zur Bestimmung der Parameter des Modells herangezogen werden. Es ist deutlich zu sehen, daß die Ladungslücke schnell anwächst, womit eine geringe Bindungsenergie einhergeht. Um für die Singulettanregung eine Bindungsenergie von 0.5 eV zu erhalten, müßte daher $U = t$ gewählt werden, was der Anpassung der Einteilchenlücke widerspricht.

Offenbar gelingt es auch bei $\delta = 0.1$ nicht, die störungstheoretisch berechneten Daten für die Einteilchenlücke und die Ladungslücke mit denen des Experiments in Einklang zu bringen. Demzufolge ist an zwei Punkten anzusetzen. Zum ersten ist der Wert der Dimerisierung selbst von der Stärke der Coulomb-Wechselwirkung abhängig [1] und sollte daher selbstkonsistent bestimmt werden. Dies stellt kein grundsätzliches Problem für die

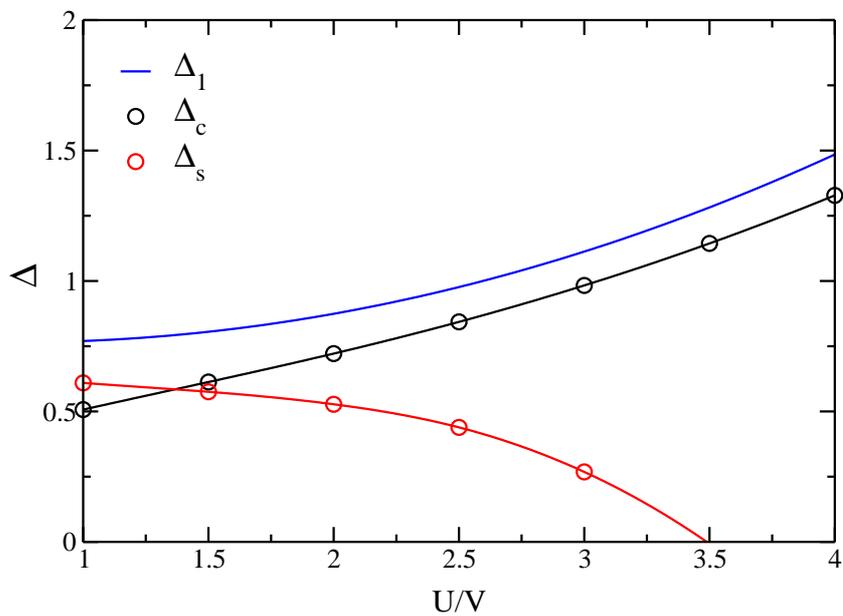


Abbildung 6.14 Abhängigkeit der Ladungs- und Spingap $\Delta_{c/s}$ von U/V für festes $V = t$, $L = 100$ und $\delta = 0.1$ in der Wannier-Störungstheorie zweiter Ordnung.

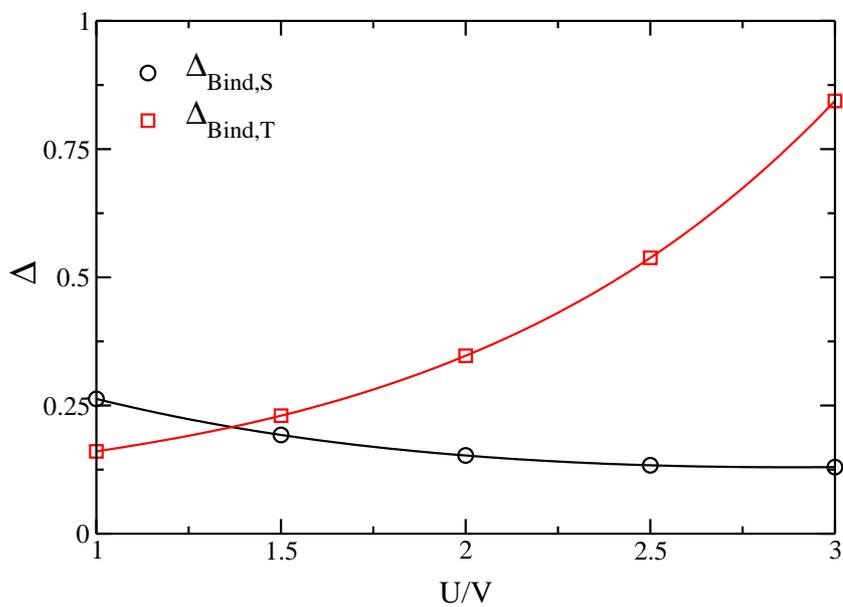


Abbildung 6.15 Bindungsenergien der Wannier-Störungstheorie zweiter Ordnung für das Singulett- und Triplet-Exziton $\Delta_{\text{Bind,S/T}}$ in Abhängigkeit von U/V für festes $V = t$, $L = 100$ und $\delta = 0.1$.

Störungstheorie dar, da die Grundzustandsenergie mit hoher Genauigkeit als Funktion von (δ, U, V) berechnet werden kann. Zusammen mit der in δ quadratischen Gitterenergie muß lediglich die Gesamtenergie minimiert werden. Zum zweiten ist der Wert der dielektrischen Konstante mit $\varepsilon = 5$ deutlich zu hoch angesetzt. Typischerweise findet man $\varepsilon \approx 3$, so daß realistischere Coulomb-Parameter bei $V \approx 3.3$ eV und $U \approx 6.6$ eV liegen sollten. Für diese Werte ergeben variationelle Rechnungen, daß die Dimerisierung im Bereich von $\delta \approx 0.06$ zu finden sein sollte. Bei einer solch kleinen Peierls-Lücke nimmt die Genauigkeit der Störungstheorie schnell mit der Größe der Coulomb-Parameter ab: die Störungstheorie wird unzuverlässig.

Der Hauptnutzen der vorgelegten störungstheoretischen Untersuchungen besteht darin, daß ein Großteil des Parameterbereichs (δ, U, V) mit geringem numerischen Aufwand und vernünftiger Genauigkeit abgefahren werden kann. Auch eine Modifikation der langreichweitigen Anteile des Potentials (Ohno-Potential statt $(1/r)$ -Potential) ist kein Problem. Auch wenn die Störungstheorie für optische Anregungen keine perfekte Beschreibung quasi-eindimensionaler Materialien mit Gitterverzerrung liefern kann, so bietet sie dennoch eine sehr gute Orientierungshilfe, um die für Experimente relevanten Punkte im Parameterraum zu finden. Genauere DMRG-Studien, die einen Faktor 100 und mehr Rechenzeit beanspruchen, können dort ansetzen.

7 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde das erweiterte Peierls-Hubbard-Modell mit feldtheoretischen und störungstheoretischen Methoden untersucht.

Feldtheorie

Das linearisierte bosonisierte Peierls-Hubbard-Modell mit Nächst-Nachbar-Wechselwirkung wurde einer semiklassischen und feldtheoretischen Mean-Field-Analyse unterzogen. In Übereinstimmung mit den Resultaten der zugehörigen Renormierungsgruppengleichungen zeigt sich, daß der Peierls-Term die Physik dominant bestimmt.

Im Ladungsdichtewelle-Regime gibt es für sehr kleine Dimerisierung einen endlichen Bereich der Koexistenz der Peierls- und der Ladungsdichtewelle-Phase. Oberhalb eines kritischen Wertes für die Dimerisierung verschwindet die Ladungsdichtewelle vollständig und das System ist ein reiner Peierls-Isolator. Dieser Quanten-Phasenübergang konnte mit der DMRG bestätigt werden [40].

In der Mott-Hubbard-Phase ist es stets der Peierls-Term, der die Physik des erweiterten Hubbard-Modells bestimmt. Sowohl Ladungs- als auch Spinlücke sind endlich, und die Topologie der Anregungen unterscheidet sich deutlich von der des erweiterten Hubbard-Modells. Das erweiterte Peierls-Hubbard-Modell beschreibt bei halber Bandfüllung einen Peierls-Mott-Isolator.

Störungstheorie zweiter Ordnung

Aufgrund der Ergebnisse der Feldtheorie ist das Peierls-Modell ein statthafter Ausgangspunkt für eine Analyse, in der die Coulomb-Wechselwirkung als Störung betrachtet wird. In der Störungstheorie wurde daher bei fester Dimerisierung eine Entwicklung bis zur zweiten Ordnung in der Coulomb-Wechselwirkung unter der Annahme eines $(1/r)$ -Potentials für die langreichweitigen Anteile vorgenommen.

Die Grundzustandsenergie und die Einteilchenlücke wurden im Rahmen der Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie berechnet. Die optischen Anregungen wurden mithilfe der Wannier-Störungstheorie, der Two-Step-Störungstheorie und der Downfolding-Methode zur zweiten Ordnung bestimmt. Damit wird die Grenze des analytisch und numerisch Machbaren erreicht.

Für feste Dimerisierung $\delta = 0.2$ zeigt der Vergleich mit den numerisch exakten Ergebnissen der Dichtematrix-Renormierungsgruppe (DMRG), daß die Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie die Grundzustandsenergie auch für große Coulomb-Parameter hervorragend beschreibt. Auch für die Einteilchenlücke erreicht die Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie eine annehmbare Übereinstimmung mit der DMRG. Abweichungen von weniger als

zehn Prozent erhält man noch für Coulomb-Parameter, bei denen die Einteilchenlücke sich im Vergleich zum ungestörten Modell bereits verdreifacht hat; tendenziell unterschätzt sie das exakte Resultat.

Für die optischen Anregungen stimmen die verschiedenen Verfahren nur im Bereich schwacher Kopplung miteinander überein. Jenseits dieses Bereichs ergibt der selbstkonsistente Downfolding-Zugang viel zu niedrige Singulett- und Triplett-Anregungsenergien und ist daher zur Beschreibung optischer Anregungen für realistische Parameterbereiche unbrauchbar. Für moderate Coulomb-Wechselwirkung zeigt auch die Two-Step-Störungstheorie keine gute Übereinstimmung mehr mit den DMRG-Daten. Die besten Ergebnisse liefert die Wannier-Störungstheorie zweiter Ordnung (WPT2). Bis zum zweifachen Wert der ungestörten Ladungslücke folgen die WPT2-Resultate den DMRG-Daten mit Abweichungen von weniger als zehn Prozent. Für die Spinlücke hingegen kann keiner der störungstheoretischen Ansätze zufriedenstellende Ergebnisse bereitstellen, sobald der unmitttelbare Gültigkeitsbereich der Störungstheorie verlassen wird.

Im Vergleich zu der von Abe et al. [2] durchgeführten Wannier-Störungstheorie erster Ordnung schneidet die WPT2 ungleich besser ab, besonders für die Grundzustandsenergie und die Ladungslücke. Die WPT2-Daten zeigen, daß der in [2] verwendete Parametersatz nicht für die Beschreibung von Poly(di)acetylen geeignet ist. Insbesondere ist die Dimerisierung $\delta = 0.2$ zu hoch und die Stärke der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung V zu niedrig angesetzt.

Weitergehende Fragestellungen

In zukünftigen Untersuchungen sollte die Dimerisierung mithilfe der Gesamtenergie aus elektronischem und elastischem Gitterbeitrag selbstkonsistent bestimmt werden. Vermutlich wird die auf diese Art gewonnene Dimerisierung $\delta = 0.1$ oder kleiner sein. Dementsprechend müssen U und V größer als bei Abe et al. [2] gewählt werden. In diesem Parameterbereich sollte die Störungstheorie für die Grundzustandsenergie noch brauchbare Ergebnisse liefern. Bei der Berechnung der Anregungen wird sie schnell die Grenzen der Belastbarkeit erreichen.

Dennoch erlaubt es die hier durchgeführte Störungstheorie, den Parameterraum effizient zu durchsuchen und allgemeine Verhaltensweisen und Trends aufzuspüren. Zum Beispiel kann die Form des Coulomb-Potentials leicht modifiziert werden, so daß die Unterschiede zwischen dem $(1/r)$ -Potential, dem Ohno-Potential und der reinen Nächst-Nachbar-Wechselwirkung herausgearbeitet werden können. Quantitativ genauere, aber auch deutlich aufwendigere DMRG-Rechnungen können an diesem Punkt ansetzen.

A Linearisierung und Bosonisierung

A.1 Kinetische Energie

Zuerst wird die kinetische Energie linearisiert

$$\begin{aligned}
\hat{T} &= -t \sum_{l=1, \sigma}^L \left[\hat{c}_{l, \sigma}^+ \hat{c}_{l+1, \sigma} + \text{h.c.} \right] \\
&= -t \sum_{\sigma} \int \frac{dx}{a_0} a_0 \left[\left(e^{-ik_F x} \hat{R}_{\sigma}^+(x) + e^{ik_F x} \hat{L}_{\sigma}^+(x) \right) \right. \\
&\quad \left. \left(e^{ik_F(x+a_0)} \hat{R}_{\sigma}(x+a_0) + e^{-ik_F(x+a_0)} \hat{L}_{\sigma}(x+a_0) \right) + \text{h.c.} \right] \\
&= -t \sum_{\sigma} \int dx \left[e^{ik_F a_0} \hat{R}_{\sigma}^+(x) \hat{R}_{\sigma}(x+a_0) + e^{-ik_F a_0} \hat{L}_{\sigma}^+(x) \hat{L}_{\sigma}(x+a_0) + \text{h.c.} \right], \quad (\text{A.1})
\end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt benutzt wird, daß das Integral über stark oszillierende Terme verschwindet. Durch eine Taylor-Entwicklung

$$\hat{\Psi}_{\sigma}(x+a_0) \approx \hat{\Psi}_{\sigma}(x) + a_0 \frac{\partial}{\partial x} \hat{\Psi}_{\sigma}(x) \quad (\Psi = R, L) \quad (\text{A.2})$$

erhält man

$$\begin{aligned}
\hat{T} &\approx -t \sum_{\sigma} \int dx \left[e^{ik_F a_0} \left(\hat{R}_{\sigma}^+(x) \hat{R}_{\sigma}(x) + a_0 \hat{R}_{\sigma}^+(x) \partial_x \hat{R}_{\sigma}(x) \right) \right. \\
&\quad \left. + e^{-ik_F a_0} \left(\hat{L}_{\sigma}^+(x) \hat{L}_{\sigma}(x) + a_0 \hat{L}_{\sigma}^+(x) \partial_x \hat{L}_{\sigma}(x) \right) + \text{h.c.} \right] \\
&\approx -t \sum_{\sigma} \int dx \left[2 \cos(k_F a_0) \left(\hat{R}_{\sigma}^+(x) \hat{R}_{\sigma}(x) + \hat{L}_{\sigma}^+(x) \hat{L}_{\sigma}(x) \right) \right. \\
&\quad \left. + e^{-ik_F a_0} \hat{R}_{\sigma}^+(x) \hat{R}_{\sigma}(x) + e^{-ik_F a_0} \hat{L}_{\sigma}^+(x) \hat{L}_{\sigma}(x) \right. \\
&\quad \left. + 2ia_0 \sin(k_F a_0) \left(\hat{R}_{\sigma}^+(x) \partial_x \hat{R}_{\sigma}(x) - \hat{L}_{\sigma}^+(x) \partial_x \hat{L}_{\sigma}(x) \right) \right] \\
&= -iv_F \sum_{\sigma} \int dx \left[\hat{R}_{\sigma}^+(x) \partial_x \hat{R}_{\sigma}(x) - \hat{L}_{\sigma}^+(x) \partial_x \hat{L}_{\sigma}(x) \right], \quad (\text{A.3})
\end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt die konstanten Terme, welche nur eine Renormierung der Grundzustandsenergie verursachen, weggelassen wurden und außerdem $v_F = 2ta_0 \sin(k_F a_0)$ benutzt wurde.

Das Bosonisieren des Terms $\hat{\Psi}_\sigma^+(x)\partial_x\hat{\Psi}_\sigma(x)$ für $\hat{\Psi} = \hat{R}, \hat{L}$ wird hier exemplarisch für $\hat{\Psi} = \hat{R}$ gezeigt. Dazu führt man das sogenannte *Point-Splitting* durch, indem man einen künstlichen Abstand ϵ einführt, den man am Ende wieder Null setzt. Es ist zweckmäßig, komplexe Koordinaten zu benutzen

$$\begin{aligned} z &= -i(x - v_F t), & \partial_z &= \frac{-i}{2} \left(\frac{1}{v_F} \partial_t - \partial_x \right), \\ \bar{z} &= i(x - v_F t), & \partial_{\bar{z}} &= \frac{-i}{2} \left(\frac{1}{v_F} \partial_t + \partial_x \right). \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Damit ist ($\epsilon \rightarrow 0^+$)

$$\begin{aligned} \hat{R}_\sigma^+(x)\partial_x\hat{R}_\sigma(x) &= -i \left[\hat{R}_\sigma^+(z + \epsilon)\partial_z\hat{R}_\sigma(z) - \left\langle \hat{R}_\sigma^+(z + \epsilon)\partial_z\hat{R}_\sigma(z) \right\rangle \right] \\ &= -i \frac{\eta_\sigma^2}{2\pi a_0} \frac{1}{\epsilon} \left[\exp \left(\frac{i}{\sqrt{2}} \varphi_\sigma(z + \epsilon) \right) \right. \\ &\quad \left. \left\{ \exp \left(-\frac{i}{\sqrt{2}} \varphi_\sigma(z) \right) - \exp \left(-\frac{i}{\sqrt{2}} \varphi_\sigma(z - \epsilon) \right) \right\} - \left(\frac{a_0}{\epsilon} - \frac{a_0}{2\epsilon} \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

wobei im letzten Schritt (4.20) eingesetzt wurde. Des weiteren ist

$$\begin{aligned} \hat{R}_\sigma^+(x)\partial_x\hat{R}_\sigma(x) &= -\frac{i}{2\pi a_0} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{a_0}{\epsilon^2} \left[\exp \left(\frac{i}{\sqrt{2}} (\varphi_\sigma(z + \epsilon) - \varphi_\sigma(z)) \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \exp \left(\frac{i}{\sqrt{2}} (\varphi_\sigma(z + \epsilon) - \varphi_\sigma(z - \epsilon)) \right) - \frac{1}{2} \right] \\ &= -\frac{i}{2\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon^2} \left[\exp \left(\frac{i\epsilon}{\sqrt{2}} \partial_z \varphi_\sigma(z) \right) - \frac{1}{2} \exp \left(\frac{2i\epsilon}{\sqrt{2}} \partial_z \varphi_\sigma(z) \right) - \frac{1}{2} \right] \\ &= -\frac{i}{2\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon^2} \left[\frac{1}{2} \left\{ \frac{i\epsilon}{\sqrt{2}} \partial_z \varphi_\sigma(z) \right\}^2 - \frac{1}{4} \left\{ \frac{2i\epsilon}{\sqrt{2}} \partial_z \varphi_\sigma(z) \right\}^2 \right] \\ &= -\frac{i}{8\pi} (\partial_z \varphi_\sigma(z))^2. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Analog erhält man

$$\hat{L}_\sigma^+(x)\partial_x\hat{L}_\sigma(x) = \frac{i}{8\pi} (\partial_{\bar{z}} \bar{\varphi}_\sigma(\bar{z}))^2. \quad (\text{A.7})$$

Insgesamt ergibt sich für den kinetischen Term

$$\begin{aligned} \hat{T} &\approx \frac{-v_F}{8\pi} \sum_\sigma \left[(\partial_z \varphi_\sigma)^2 + (\partial_{\bar{z}} \bar{\varphi}_\sigma)^2 \right] \\ &= \frac{-v_F}{8\pi} \left[(\partial_z \Phi_c)^2 + (\partial_{\bar{z}} \bar{\Phi}_c)^2 + (\partial_z \Phi_s)^2 + (\partial_{\bar{z}} \bar{\Phi}_s)^2 \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Ausgedrückt in den ursprünglichen Koordinaten erhält man

$$\begin{aligned}
\hat{T} &= \frac{v_F}{32\pi} \left[\left(\left(\frac{1}{v_F} \partial_t - \partial_x \right) \Phi_c \right)^2 + \left(\left(\frac{1}{v_F} \partial_t + \partial_x \right) \Phi_c \right)^2 \right. \\
&\quad \left. + \left(\left(\frac{1}{v_F} \partial_t - \partial_x \right) \Phi_s \right)^2 + \left(\left(\frac{1}{v_F} \partial_t + \partial_x \right) \Phi_s \right)^2 \right] \\
&= \frac{v_F}{16\pi} \left[\left(\frac{1}{v_F} \partial_t \Phi_c \right)^2 + (\partial_x \Phi_c)^2 + \left(\frac{1}{v_F} \partial_t \Phi_s \right)^2 + (\partial_x \Phi_s)^2 \right] \\
&= \frac{v_F}{16\pi} \left[(\partial_x \Theta_c)^2 + (\partial_x \Phi_c)^2 + (\partial_x \Theta_s)^2 + (\partial_x \Phi_s)^2 \right]. \tag{A.9}
\end{aligned}$$

A.2 Bosonisierung von Dichteoperatoren

In diesem Abschnitt werden fermionische Dichten der Art $\hat{J}_\sigma(x) = \hat{R}_\sigma^+(x)\hat{R}_\sigma(x)$ und $\hat{\tilde{J}}_\sigma(x) = \hat{L}_\sigma^+(x)\hat{L}_\sigma(x)$ bosonisiert. Diese Dichten tauchen in den g_2 - und g_4 -Ausdrücken des Hamilton-Operators auf. Wieder benutzt man die Methode des Point-Splittings ($\epsilon = 0^+$)

$$\begin{aligned}
\hat{J}_\sigma(x) &= \hat{R}_\sigma^+(x)\hat{R}_\sigma(x) \\
&= \hat{R}_\sigma^+(z + \epsilon)\hat{R}_\sigma(z) - \langle \hat{R}_\sigma^+(z + \epsilon)\hat{R}_\sigma(z) \rangle \\
&= \frac{1}{2\pi a_0} \left[\exp\left(\frac{i}{\sqrt{2}}\varphi_\sigma(z + \epsilon)\right) \exp\left(-\frac{i}{\sqrt{2}}\varphi_\sigma(z)\right) - \frac{a_0}{\epsilon} \right] \\
&= \frac{1}{2\pi a_0} \left[\frac{a_0}{\epsilon} \exp\left(\frac{i\epsilon}{\sqrt{2}}\partial_z\varphi_\sigma(z)\right) \exp\left(-\frac{i}{\sqrt{2}}\varphi_\sigma(z)\right) - \frac{a_0}{\epsilon} \right] \\
&= \frac{1}{2\pi a_0} \frac{a_0}{\epsilon} \left[1 + \frac{i\epsilon}{\sqrt{2}}\partial_z\varphi_\sigma(z) - 1 \right] \\
&= \frac{i}{\sqrt{8\pi^2}}\partial_z\varphi_\sigma(z). \tag{A.10}
\end{aligned}$$

Dieses Ergebnis wird nun anhand von Spin- und Ladungsfeldern ausgedrückt,

$$\begin{aligned}
\hat{J}_\sigma(x) &= \frac{i}{4\pi}\partial_z(\phi_c + f_\sigma\phi_s) \\
&= \frac{i}{4\pi}\partial_z(\Phi_c + f_\sigma\Phi_s) \\
&= \frac{1}{8\pi} \left(\frac{1}{v_F}\partial_t - \partial_x \right) (\Phi_c + f_\sigma\Phi_s) \\
&= -\frac{1}{8\pi}\partial_x(\Phi_c + f_\sigma\Phi_s + (\Theta_c + f_\sigma\Theta_s)). \tag{A.11}
\end{aligned}$$

Analog erhält man

$$\begin{aligned}
 \hat{J}_\sigma(x) &= \hat{L}_\sigma^+(x)\hat{L}_\sigma(x) \\
 &= \frac{-i}{\sqrt{8\pi^2}}\partial_{\bar{z}}\bar{\varphi}_\sigma(\bar{z}) \\
 &= -\frac{1}{8\pi}\partial_x [\Phi_c + f_\sigma\Phi_s - (\Theta_c + f_\sigma\Theta_s)] .
 \end{aligned} \tag{A.12}$$

B Hilfsfunktionen und nützliche Kontraktionen

Die diskreten Impulse sind gegeben durch ($L/4 \in \mathbb{N}$, $a_0 \equiv 1$)

$$k \in \{-\pi/2 + 2\pi m/L \mid m = 0, \dots, L/2 - 1\}. \quad (\text{B.1})$$

Die Dispersion $E(k)$ ist mit

$$\begin{aligned} \epsilon(k) &= -2t \cos(k), \\ \Delta(k) &= 2t\delta \sin(k), \\ E(k) &= \sqrt{\epsilon(k)^2 + \Delta(k)^2}. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Die Fouriertransformation ist definiert durch ($-\pi \leq p < \pi$)

$$\begin{aligned} \hat{c}_{l,\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_p e^{ipl} \hat{c}_{p,\sigma}, \\ \hat{c}_{p,\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l=1}^L e^{-ipl} \hat{c}_{l,\sigma}. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Die fermionischen Quasiteilchenoperatoren sind

$$\begin{aligned} \hat{a}_{k,\sigma} &= \alpha_k \hat{c}_{k,\sigma} + i\beta_k \hat{c}_{k+\pi,\sigma}, \\ \hat{b}_{k,\sigma} &= \beta_k \hat{c}_{k,\sigma} - i\alpha_k \hat{c}_{k+\pi,\sigma}. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Die Rücktransformation lautet

$$\begin{aligned} \hat{c}_{k,\sigma} &= \alpha_k \hat{a}_{k,\sigma} + \beta_k \hat{b}_{k,\sigma}, \\ \hat{c}_{k+\pi,\sigma} &= -i\beta_k \hat{a}_{k,\sigma} + i\alpha_k \hat{b}_{k,\sigma}. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Außerdem gilt

$$\begin{aligned} 2\alpha_k \beta_k &= -2t\delta \sin(k)/E(k), \\ \alpha_k^2 - \beta_k^2 &= 2t \cos(k)/E(k). \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Für die Berechnung von Matrixelementen der lokalen Coulomb-Wechselwirkung U erweisen sich folgende Hilfsfunktionen als nützlich

$$f_1(k_1, k_2) \equiv \alpha_{k_1} \beta_{k_2} - \alpha_{k_2} \beta_{k_1} = -f_1(k_2, k_1), \quad (\text{B.7})$$

$$f_2(k_1, k_2) \equiv \alpha_{k_1} \alpha_{k_2} + \beta_{k_1} \beta_{k_2} = f_2(k_2, k_1), \quad (\text{B.8})$$

$$u_1(k_1, k_2, k_3, k_4) \equiv f_1(k_2, k_1) f_1(k_4, k_3) - f_2(k_2, k_1) f_2(k_4, k_3), \quad (\text{B.9})$$

$$u_2(k_1, k_2, k_3, k_4) \equiv f_1(k_2, k_1) f_2(k_4, k_3) + f_1(k_4, k_3) f_2(k_2, k_1). \quad (\text{B.10})$$

Zur Vereinfachung von Matrixelementen der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung werden weitere Funktionen definiert,

$$A_\delta(r) \equiv \frac{1}{L} \sum_k \frac{\cos(k) \cos(kr)}{\sqrt{\cos(k)^2 + \delta^2 \sin(k)^2}} = A_\delta(-r), \quad (\text{B.11})$$

$$B_\delta(r) \equiv \frac{1}{L} \sum_k \frac{\delta \sin(k) \sin(kr)}{\sqrt{\cos(k)^2 + \delta^2 \sin(k)^2}} = -B_\delta(-r), \quad (\text{B.12})$$

$$v_0(k) \equiv \sum_{-L/2 < r < L/2, r|2=1} \frac{1}{2|r|} \frac{4t}{E(k)} \left(\delta \sin(k) \cos(kr) A_\delta(r) - \cos(k) \sin(kr) B_\delta(r) \right), \quad (\text{B.13})$$

wobei $(r|2=1)$ alle ungeraden r bezeichnet. Außerdem werden

$$C_+(k_1, k_2) \equiv \sum_{r \neq 0} \frac{1}{2|r|} 2 \cos(r(k_1 - k_2)), \quad (\text{B.14})$$

$$C_-(k_1, k_2) \equiv \sum_{r \neq 0} \frac{(-1)^r}{2|r|} 2 \cos(r(k_1 - k_2)) \quad (\text{B.15})$$

und

$$v_1(k_1, k_2, k_3, k_4) \equiv C_+(k_3, k_4) f_1(k_2, k_1) f_1(k_4, k_3) - C_-(k_3, k_4) f_2(k_2, k_1) f_2(k_4, k_3), \quad (\text{B.16})$$

$$v_2(k_1, k_2, k_3, k_4) \equiv C_+(k_3, k_4) f_1(k_4, k_3) f_2(k_2, k_1) + C_-(k_3, k_4) f_1(k_2, k_1) f_2(k_4, k_3) \quad (\text{B.17})$$

eingeführt.

Im folgenden sind einige Kontraktionen zusammengestellt, die in der störungstheoretischen Berechnung von Energien häufig auftauchen. Dabei steht der Ausdruck $\langle \hat{O} \rangle_0$ kurz für den Erwartungswert des Operators \hat{O} im Grundzustand $|\text{FS}\rangle$ des Peierls-Isolators ohne Coulomb-Wechselwirkung. Als Paarkontraktionen erhält man

$$\langle \hat{n}_{l,\sigma} \rangle_0 = \frac{1}{2}, \quad (\text{B.18})$$

$$\langle \hat{c}_{l,\sigma}^+ \hat{c}_{l+r,\sigma} \rangle_0 = \frac{1}{2} \delta_{r,0} + \frac{1 - (-1)^r}{2} (A_\delta(r) + (-1)^l B_\delta(r)) \quad (\text{B.19})$$

$$= \langle \hat{c}_{l+r,\sigma}^+ \hat{c}_{l,\sigma} \rangle_0, \quad (\text{B.20})$$

$$\langle \hat{c}_{l,\sigma}^+ \hat{a}_{k,\sigma} \rangle_0 = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-ikl} (\alpha_k + i(-1)^l \beta_k), \quad (\text{B.21})$$

$$\langle \hat{c}_{l,\sigma} \hat{b}_{k,\sigma}^+ \rangle_0 = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikl} (\beta_k + i(-1)^l \alpha_k). \quad (\text{B.22})$$

Wesentliche Kontraktionen mit vier Fermioperatoren sind

$$\langle \hat{n}_{l,\sigma} \hat{b}_{k_1,\sigma}^+ \hat{a}_{k_2,\sigma} \rangle_0 = \frac{1}{L} e^{i(k_1-k_2)l} (f_1(k_2, k_1) + i(-1)^l f_2(k_2, k_1)), \quad (\text{B.23})$$

$$\left\langle \hat{b}_{k_1,\sigma} \left(\hat{n}_{l,\sigma} - \frac{1}{2} \right) \hat{b}_{k_2,\sigma}^+ \right\rangle_0 = \frac{1}{L} e^{-i(k_1-k_2)l} (f_2(k_2, k_1) + i(-1)^l f_1(k_2, k_1)), \quad (\text{B.24})$$

$$\left\langle \hat{a}_{k_1,\sigma}^+ \left(\hat{n}_{l,\sigma} - \frac{1}{2} \right) \hat{a}_{k_2,\sigma} \right\rangle_0 = -\frac{1}{L} e^{i(k_1-k_2)l} (f_2(k_2, k_1) + i(-1)^{(l+1)} f_1(k_2, k_1)), \quad (\text{B.25})$$

$$\langle \hat{b}_{k,\sigma} \hat{c}_{l+r,\sigma}^+ \rangle_0 \langle \hat{c}_{l,\sigma} \hat{b}_{k,\sigma}^+ \rangle_0 = \frac{1}{L} e^{-ikr} (\beta_k^2 + (-1)^r \alpha_k^2 + i(-1)^l (1 - (-1)^r) \alpha_k \beta_k), \quad (\text{B.26})$$

$$\langle \hat{a}_{k,\sigma}^+ \hat{c}_{l+r,\sigma} \rangle_0 \langle \hat{c}_{l,\sigma}^+ \hat{a}_{k,\sigma} \rangle_0 = -\frac{1}{L} e^{ikr} (\alpha_k^2 + (-1)^r \beta_k^2 + i(-1)^l (1 - (-1)^r) \alpha_k \beta_k). \quad (\text{B.27})$$

Als Beispiel sei die Berechnung von (B.19) vorgeführt. Es ist

$$\begin{aligned} \langle \hat{c}_{l,\sigma}^+ \hat{c}_{l+r,\sigma} \rangle_0 &= \frac{1}{L} \sum_{-\pi \leq q, p < \pi} e^{-ipl} e^{iq(l+r)} \langle \hat{c}_{p,\sigma}^+ \hat{c}_{q,\sigma} \rangle_0 \\ &= \frac{1}{L} \sum_{-\pi \leq p < \pi} e^{ipr} \left(\langle \hat{c}_{p,\sigma}^+ \hat{c}_{p,\sigma} \rangle_0 + (-1)^{l+r} \langle \hat{c}_{p,\sigma}^+ \hat{c}_{p+\pi,\sigma} \rangle_0 \right) \\ &= \frac{1}{L} \sum_k e^{ikr} \left[\left(\langle \hat{c}_{k,\sigma}^+ \hat{c}_{k,\sigma} \rangle_0 + (-1)^r \langle \hat{c}_{k+\pi,\sigma}^+ \hat{c}_{k+\pi,\sigma} \rangle_0 \right) \right. \\ &\quad \left. + (-1)^{l+r} \left(\langle \hat{c}_{k,\sigma}^+ \hat{c}_{k+\pi,\sigma} \rangle_0 + (-1)^r \langle \hat{c}_{k+\pi,\sigma}^+ \hat{c}_{k,\sigma} \rangle_0 \right) \right] \\ &= \frac{1}{L} \sum_k e^{ikr} \left[\left(\frac{1 + (-1)^r}{2} \right) (1 + (-1)^l \cdot 0) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{1 - (-1)^r}{2} \right) \left(\left(\frac{-\varepsilon(k)}{E(k)} \right) + (-1)^l \left(\frac{-\Delta(k)}{E(k)} \right) \right) \right] \\ &\equiv \frac{1}{2} \delta_{r,0} + \left(\frac{1 - (-1)^r}{2} \right) (A_\delta(r) + (-1)^l B_\delta(r)), \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

wobei $A_\delta(r)$ und $B_\delta(r)$ in (B.11) und (B.12) definiert sind.

C Matricelemente

C.1 Matricelemente des Grundzustandes

Die Matricelemente sind abhängig von den Impulsen der Anregungen. Um die Notation zu vereinfachen, wird die Teilchen-Loch-Symmetrie der Terme \hat{D} und \hat{V} nicht mehr explizit hingeschrieben, sondern durch einen zusätzlichen Index $\langle \dots \rangle^{\text{HF}}$ ausgedrückt.

C.1.1 Matricelemente der lokalen Coulomb-Wechselwirkung

C.1.1.1 Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit parallelen Spins

Hierfür gibt es keinen Beitrag.

C.1.1.2 Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins

Es ergibt sich

$$\begin{aligned}
 & U \sum_{l=1}^L \left\langle \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l,\downarrow} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_4,\downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
 &= U \sum_{l=1}^L \left\langle \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \left\langle \hat{n}_{l,\downarrow} \hat{b}_{k_3,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_4,\downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
 &= \frac{U}{L} \left\{ \delta_{k_1-k_2+k_3-k_4,0} (f_1(k_2, k_1) f_1(k_4, k_3) - f_2(k_2, k_1) f_2(k_4, k_3)) \right. \\
 &\quad \left. + i \delta_{k_1-k_2+k_3-k_4, \pm\pi} (f_1(k_2, k_1) f_2(k_4, k_3) + f_2(k_2, k_1) f_1(k_4, k_3)) \right\} \\
 &= \frac{U}{L} \left\{ \delta_{k_1-k_2+k_3-k_4,0} u_1(k_1, k_2, k_3, k_4) + i \delta_{k_1-k_2+k_3-k_4, \pm\pi} u_2(k_1, k_2, k_3, k_4) \right\}, \quad (\text{C.1})
 \end{aligned}$$

wobei im vorletzten Schritt (B.23) eingegangen ist.

C.1.2 Matricelemente der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung

Das Potential der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung wird durch ein $1/r$ -Potential beschrieben, $V(r) = \sum_{r \neq 0} V/(2|r|)$.

C.1.2.1 Ein-Teilchen-Loch-Anregungen

$$\begin{aligned}
& \sum_{l,r \neq 0} V(r) \left\langle \hat{n}_{l,\sigma} \hat{n}_{l+r,\sigma} \hat{b}_{k_1,\sigma}^+ \hat{a}_{k_2,\sigma} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
&= \sum_{l,r \neq 0} V(r) \left\langle \hat{c}_{l,\sigma} \hat{c}_{l+r,\sigma}^+ \right\rangle_0 \left(\left\langle \hat{c}_{l+r,\sigma} \hat{b}_{k_1,\sigma}^+ \right\rangle_0 \left\langle \hat{c}_{l,\sigma}^+ \hat{a}_{k_2,\sigma} \right\rangle_0 + \left\langle \hat{c}_{l,\sigma} \hat{b}_{k_1,\sigma}^+ \right\rangle_0 \left\langle \hat{c}_{l+r,\sigma}^+ \hat{a}_{k_2,\sigma} \right\rangle_0 \right) \\
&= \sum_{\substack{-L/2 < r < L/2 \\ r|2=1}} V(r) \delta_{k_1, k_2} \left(-4\alpha_{k_1} \beta_{k_1} \cos(k_1 r) A_\delta(r) - 2(\alpha_{k_1}^2 - \beta_{k_1}^2) \sin(k_1 r) B_\delta(r) \right) \\
&\equiv V \delta_{k_1, k_2} v_0(k_1), \tag{C.2}
\end{aligned}$$

wobei (B.19), (B.21), (B.22) und (B.6) eingegangen sind.

C.1.2.2 Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins

Der Beitrag lautet

$$\begin{aligned}
& \sum_{l,r \neq 0} V(r) \left\langle [\hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l+r,\downarrow} + \hat{n}_{l+r,\uparrow} \hat{n}_{l,\downarrow}] \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_4,\downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
&= \sum_{l,r \neq 0} V(r) \left(\left\langle \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \left\langle \hat{n}_{l+r,\downarrow} \hat{b}_{k_3,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_4,\downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} + \{l \longleftrightarrow (l+r)\} \right) \\
&= \sum_{r \neq 0} \frac{V(r)}{L} 2 \cos((k_3 - k_4)r) \\
&\quad \left\{ \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, 0} (f_1(k_2, k_1) f_1(k_4, k_3) - (-1)^r f_2(k_2, k_1) f_2(k_4, k_3)) \right. \\
&\quad \left. + i \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, \pm \pi} (f_2(k_2, k_1) f_1(k_4, k_3) + (-1)^r f_1(k_2, k_1) f_2(k_4, k_3)) \right\} \\
&= \frac{V}{L} \{ \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, 0} v_1(k_1, k_2, k_3, k_4) + i \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, \pm \pi} v_2(k_1, k_2, k_3, k_4) \} \tag{C.3}
\end{aligned}$$

mit (B.23).

C.1.2.3 Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit parallelen Spins

Für identische Teilchen muß zum Beispiel ($k_1 < k_3$) und ($k_2 < k_4$) gewählt werden,

$$\begin{aligned}
ZTLA &= \sum_{l,r \neq 0} V(r) \left\langle \hat{n}_{l,\sigma} \hat{n}_{l+r,\sigma} \hat{b}_{k_1,\sigma}^+ \hat{a}_{k_2,\sigma} \hat{b}_{k_3,\sigma}^+ \hat{a}_{k_4,\sigma} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
&= \sum_{l,r \neq 0} V(r) \left(\left[\left\langle \hat{n}_{l,\sigma} \hat{b}_{k_1,\sigma}^+ \hat{a}_{k_2,\sigma} \right\rangle_0^{\text{HF}} \left\langle \hat{n}_{l+r,\sigma} \hat{b}_{k_3,\sigma}^+ \hat{a}_{k_4,\sigma} \right\rangle_0^{\text{HF}} + \{l \leftrightarrow (l+r)\} \right] \right. \\
&\quad \left. - \left[\left\langle \hat{n}_{l,\sigma} \hat{b}_{k_1,\sigma}^+ \hat{a}_{k_4,\sigma} \right\rangle_0^{\text{HF}} \left\langle \hat{n}_{l+r,\sigma} \hat{b}_{k_3,\sigma}^+ \hat{a}_{k_2,\sigma} \right\rangle_0^{\text{HF}} + \{l \leftrightarrow (l+r)\} \right] \right). \tag{C.4}
\end{aligned}$$

Die Berechnung ergibt

$$ZTLA = \frac{V}{L} \left(\delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, 0} [v_1(k_1, k_2, k_3, k_4) - v_1(k_1, k_4, k_3, k_2)] \right. \\ \left. + i\delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, \pm\pi} [v_2(k_1, k_2, k_3, k_4) - v_2(k_1, k_4, k_3, k_2)] \right), \quad (C.5)$$

wobei hier (C.3) eingegangen ist.

C.2 Matricelemente der Einteilchenlücke

C.2.1 Matricelemente der lokalen Coulomb-Wechselwirkung

C.2.1.1 Ein-Teilchen-Loch-Anregungen

Damit das Matricelement der Ein-Teilchen-Loch-Anregungen nicht wegen der Teilchen-Loch-Symmetrie verschwindet, muß der Spin dieser Anregung dem des zusätzlichen Elektrons bei ($p = -\pi/2$) entgegengesetzt sein. Man erhält

$$U \sum_{l=1}^L \left\langle \hat{b}_{p, \uparrow} \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l, \downarrow} \hat{b}_{k_1, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_2, \downarrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \right\rangle_0^{\text{HF}} \\ = U \sum_{l=1}^L \left\langle \hat{b}_{p, \uparrow} \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \right\rangle_0^{\text{HF}} \left\langle \hat{n}_{l, \downarrow} \hat{b}_{k_1, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_2, \downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\ = \frac{U}{L} \left\{ \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, 0} (f_1(k_2, k_1) f_2(p, k_3) + f_2(k_2, k_1) f_1(p, k_3)) \right. \\ \left. + i\delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, \pm\pi} (f_2(k_2, k_1) f_2(p, k_3) - f_1(k_2, k_1) f_1(p, k_3)) \right\} \\ = \frac{U}{L} \left\{ \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, 0} u_2(k_1, k_2, k_3, p) + i\delta_{k_1 - k_2 + k_3 - p, \pm\pi} (-u_1(k_1, k_2, k_3, p)) \right\}. \quad (C.6)$$

C.2.1.2 Zwei-Teilchen-Loch-Anregung mit entgegengesetzten Spins

Das Matricelement für Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins läßt sich auf das entsprechende Grundzustandsmatricelement (C.1) zurückführen. Es ergibt sich

$$U \sum_{l=1}^L \left\langle \hat{b}_{p, \uparrow} \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l, \downarrow} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_4, \downarrow} \hat{b}_{p, \uparrow}^+ \right\rangle_0^{\text{HF}} \\ = U (1 - \delta_{p, k_1}) \sum_{l=1}^L \left\langle \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l, \downarrow} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_4, \downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}}. \quad (C.7)$$

C.2.2 Matrixelemente der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung

C.2.2.1 Matrixelement zur ersten Ordnung

Zur ersten Ordnung in V trägt folgendes Matrixelement bei

$$\begin{aligned}
& \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} V(r) \left\langle \hat{b}_{p,\uparrow} [\hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l+r,\uparrow} + \hat{n}_{l,\downarrow} \hat{n}_{l+r,\downarrow}] \hat{b}_{p,\uparrow}^+ \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
&= \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} V(r) \left\{ -2 \left| \left\langle \hat{c}_{l,\uparrow} \hat{c}_{l+r,\uparrow}^+ \right\rangle_0 \right|^2 \right. \\
&\quad \left. + \left\langle \hat{c}_{l,\uparrow} \hat{c}_{l+r,\uparrow}^+ \right\rangle_0 \left(\left\langle \hat{b}_{p,\uparrow} \hat{c}_{l,\uparrow}^+ \right\rangle_0 \left\langle \hat{c}_{l+r,\uparrow} \hat{b}_{p,\uparrow}^+ \right\rangle_0 + \left\langle \hat{b}_{p,\uparrow} \hat{c}_{l+r,\uparrow}^+ \right\rangle_0 \left\langle \hat{c}_{l,\uparrow} \hat{b}_{p,\uparrow}^+ \right\rangle_0 \right) \right\} \\
&= -2L \sum_{\substack{-L/2 < r < L/2 \\ r|2=1}} V(r) [A_\delta(r)^2 + B_\delta(r)^2] \\
&\quad + \sum_{\substack{-L/2 < r < L/2 \\ r|2=1}} \frac{V(r)}{E(p)} \{4t \cos(p) \cos(pr) A_\delta(r) + 4t \delta \sin(p) \sin(pr) B_\delta(r)\}. \quad (\text{C.8})
\end{aligned}$$

C.2.2.2 Ein-Teilchen-Loch-Anregungen mit parallelen Spins

Für ($k_1 < k_3$) ist

$$\begin{aligned}
ETLA &= \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} V(r) \left\langle \hat{b}_{p,\uparrow} \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l+r,\uparrow} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\uparrow}^+ \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
&= \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} V(r) \left\{ \left[\delta_{p,k_3} \left\langle \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l+r,\uparrow} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left(\left\langle \hat{b}_{p,\uparrow} \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\uparrow}^+ \right\rangle_0^{\text{HF}} \left\langle \hat{n}_{l+r,\uparrow} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} + \{l \leftrightarrow (l+r)\} \right) \right] \right. \\
&\quad \left. - \left[k_3 \leftrightarrow k_1 \right] \right\}. \quad (\text{C.9})
\end{aligned}$$

Die Berechnung ergibt

$$\begin{aligned}
ETLA &= \frac{V}{L} \left\{ \delta_{p,k_3} \delta_{k_1,k_2} Lv_0(k_1) - \delta_{p,k_1} \delta_{k_3,k_2} Lv_0(k_3) \right. \\
&\quad \left. + \delta_{k_1-k_2+k_3-p,0} [v_2(k_3, p, k_1, k_2) - v_2(k_1, p, k_3, k_2)] \right. \\
&\quad \left. + i \delta_{k_1-k_2+k_3-p,\pm\pi} [-v_1(k_3, p, k_1, k_2) + v_1(k_1, p, k_3, k_2)] \right\}. \quad (\text{C.10})
\end{aligned}$$

C.2.2.3 Ein-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins

Es ist

$$\begin{aligned}
& \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} V(r) \left\{ \left\langle \hat{b}_{p,\uparrow} \hat{n}_{l,\downarrow} \hat{n}_{l+r,\downarrow} \hat{b}_{k_1,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_2,\downarrow} \hat{b}_{k_3,\uparrow}^+ \right\rangle_0^{\text{HF}} \right. \\
& \quad \left. + \left\langle \hat{b}_{p,\uparrow} [\hat{n}_{l,\downarrow} \hat{n}_{l+r,\uparrow} + \hat{n}_{l+r,\downarrow} \hat{n}_{l,\uparrow}] \hat{b}_{k_1,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_2,\downarrow} \hat{b}_{k_3,\uparrow}^+ \right\rangle_0^{\text{HF}} \right\} \\
& = \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} V(r) \left\{ \delta_{p,k_3} \left\langle \hat{n}_{l,\downarrow} \hat{n}_{l+r,\downarrow} \hat{b}_{k_1,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_2,\downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \right. \\
& \quad \left. + \left\langle \hat{b}_{p,\uparrow} \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\uparrow}^+ \right\rangle_0^{\text{HF}} \left\langle \hat{n}_{l+r,\downarrow} \hat{b}_{k_1,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_2,\downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} + [l \leftrightarrow (l+r)] \right\} \\
& = \frac{V}{L} \left\{ \delta_{p,k_3} \delta_{k_1,k_2} L v_0(k_1) + \delta_{k_1-k_2+k_3-p,0} v_2(k_3, p, k_1, k_2) \right. \\
& \quad \left. + i \delta_{k_1-k_2+k_3-p, \pm\pi} (-v_1(k_3, p, k_1, k_2)) \right\}. \tag{C.11}
\end{aligned}$$

C.2.2.4 Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins

Das Matrixelement der Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins lässt sich auf das Grundzustandsmatrixelement (C.3) zurückführen,

$$\begin{aligned}
& \sum_{l,r \neq 0} V(r) \left\langle \hat{b}_{p,\uparrow} [\hat{n}_{l+r,\uparrow} \hat{n}_{l,\downarrow} + \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l+r,\downarrow}] \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_4,\downarrow} \hat{b}_{p,\uparrow}^+ \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
& = (1 - \delta_{p,k_1}) \sum_{l,r \neq 0} V(r) \left\langle [\hat{n}_{l+r,\uparrow} \hat{n}_{l,\downarrow} + \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l+r,\downarrow}] \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_4,\downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}}. \tag{C.12}
\end{aligned}$$

C.2.2.5 Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit parallelen Spins

Das Matrixelement der Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit parallelen Spins lässt sich auf das Grundzustandsmatrixelement (C.5) zurückführen. Mit $k_1 < k_3$ und $k_2 < k_4$ folgt

$$\begin{aligned}
& \sum_{l,r \neq 0} V(r) \left\langle \hat{b}_{p,\uparrow} \hat{n}_{l,\sigma} \hat{n}_{l+r,\sigma} \hat{b}_{k_1,\sigma}^+ \hat{a}_{k_2,\sigma} \hat{b}_{k_3,\sigma}^+ \hat{a}_{k_4,\sigma} \hat{b}_{p,\uparrow}^+ \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
& = \delta_{\sigma,\downarrow} \sum_{l,r \neq 0} V(r) \left\langle \hat{n}_{l,\sigma} \hat{n}_{l+r,\sigma} \hat{b}_{k_1,\sigma}^+ \hat{a}_{k_2,\sigma} \hat{b}_{k_3,\sigma}^+ \hat{a}_{k_4,\sigma} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
& \quad + \delta_{\sigma,\uparrow} (1 - \delta_{p,k_1} - \delta_{p,k_3}) \sum_{l,r \neq 0} V(r) \left\langle \hat{n}_{l,\sigma} \hat{n}_{l+r,\sigma} \hat{b}_{k_1,\sigma}^+ \hat{a}_{k_2,\sigma} \hat{b}_{k_3,\sigma}^+ \hat{a}_{k_4,\sigma} \right\rangle_0^{\text{HF}}. \tag{C.13}
\end{aligned}$$

C.3 Matrixelemente der optischen Anregungen

Im folgenden werden die Kurzschreibweisen

$$|p\sigma\rangle \equiv \hat{b}_{p,\sigma}^+ \hat{a}_{p,\sigma} \quad (\text{C.14})$$

und

$$|p\rangle_{(s/t)} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|p \uparrow\rangle \pm |p \downarrow\rangle) \quad (\text{C.15})$$

benutzt.

C.3.1 Matrixelemente der lokalen Coulomb-Wechselwirkung

C.3.1.1 Matrixelement zur ersten Ordnung

Es ist

$$\begin{aligned} M_{1,(s/t)}^U(p_1, p_2) &= U \sum_{l=1}^L {}_{(s/t)} \langle p_1 | \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l,\downarrow} | p_2 \rangle_{(s/t)}^{\text{HF}} \\ &= \pm U \sum_{l=1}^L \langle \hat{a}_{p_1,\uparrow}^+ \hat{b}_{p_1,\uparrow} \hat{n}_{l,\uparrow} \rangle_0 \langle \hat{n}_{l,\downarrow} \hat{b}_{p_2,\downarrow}^+ \hat{a}_{p_2,\downarrow} \rangle_0 \\ &= \pm \frac{U}{L^2} \sum_{l=1}^L i(-1)^{(l+1)} \cdot i(-1)^l \\ &= \pm \frac{U}{L}. \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

C.3.1.2 Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins

Man erhält

$$\begin{aligned} L_{(s/t)}^{U2,\uparrow\downarrow}(p) &= \frac{U}{\sqrt{2}} \sum_{l=1}^L \langle (\hat{a}_{p,\uparrow}^+ \hat{b}_{p,\uparrow} \pm \hat{a}_{p,\downarrow}^+ \hat{b}_{p,\downarrow}) \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l,\downarrow} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_4,\downarrow} \rangle_0^{\text{HF}} \\ &= \frac{U}{\sqrt{2}} \sum_{l=1}^L \left[\langle \hat{a}_{p,\uparrow}^+ \hat{b}_{p,\uparrow} \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \rangle_0^{\text{HF}} \langle \hat{n}_{l,\downarrow} \hat{b}_{k_3,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_4,\downarrow} \rangle_0^{\text{HF}} \pm \{ (k_1, k_2) \leftrightarrow (k_3, k_4) \} \right] \\ &= \frac{U}{\sqrt{2}} \sum_{l=1}^L \left[(\delta_{p,k_2} - \delta_{p,k_1}) \langle \hat{b}_{k_2,\uparrow} \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \rangle_0^{\text{HF}} \langle \hat{n}_{l,\downarrow} \hat{b}_{k_3,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_4,\downarrow} \rangle_0^{\text{HF}} \pm \{ (k_1, k_2) \leftrightarrow (k_3, k_4) \} \right] \\ &= \frac{U}{\sqrt{2}L} \left(\delta_{k_1-k_2+k_3-k_4,0} [(\delta_{p,k_2} - \delta_{p,k_1}) u_2(k_3, k_4, k_1, k_2) \pm (\delta_{p,k_4} - \delta_{p,k_3}) u_2(k_1, k_2, k_3, k_4)] \right. \\ &\quad \left. - i\delta_{k_1-k_2+k_3-k_4,\pm\pi} [(\delta_{p,k_2} - \delta_{p,k_1}) u_1(k_3, k_4, k_1, k_2) \pm (\delta_{p,k_4} - \delta_{p,k_3}) u_1(k_1, k_2, k_3, k_4)] \right). \end{aligned} \quad (\text{C.17})$$

C.3.1.3 Drei-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins

Es ergibt sich

$$\begin{aligned}
L_{(s/t)}^{U^2, \uparrow\uparrow\downarrow}(p) &= \frac{U}{\sqrt{2}} \sum_{l=1}^L \left\langle \left(\hat{a}_{p,\uparrow}^+ \hat{b}_{p,\uparrow} \pm \hat{a}_{p,\downarrow}^+ \hat{b}_{p,\downarrow} \right) \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l,\downarrow} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_4,\uparrow} \hat{b}_{k_5,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_6,\downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
&= \frac{U}{\sqrt{2}} \sum_{l=1}^L \left\langle \hat{a}_{p,\uparrow}^+ \hat{b}_{p,\uparrow} \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_4,\uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \left\langle \hat{n}_{l,\downarrow} \hat{b}_{k_5,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_6,\downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
&= \frac{U}{\sqrt{2}} \sum_{l=1}^L \left\langle \hat{n}_{l,\downarrow} \hat{b}_{k_5,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_6,\downarrow} \right\rangle_0 \left(\delta_{p,k_1} \delta_{p,k_2} \left\langle \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_4,\uparrow} \right\rangle_0 + \delta_{p,k_3} \delta_{p,k_4} \left\langle \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \right\rangle_0 \right. \\
&\quad \left. - \delta_{p,k_1} \delta_{p,k_4} \left\langle \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \right\rangle_0 - \delta_{p,k_3} \delta_{p,k_2} \left\langle \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_4,\uparrow} \right\rangle_0 \right) \\
&= \frac{U}{\sqrt{2}L} \left[\delta_{k_1-k_2+k_3-k_4+k_5-k_6,0} \left(\delta_{p,k_1} \delta_{p,k_2} u_1(k_3, k_4, k_5, k_6) + \delta_{p,k_3} \delta_{p,k_4} u_1(k_1, k_2, k_5, k_6) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \delta_{p,k_1} \delta_{p,k_4} u_1(k_3, k_2, k_5, k_6) - \delta_{p,k_3} \delta_{p,k_2} u_1(k_1, k_4, k_5, k_6) \right) \right. \\
&\quad \left. + i \delta_{k_1-k_2+k_3-k_4+k_5-k_6, \pm\pi} \left(\delta_{p,k_1} \delta_{p,k_2} u_2(k_3, k_4, k_5, k_6) + \delta_{p,k_3} \delta_{p,k_4} u_2(k_1, k_2, k_5, k_6) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \delta_{p,k_1} \delta_{p,k_4} u_2(k_3, k_2, k_5, k_6) - \delta_{p,k_3} \delta_{p,k_2} u_2(k_1, k_4, k_5, k_6) \right) \right], \tag{C.18}
\end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt (C.1) eingegangen ist.

Aus Symmetriegründen folgt

$$L_{(s/t)}^{U^2, \uparrow\uparrow\downarrow}(p) = \pm L_{(s/t)}^{U^2, \uparrow\uparrow\downarrow}(p). \tag{C.19}$$

C.3.2 Matrixelemente der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung

C.3.2.1 Matrixelement zur ersten Ordnung

Der Beitrag erster Ordnung ist

$$\begin{aligned}
M_{1,(s/t)}^V(p_1, p_2) &= {}_{(s/t)} \langle p_1 | \hat{V} | p_2 \rangle_{(s/t)} \\
&= \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} V(r) \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \left({}_{(s/t)} \langle p_1 \uparrow | \hat{n}_{l,\sigma} \hat{n}_{l+r,\sigma} | p_2 \uparrow \rangle_{(s/t)}^{\text{HF}} \pm {}_{(s/t)} \langle p_1 \uparrow | \hat{n}_{l,\sigma} \hat{n}_{l+r,-\sigma} | p_2 \downarrow \rangle_{(s/t)}^{\text{HF}} \right). \tag{C.20}
\end{aligned}$$

Die Berechnung ergibt

$$\begin{aligned}
M_{1,(s/t)}^V(p_1, p_2) &= \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} V(r) \left\{ \delta_{p_1, p_2} \langle \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} + \hat{n}_{l, \downarrow} \hat{n}_{l+r, \downarrow} \rangle_0^{\text{HF}} \right. \\
&\quad + \left[\delta_{p_1, p_2} \langle \hat{c}_{l, \uparrow} \hat{c}_{l+r, \uparrow}^+ \rangle_0 \left(\langle \hat{b}_{p_1, \uparrow} \hat{c}_{l, \uparrow}^+ \rangle_0 \langle \hat{c}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{p_1, \uparrow}^+ \rangle_0 - \langle \hat{a}_{p_1, \uparrow} \hat{c}_{l+r, \uparrow} \rangle_0 \langle \hat{c}_{l, \uparrow}^+ \hat{a}_{p_1, \uparrow} \rangle_0 \right) \right. \\
&\quad + \langle \hat{b}_{p_1, \uparrow} \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{b}_{p_2, \uparrow}^+ \rangle_0 \langle \hat{a}_{p_1, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{a}_{p_2, \uparrow} \rangle_0 + \langle \hat{a}_{p_1, \uparrow} \hat{b}_{p_1, \uparrow} \hat{n}_{l, \uparrow} \rangle_0 \langle \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{p_2, \uparrow}^+ \hat{a}_{p_2, \uparrow} \rangle_0 \\
&\quad + \left. \left. \langle \hat{b}_{p_1, \uparrow} \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{b}_{p_2, \uparrow}^+ \rangle_0 \langle \hat{a}_{p_1, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{a}_{p_2, \uparrow} \rangle_0 \pm \langle \hat{a}_{p_1, \uparrow} \hat{b}_{p_1, \uparrow} \hat{n}_{l, \uparrow} \rangle_0 \langle \hat{n}_{l+r, \downarrow} \hat{b}_{p_2, \downarrow}^+ \hat{a}_{p_2, \downarrow} \rangle_0 \right] \right. \\
&\quad \left. + \left[l \leftrightarrow (l+r) \right] \right\} \\
&= \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} V(r) \left(\delta_{p_1, p_2} \langle \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} + \hat{n}_{l, \downarrow} \hat{n}_{l+r, \downarrow} \rangle_0^{\text{HF}} \right. \\
&\quad - \frac{2}{L^2} \cos((p_1 - p_2)r) (f_2^2(p_1, p_2) + (-1)^r f_1^2(p_1, p_2)) \\
&\quad + \left. \left[2\delta_{p_1, p_2} \langle \hat{c}_{l, \uparrow} \hat{c}_{l+r, \uparrow}^+ \rangle_0 \langle \hat{b}_{p_1, \uparrow} \hat{c}_{l, \uparrow}^+ \rangle_0 \langle \hat{c}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{p_1, \uparrow}^+ \rangle_0 + \frac{(1 \pm 1)}{L^2} (-1)^r \right] + \left[l \leftrightarrow (l+r) \right] \right) \\
&= \sum_{\substack{-L/2 < r < L/2 \\ r^2=1}} V(r) \delta_{p_1, p_2} \left\{ -2L [A_\delta(r)^2 + B_\delta(r)^2] \right. \\
&\quad \left. + \frac{8}{E(p_1)} [\cos(p_1) \cos(p_1 r) A_\delta(r) + \delta \sin(p_1) \sin(p_1 r) B_\delta(r)] \right\} \\
&\quad - \frac{2}{L} \sum_{r \neq 0} V(r) \cos((p_1 - p_2)r) (f_2^2(p_1, p_2) + (-1)^r f_1^2(p_1, p_2)) \\
&\quad + \frac{2}{L} \sum_{r \neq 0} V(r) [1 + (1 \pm 1)(-1)^r] . \tag{C.21}
\end{aligned}$$

C.3.2.2 Null-Teilchen-Loch-Anregung

Das Matricelement mit der Fermisee ist

$$L_{(s/t)}^{V^2, 0}(p) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle \left(\hat{a}_{p, \uparrow}^+ \hat{b}_{p, \uparrow} \pm \hat{a}_{p, \downarrow}^+ \hat{b}_{p, \downarrow} \right) \hat{V} \right\rangle_0^{\text{HF}} = (1 \pm 1) \frac{V}{\sqrt{2}} v_0(p), \tag{C.22}$$

wobei im letzten Schritt (C.2) eingesetzt wurde.

C.3.2.3 Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins

Es ist

$$\begin{aligned}
L_{(s/t)}^{V^2, \uparrow \downarrow}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle \left(\hat{a}_{p, \uparrow}^+ \hat{b}_{p, \uparrow} \pm \hat{a}_{p, \downarrow}^+ \hat{b}_{p, \downarrow} \right) \hat{V} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_4, \downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
&= \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} \frac{V(r)}{\sqrt{2}} \left[\left\{ \delta_{p, k_1} \delta_{p, k_2} \left\langle \hat{n}_{l, \downarrow} \hat{n}_{l+r, \downarrow} \hat{b}_{k_3, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_4, \downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + (\delta_{p, k_2} - \delta_{p, k_1}) \left\langle \hat{b}_{k_2, \uparrow} [\hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \downarrow} + \hat{n}_{l, \downarrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow}] \hat{b}_{k_3, \downarrow}^+ \hat{a}_{k_4, \downarrow} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \right\rangle_0^{\text{HF}} \right\} \right. \\
&\quad \left. \pm \left\{ (k_1, k_2) \leftrightarrow (k_3, k_4) \right\} \right] \\
&= \delta_{k_1, k_2} \delta_{k_3, k_4} \frac{V}{\sqrt{2}} (\delta_{p, k_1} v_0(k_3) \pm \delta_{p, k_3} v_0(k_1)) \\
&\quad + \frac{V}{\sqrt{2}L} \left\{ \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, 0} [(\delta_{p, k_2} - \delta_{p, k_1}) v_2(k_1, k_2, k_3, k_4) \pm (\delta_{p, k_4} - \delta_{p, k_3}) v_2(k_3, k_4, k_1, k_2)] \right. \\
&\quad \left. - i \delta_{k_1 - k_2 + k_3 - k_4, \pm \pi} [(\delta_{p, k_2} - \delta_{p, k_1}) v_1(k_1, k_2, k_3, k_4) \pm (\delta_{p, k_4} - \delta_{p, k_3}) v_1(k_3, k_4, k_1, k_2)] \right\}. \tag{C.23}
\end{aligned}$$

Dabei sind hier (C.2) und die zweite Hälfte aus (C.11) eingegangen.

C.3.2.4 Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen mit parallelen Spins

Man erhält zunächst

$$\begin{aligned}
L_{(s/t)}^{V^2, \uparrow \uparrow}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle \left(\hat{a}_{p, \uparrow}^+ \hat{b}_{p, \uparrow} \pm \hat{a}_{p, \downarrow}^+ \hat{b}_{p, \downarrow} \right) \hat{V} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
&= \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} \frac{V(r)}{\sqrt{2}} \left\langle \hat{a}_{p, \uparrow}^+ \hat{b}_{p, \uparrow} \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
&= \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} \frac{V(r)}{\sqrt{2}} \left[\delta_{p, k_1} \delta_{p, k_2} \left\langle \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} + \delta_{p, k_3} \delta_{p, k_4} \left\langle \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \right. \\
&\quad - \delta_{p, k_1} \delta_{p, k_4} \left\langle \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} - \delta_{p, k_3} \delta_{p, k_2} \left\langle \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
&\quad + \left\{ (\delta_{p, k_4} - \delta_{p, k_3}) \left\langle \hat{b}_{k_4, \uparrow} \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \right\rangle_0^{\text{HF}} \left\langle \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \right. \\
&\quad + (\delta_{p, k_2} - \delta_{p, k_1}) \left\langle \hat{b}_{k_2, \uparrow} \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \right\rangle_0^{\text{HF}} \left\langle \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
&\quad - (\delta_{p, k_4} - \delta_{p, k_1}) \left\langle \hat{b}_{k_4, \uparrow} \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \right\rangle_0^{\text{HF}} \left\langle \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
&\quad \left. - (\delta_{p, k_2} - \delta_{p, k_3}) \left\langle \hat{b}_{k_2, \uparrow} \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \right\rangle_0^{\text{HF}} \left\langle \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \right\} + \left\{ l \leftrightarrow (l+r) \right\}. \tag{C.24}
\end{aligned}$$

Schließlich findet man

$$\begin{aligned}
L_{(s/t)}^{V^2, \uparrow\uparrow}(p) = & \frac{V}{\sqrt{2}L} \left\{ \delta_{k_1-k_2+k_3+k_4,0} \left[(\delta_{k_1,k_2} \delta_{k_3,k_4} - \delta_{k_3,k_2} \delta_{k_1,k_4}) (\delta_{p,k_1} Lv_0(k_3) + \delta_{p,k_3} Lv_0(k_1)) \right. \right. \\
& + (\delta_{p,k_4} - \delta_{p,k_3}) v_2(k_1, k_2, k_3, k_4) + (\delta_{p,k_2} - \delta_{p,k_1}) v_2(k_3, k_4, k_1, k_2) \\
& \left. \left. - (\delta_{p,k_4} - \delta_{p,k_1}) v_2(k_1, k_4, k_3, k_2) - (\delta_{p,k_2} - \delta_{p,k_3}) v_2(k_3, k_2, k_1, k_4) \right] \right. \\
& - i\delta_{k_1-k_2+k_3+k_4, \pm\pi} \left[(\delta_{p,k_4} - \delta_{p,k_3}) v_1(k_1, k_2, k_3, k_4) + (\delta_{p,k_2} - \delta_{p,k_1}) v_1(k_3, k_4, k_1, k_2) \right. \\
& \left. \left. - (\delta_{p,k_4} - \delta_{p,k_1}) v_1(k_1, k_4, k_3, k_2) - (\delta_{p,k_2} - \delta_{p,k_3}) v_1(k_3, k_2, k_1, k_4) \right] \right\} \quad (C.25)
\end{aligned}$$

C.3.2.5 Drei-Teilchen-Loch-Anregungen mit entgegengesetzten Spins

Man berechnet

$$\begin{aligned}
L_{(s/t)}^{V^2, \uparrow\uparrow\downarrow}(p) = & \frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle \left(\hat{a}_{p,\uparrow}^+ \hat{b}_{p,\uparrow} \pm \hat{a}_{p,\downarrow}^+ \hat{b}_{p,\downarrow} \right) \hat{V} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_4,\uparrow} \hat{b}_{k_5,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_6,\downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
= & \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} \frac{V(r)}{\sqrt{2}} \left\{ \left\langle \hat{a}_{p,\uparrow}^+ \hat{b}_{p,\uparrow} [\hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l+r,\downarrow} + \hat{n}_{l,\downarrow} \hat{n}_{l+r,\uparrow}] \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_4,\uparrow} \hat{b}_{k_5,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_6,\downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \right. \\
& \left. \pm \left\langle \hat{a}_{p,\downarrow}^+ \hat{b}_{p,\downarrow} \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l+r,\uparrow} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_4,\uparrow} \hat{b}_{k_5,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_6,\downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \right\} \\
= & \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} \frac{V(r)}{\sqrt{2}} \left\{ \delta_{p,k_1} \delta_{p,k_2} \left\langle [\hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l+r,\downarrow} + \hat{n}_{l,\downarrow} \hat{n}_{l+r,\uparrow}] \hat{b}_{k_3,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_4,\uparrow} \hat{b}_{k_5,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_6,\downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \right. \\
& + \delta_{p,k_3} \delta_{p,k_4} \left\langle [\hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l+r,\downarrow} + \hat{n}_{l,\downarrow} \hat{n}_{l+r,\uparrow}] \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \hat{b}_{k_5,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_6,\downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
& - \delta_{p,k_1} \delta_{p,k_4} \left\langle [\hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l+r,\downarrow} + \hat{n}_{l,\downarrow} \hat{n}_{l+r,\uparrow}] \hat{b}_{k_3,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \hat{b}_{k_5,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_6,\downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
& - \delta_{p,k_3} \delta_{p,k_2} \left\langle [\hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l+r,\downarrow} + \hat{n}_{l,\downarrow} \hat{n}_{l+r,\uparrow}] \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_4,\uparrow} \hat{b}_{k_5,\downarrow}^+ \hat{a}_{k_6,\downarrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\
& \left. \pm \delta_{p,k_5} \delta_{p,k_6} \left\langle \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l+r,\uparrow} \hat{b}_{k_1,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_2,\uparrow} \hat{b}_{k_3,\uparrow}^+ \hat{a}_{k_4,\uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \right\} \\
= & \frac{V}{\sqrt{2}L} \left\{ \delta_{k_1-k_2+k_3-k_4+k_5-k_6,0} \left[\delta_{p,k_1} \delta_{p,k_2} v_1(k_3, k_4, k_5, k_6) + \delta_{p,k_3} \delta_{p,k_4} v_1(k_1, k_2, k_5, k_6) \right. \right. \\
& - \delta_{p,k_1} \delta_{p,k_4} v_1(k_3, k_2, k_5, k_6) - \delta_{p,k_3} \delta_{p,k_2} v_1(k_1, k_4, k_5, k_6) \\
& \left. \pm (\delta_{p,k_5} \delta_{p,k_6} v_1(k_1, k_2, k_3, k_4) - \delta_{p,k_5} \delta_{p,k_6} v_1(k_1, k_4, k_3, k_2)) \right] \\
& + i\delta_{k_1-k_2+k_3-k_4+k_5-k_6,0} \left[\delta_{p,k_1} \delta_{p,k_2} v_2(k_3, k_4, k_5, k_6) + \delta_{p,k_3} \delta_{p,k_4} v_2(k_1, k_2, k_5, k_6) \right. \\
& - \delta_{p,k_1} \delta_{p,k_4} v_2(k_3, k_2, k_5, k_6) - \delta_{p,k_3} \delta_{p,k_2} v_2(k_1, k_4, k_5, k_6) \\
& \left. \left. \pm (\delta_{p,k_5} \delta_{p,k_6} v_2(k_1, k_2, k_3, k_4) - \delta_{p,k_5} \delta_{p,k_6} v_2(k_1, k_4, k_3, k_2)) \right] \right\}, \quad (C.26)
\end{aligned}$$

wobei (C.3) und (C.5) eingegangen sind.

Analog folgt

$$L_{(s/t)}^{V^2, \uparrow \downarrow \downarrow}(p) = \pm L_{(s/t)}^{V^2, \uparrow \uparrow \downarrow}(p). \quad (\text{C.27})$$

C.3.2.6 Drei-Teilchen-Loch-Anregungen mit parallelen Spins

Abschließend findet man für $k_1 < k_3 < k_5$ und $k_2 < k_4 < k_6$

$$\begin{aligned} L_{(s/t)}^{V^2, \uparrow \uparrow \uparrow}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle \left(\hat{a}_{p, \uparrow}^+ \hat{b}_{p, \uparrow} \pm \hat{a}_{p, \downarrow}^+ \hat{b}_{p, \downarrow} \right) \hat{V} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \hat{b}_{k_5, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_6, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\ &= \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} \frac{V(r)}{\sqrt{2}} \left\langle \hat{a}_{p, \uparrow}^+ \hat{b}_{p, \uparrow} \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \hat{b}_{k_5, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_6, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\ &= \sum_{l=1}^L \sum_{r \neq 0} \frac{V(r)}{\sqrt{2}} \left\{ \delta_{p, k_5} \delta_{p, k_6} \left\langle \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \right. \\ &\quad + \delta_{p, k_3} \delta_{p, k_4} \left\langle \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_5, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_6, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\ &\quad + \delta_{p, k_1} \delta_{p, k_2} \left\langle \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \hat{b}_{k_5, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_6, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\ &\quad - \delta_{p, k_5} \delta_{p, k_4} \left\langle \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_6, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\ &\quad - \delta_{p, k_5} \delta_{p, k_2} \left\langle \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_6, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\ &\quad - \delta_{p, k_3} \delta_{p, k_6} \left\langle \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_5, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\ &\quad - \delta_{p, k_3} \delta_{p, k_2} \left\langle \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_1, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \hat{b}_{k_5, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_6, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\ &\quad - \delta_{p, k_1} \delta_{p, k_6} \left\langle \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_5, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_4, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \\ &\quad \left. - \delta_{p, k_1} \delta_{p, k_4} \left\langle \hat{n}_{l, \uparrow} \hat{n}_{l+r, \uparrow} \hat{b}_{k_3, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_2, \uparrow} \hat{b}_{k_5, \uparrow}^+ \hat{a}_{k_6, \uparrow} \right\rangle_0^{\text{HF}} \right\}. \quad (\text{C.29}) \end{aligned}$$

Die zugehörigen Matrixelemente finden sich bereits in (C.5). Analog ergibt sich

$$L_{(s/t)}^{V^2, \uparrow \uparrow \uparrow}(p) = \pm L_{(s/t)}^{V^2, \downarrow \downarrow \downarrow}(p). \quad (\text{C.30})$$

Literaturverzeichnis

- [1] D. BAERISWYL, D. K. CAMPBELL, AND S. MAZUMDAR IN:
Conjugated Conducting Polymers, ed. by H. Kiess
Springer-Verlag, Berlin (1992), p. 3.
- [2] S. ABE, J. YU, AND W. P. SU:
Singlet and triplet excitons in conjugated polymers
Phys. Rev. B **45**, 8264 (1992).
- S. ABE, M. SCHREIBER, W. P. SU, AND J. YU:
Excitons and nonlinear optical spectra in conjugated polymers
Phys. Rev. B **45**, 9432 (1992).
- [3] J. RISSLER, H. BÄSSLER, F. GEBHARD, AND P. SCHWERDTFEGER:
Excited states of ladder-type poly-*p*-phenylene oligomers
Phys. Rev. B **64**, 045122 (2001).
- [4] F. GEBHARD:
The Mott Metal-Insulator Transition
Springer-Verlag, Berlin (1997).
- [5] S. R. WHITE:
Density matrix formulation for quantum renormalization groups
Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).
- Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups
Phys. Rev. B **48**, 10 345 (1993).
- [6] I. PESCHEL, X. WANG, M. KAULKE, AND K. HALLBERG (EDS.):
Density-Matrix Renormalization
Springer-Verlag, Berlin (1999).
- [7] H. HAUG AND S. W. KOCH:
Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors
World Scientific, Singapore (1990).

- [8] L. SEBASTIAN AND G. WEISER:
One-Dimensional Wide Energy Bands in a Polydiacetylene
Revealed by Electroreflectance
Phys. Rev. Lett. **46**, 1156 (1981).
- A. HORVÁTH, G. WEISER, C. LAPERSONNE-MEYER, M. SCHOTT, AND S. SPAGNOLI:
Wannier excitons and Franz-Keldysh effect of polydiacetylene chains diluted in their
single crystal monomer matrix
Phys. Rev. B **53**, 13507 (1996).
- [9] J. RISSLER
Das Exziton in π -konjugierten Polymeren
Dissertation, Logos-Verlag (2001).
- [10] J.-W. VAN DER HORST, P. A. BOBBERT, M. A. J. MICHELS, AND H. BÄSSLER:
Calculation of excitonic properties of conjugated polymers using the Bethe-Salpeter
equation
J. Chem. Phys. **114**, 6950 (2001).
- M. ROHLFING AND S. G. LOUIE:
Optical Excitations in Conjugated Polymers
Phys. Rev. Lett. **82**, 1959 (1999).
- [11] N. W. ASHCROFT AND N. D. MERMIN:
Solid-State Physics
Holt, Rinehart and Winston, New York (1976).
- [12] W. P. SU, J. R. SCHRIEFFER, AND A. J. HEEGER:
Solitons in Polyacetylene
Phys. Rev. Lett. **42**, 1698 (1979).
- Soliton excitations in polyacetylene
Phys. Rev. B **22**, 2099 (1980).
- [13] F. GEBHARD, K. BOTT, M. SCHEIDLER, P. THOMAS, AND S. W. KOCH:
Optical absorption of non-interacting tight-binding electrons in a Peierls-distorted
chain at half band-filling
Phil. Mag. B **75**, 1 (1997).
- Exact results for the optical absorption of strongly correlated electrons in a half-filled
Peierls-distorted chain
Phil. Mag. B **75**, 13 (1997).

- Optical absorption of strongly correlated half-filled Mott-Hubbard chains
Phil. Mag. B **75**, 47 (1997).
- [14] J. HUBBARD:
Electron correlations in narrow energy bands
Proc. R. Soc. London A **276**, 238 (1963).
- [15] N. F. MOTT:
Metal-Insulator Transitions
Taylor and Francis, London, 2nd ed. (1990).
- [16] F. H. L. ESSLER, H. FRAHM, F. GÖHMANN, A. KLÜMPER, AND V. E. KOREPIN:
The one-dimensional Hubbard model
Cambridge University Press, Cambridge (2004).
- [17] E. JECKELMANN, F. GEBHARD, AND F. H. L. ESSLER:
Optical conductivity of the half-filled Hubbard chain
Phys. Rev. Lett. **85**, 3910 (2000).
- [18] E. H. LIEB AND 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 (1968).
- [19] A. A. OVCHINNIKOV:
Excitation spectrum in the one-dimensional Hubbard model
Sov. Phys. JETP **30**, 1160 (1970).
- [20] S. COLEMAN:
Quantum Sine-Gordon equation as the massive Thirring model
Phys. Rev. D **11**, 2088 (1975).
- S. MANDELSTAM:
Soliton operators for the quantized sine-Gordon equation
Phys. Rev. D **11**, 3026 (1975).
- [21] R. F. DASHEN, B. HASSLACHER, AND A. NEVEU:
Nonperturbative methods and extended-hadron models in field theory
II. Two-dimensional models and extended hadrons
Phys. Rev. D **10**, 4130 (1974).
- R. F. DASHEN, B. HASSLACHER, AND A. NEVEU:
Particle spectrum in model field theories from semiclassical functional integral techniques
Phys. Rev. D **11**, 3424 (1975).

- [22] L. A. TAKHTADJAN AND L. D. FADDEEV IN:
Hamiltonian Methods in the Theory of Solitons
Lecture Notes in Physics 246, Springer-Verlag, Berlin (1986), p. 166.
- [23] G. JAPARIDZE, A. A. NERSESYAN, AND P. B. WIEGMANN:
Exact results in the two-dimensional U(1)-symmetric Thirring model
Nucl. Phys. B **230**, 10 (1984).
- [24] F. H. L. ESSLER, F. GEBHARD, AND E. JECKELMANN:
Excitons in one-dimensional Mott insulators
Phys. Rev. B **64**, 125119 (2001).
- [25] A. O. GOGOLIN, A. A. NERSESYAN, A. M. TSVELIK:
Bosonization and Strongly Correlated Systems
Cambridge University Press, Cambridge (1998).
- [26] E. JECKELMANN:
Ground-State Phase Diagram of a Half-Filled One-Dimensional Extended Hubbard Model
Phys. Rev. Lett. **89**, 236401 (2002).
- Optical excitations in a one-dimensional Mott insulator
Phys. Rev. B **67**, 075106 (2003).
- [27] J. DE BOER, V. E. KOREPIN, AND A. SCHADSCHNEIDER:
 η Pairing as a Mechanism of Superconductivity in Models of Strongly Correlated Electrons
Phys. Rev. Lett. **74**, 789 (1995).
- A. SCHADSCHNEIDER:
Superconductivity in an exactly solvable Hubbard model with bond-charge interaction
Phys. Rev. B **51**, 10386 (1995).
- A. A. ALIGIA AND L. ARRACHEA:
Exact Solution of a Hubbard Chain with Bond-Charge Interaction
Phys. Rev. Lett. **73**, 2240 (1994).
- [28] A. M. TSVELIK:
Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics
Cambridge University Press, Cambridge (1995)
- [29] M. LE BELLAC:
Quantum and Statistical Field Theory
Oxford University Press, Oxford (1991).

- [30] P. D. FRANCESCO, P. MATHIEU, AND D. SÉNÉCHAL:
Conformal Field Theory
Springer-Verlag, New York (1997).
- [31] D. SÉNÉCHAL, A.-M. S. TREMBLAY, AND C. BOURBONNAIS (EDS.):
Theoretical Methods for Strongly Correlated Electrons
Springer-Verlag, Berlin (2004).
- [32] K. G. WILSON:
Renormalization Group and Critical Phenomena. I. Renormalization Group and the
Kadanoff Scaling Picture.
Phys. Rev. B **4**, 3174 (1971).
- [33] J. SÓLYOM:
The Fermi gas model of one-dimensional conductors
Adv. Phys. **28**, 201 (1979).
- [34] J. VOIT:
One-dimensional Fermi liquids
Rep. Prog. Phys. **57**, 977 (1994).
- [35] E. BRÉZIN AND J. ZINN-JUSTIN (EDS.):
Field theory methods and quantum critical phenomena.
Champs, Cordes et Phénomène Critique, Les Houches Session XLIX, North Holland,
Amsterdam, (1990), p. 563.
- [36] G. DELFINO, G. MUSSARDO:
Non-integrable aspects of the multi-frequency Sine-Gordon model
Nucl. Phys. B **516**, 675 (1998).
- G. DELFINO, G. MUSSARDO, P. SIMONETTI:
Non-integrable Quantum Field Theories as Perturbations
of Certain Integrable Models
Nucl. Phys. B **473**, 469 (1996).
- [37] M. FABRIZIO, A. O. GOGOLIN, AND A. A. NERSESYAN
From Band Insulator to Mott Insulator in One Dimension
Phys. Rev. Lett. **83**, 2014 (1999).
- [38] E. JECKELMANN:
Dynamical density-matrix renormalization-group method
Phys. Rev. B **66**, 045114 (2002).
- [39] F. A. SMIRNOV:
Form-Factors in Completely Integrable Models of Quantum Field Theory
World Scientific, Singapore (1992).

- [40] H. BENTHIEN, F. H. L. ESSLER, F. GEBHARD, A. GRAGE
Quantum phase transition in the extended Peierls-Hubbard model in one dimension
publication in preparation.
- [41] G. MUSSARDO, V. RIVA, AND G. SOTKOV:
Semiclassical Particle Spectrum of Double Sine-Gordon Model
Nucl. Phys. B **687**, 189 (2004).
- [42] J. CARDY:
Scaling and Renormalization in Statistical Physics
Cambridge University Press, Cambridge (1996).
- [43] R. SHANKAR:
Renormalization Group Approach to Interacting Fermions
cond-mat/9307009 (1993).
- [44] J. KOSTERLITZ AND D. THOULESS:
Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems
J. Phys. C : Solid State Phys. **6**, 1181 (1973).
- [45] A. MESSIAH:
Quantenmechanik, Band 2
de Gruyter, Berlin (1979).
- [46] J. RISSLER
Effective conjugation length of π -conjugated systems
Chem. Phys. Lett. **395**, 92 (2004).
- [47] J. ORENSTEIN, S. ETEMAD, AND G. D. BAKER
Photoinduced absorption in a polydiacetylene
J. Phys. C **17**, 297 (1984).
- T. HATTORI, W. HAYES, AND D. BLOOR
Photoinduced absorption and luminescence in polydiacetylenes
J. Phys. C **17**, 881 (1984).
- L. ROBBINS, J. ORENSTEIN, AND R. SUPERFINE
Observation of the Triplet Excited State of a Conjugated-Polymer Crystal
Phys. Rev. Lett **56**, 1850 (1986).
- M. WINTER, A. GRUPP, M. MEHRING AND H. SIXL
Transient esr observation of triplet-soliton pairs in a conjugated polymer single crystal
Chem. Phys. Lett **133**, 482 (1987).

W. P. SU
Triplet excitations in conjugated polymers
Phys. Rev. B **36**, 6040 (1987).

- [48] A. RACE, W. BARFORD, R. J. BURSILL
The low-lying excitations of polydiacetylene
Phys. Rev. B **64**, 035208 (2001).

W. BARFORD, R. J. BURSILL, M. Y. LAVRENTIEV
Excited states of linear polyenes
Phys. Rev. B **63**, 195108 (2001).

Danksagung

Mein herzlicher Dank gilt allen, die mich bei der Entstehung dieser Arbeit unterstützt haben.

An erster Stelle ist hier mein Doktorvater Herr Prof. Dr. Florian Gebhard zu nennen, dessen lebenswürdige, intensive und kompetente Betreuung wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen hat. Er hat mich nicht nur als wissenschaftlicher Mentor durch mein Studium und die Doktorandenzeit begleitet, sondern hat mir auch darüber hinaus immer mit Rat und Tat und viel Geduld und Verständnis zur Seite gestanden.

Herrn Prof. Dr. Peter Thomas danke ich sehr herzlich für die Übernahme des Zweitgutachtens, sein stetes Interesse an meinem Vorankommen und seine mitreißende Begeisterung für mein zeitweiliges Gastland Ungarn.

Beim Graduiertenkolleg „Optoelektronik mesoskopischer Halbleiter“ und besonders beim europäischen Graduiertenkolleg „Electron-Electron Interactions in Solids“ bedanke ich mich für die Gewährung eines Promotionsstipendiums, durch das sich mir neben der finanziellen Unterstützung die einmalige Gelegenheit bot, ein halbes Jahr am KFKI in Budapest (Ungarn) und drei Monate am Brookhaven National Laboratory in Upton, New York (USA) zu verbringen. Die im Rahmen des Graduiertenkollegs erlebten Veranstaltungen in Ráckeve, Riezlern und Marburg waren jede für sich ein besonderes Erlebnis.

An dieser Stelle möchte ich besonders Herrn Prof. Dr. Jenő Sólyom für die Gastfreundschaft und die freundliche Betreuung während meines Aufenthaltes in Ungarn meinen herzlichen Dank aussprechen. Großen Dank schulde ich auch Herrn Dr. Fabian Eßler, der mit seiner unermüdlichen Unterstützung ebenfalls zu dieser Arbeit wesentlich beigetragen hat. Insbesondere danke ich ihm auch für die warmherzige Gastfreundschaft, die er mir in Brookhaven entgegengebracht und so meinen Aufenthalt erheblich verschönert hat.

Des weiteren danke ich Dr. Jörg Rissler und Holger Benthien für die Bereitstellung ihrer numerischen Ergebnisse und die gute Zusammenarbeit.

Bei allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe Vielteilchenphysik möchte ich mich für die freundliche Atmosphäre und die stets vorhandene Hilfsbereitschaft bedanken.

Außerdem danke ich Anke Raufuß und Holger Benthien herzlich für die Durchsicht und Martin Paech für die Unterstützung bei der optischen Gestaltung dieser Arbeit.

Meinen Freundinnen Anke Raufuß und Maike Löptien und meinen Freunden David Serre und Gino Barnard möchte ich an dieser Stelle ein herzliches Dankeschön für die tiefe Freundschaft aussprechen, die sie mir über die Jahre hinweg entgegengebracht haben und die, wie ich hoffe, noch lange währen wird. Ganz besonderen Dank an meinen langjährigen Weggefährten Holger Benthien; er weiß schon warum.

Schließlich möchte ich noch meiner lieben Familie ganz besonders dafür danken, daß sie stets zu mir gestanden und mich in jeder erdenklichen Form während des Studiums und der Promotion unterstützt hat.