

SO(5)-Symmetrie in elektronischen Leiterstrukturen: Exakte Lösungen, Phasendiagramme und Korrelationen

Vom Fachbereich Physik der Universität Hannover
zur Erlangung des Grades
Doktor der Naturwissenschaften
– Dr. rer. nat. –

genehmigte Dissertation

von
Dipl. Phys. Martin Stahlsmeier
geboren am 16.04.1972 in Hannover

2002

Referent: Prof. Dr. H. Frahm
Korreferent: Prof. Dr. H.-J. Mikeska
Tag der Promotion: 14.01.2002

Meinen Eltern

SO(5) Symmetry in Electronic Ladder Systems: Exact Solutions, Phase Diagrams and Correlations

Abstract

In this thesis exact solutions, phase diagrams and correlation functions of $SO(5)$ symmetric electronic two-leg ladder models are examined.

After the classification of all electronic states on one resp. two rungs of the ladder according to the $SO(5)$ symmetry all possible invariant couplings on a rung are constructed using projection operators onto these states. On two rungs some physically interesting $SO(5)$ symmetric couplings are presented where a ladder model, introduced by Scalapino et al. [1], is reproduced within this approach (SZH model). Furthermore the physical relevance of these models and their connection with pure spin ladder models is discussed. Afterwards a highly correlated $SO(5)$ symmetric matrix product wave function is presented whose local matrices contain all 16 states on a rung.

In the second part of the thesis this wave function is used as a variational ansatz to examine the ground state phase diagram of the SZH model and some of its extensions. For the SZH model the ansatz is particularly suitable for a description of the system in the range $t_{\perp} \geq 2t_{\parallel}$ of the hopping amplitudes. Especially, for a growing hopping amplitude t_{\perp} the approximation of the variational wave function to the exact ground state improves. The phase diagram in the strong coupling limit is exactly reproduced and for the first time the region of intermediate and weak coupling can now be studied in detail. In addition to the well-known phases of the strong coupling regime a new quartet phase occurs at intermediate values. For a further examination of the phases ground state correlation functions are determined and an attempt is made to detect a hidden order in the model. Subsequently, different extensions of the SZH model are discussed and the ground state phase diagrams and correlation functions are calculated.

In the following the SZH model is exactly diagonalized on two rungs. On a complete line the ansatz represents the exact global ground state of the system at $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ and at $t_{\perp} = t_{\parallel}$. Finally the translationally invariant ansatz will be generalized to describe systems exhibiting dimerisation. Now it is possible to prove the existence of a phase with a spontaneous dimerisation. Furthermore, all symmetries of the SZH model and also excitations above the ground state are discussed.

In the last part of the thesis $SU(2)$ symmetric electronic chains and $SO(5)$ symmetric ladder models with exact ground states are constructed. To this end, a matrix product wave function for an electronic chain is defined that takes the spinor properties of electrons into account. Using projection operators one can build entire classes of Hamilton operators whose ground states are given by this finitely correlated wave function. This method is applied to the $SO(5)$ invariant ladder models whereby a new ladder model with an exact ground state is presented.

Keywords: correlated electrons; Hubbard model; matrix product ground states

PACS: 71.10.Pm, 71.10.Hf, 71.10.Fd

SO(5)-Symmetrie in elektronischen Leiterstrukturen: Exakte Lösungen, Phasendiagramme und Korrelationen

Kurzzusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit werden exakte Lösungen, Phasendiagramme und Korrelationsfunktionen elektronischer, $SO(5)$ -symmetrischer Leitermodelle mit zwei Holmen untersucht.

Nach der Klassifizierung sämtlicher elektronischer Zustände gemäß der $SO(5)$ -Symmetrie auf einer bzw. zwei Sprossen der Leiter werden mittels Projektionsoperatoren alle möglichen invarianten Kopplungen auf einer Sprosse konstruiert. Auf zwei Sprossen werden dann einige physikalisch interessante $SO(5)$ -symmetrische Kopplungen präsentiert, wobei ein von Scalapino et al. [1] vorgestelltes Leitermodell unter Verwendung der Projektionsoperatoren reproduziert wird (SZH-Modell). Außerdem wird die physikalische Relevanz dieser Leitermodelle diskutiert und ihre Verbindung mit reinen Spinleitermodellen. Anschließend wird eine hochkorrelierte, $SO(5)$ -symmetrische Matrixprodukt-Wellenfunktion vorgestellt, deren lokale Matrizen sämtliche 16 Zustände auf einer Sprosse enthalten.

Im zweiten Teil der Arbeit wird diese Wellenfunktion als Variationsansatz verwendet, um das Grundzustandsphasendiagramm des SZH-Modells und einiger Erweiterungen zu bestimmen. Im SZH-Modell zeigt sich, daß der Ansatz im Bereich $t_{\perp} \geq 2t_{\parallel}$ der Hüpfamplituden zur Beschreibung des Systems sehr gut geeignet ist. Besonders bei wachsender Hüpfamplitude t_{\perp} verbessert sich die Approximation der Variationswellenfunktion an den exakten Grundzustand. Das Phasendiagramm im Limes starker Kopplung wird in diesem Zugang exakt reproduziert und der Bereich mittlerer und schwacher Kopplung kann jetzt erstmals genau untersucht werden. Dabei tritt zusätzlich zu den bereits bekannten Phasen bei starker Kopplung eine neue Quartett-Phase bei mittleren Kopplungen auf. Zur weiteren Charakterisierung der Phasen werden statische Korrelationsfunktionen bestimmt, und es wird versucht, eine versteckte Ordnung im Modell zu finden. Anschließend werden verschiedene Erweiterungen des SZH-Modells diskutiert und die Grundzustandsphasendiagramme und Korrelationen berechnet.

Im folgenden wird das SZH-Modell auf zwei Sprossen exakt diagonalisiert. Dabei zeigt sich, daß auf einer vollständigen Linie der Variationsansatz global den exakten Grundzustand des Systems bei $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ und bei $t_{\perp} = t_{\parallel}$ liefert. Schließlich wird der translationsinvariante Ansatz verallgemeinert, um Dimerisierung zu beschreiben. Mit diesem Ansatz wird die Existenz einer Phase mit spontaner Dimerisierung nachgewiesen. Bei der weiteren Untersuchung werden nun sämtliche Symmetrien des SZH-Modells und auch Anregungen über dem Grundzustand diskutiert.

Im letzten Teil der Arbeit werden $SU(2)$ -symmetrische elektronische Ketten und $SO(5)$ -symmetrische Leitermodelle mit exakten Grundzuständen konstruiert. Zuerst wird eine Matrixprodukt-Wellenfunktion für eine elektronische Kette definiert, die wiederum die Spinoreigenschaften der Elektronen berücksichtigt. Mittels Projektionsoperatoren können dann ganze Klassen von Hamiltonoperatoren erzeugt werden, deren Grundzustand durch diese endlich korrelierte Wellenfunktion gegeben ist. Dieses Verfahren wird auf die $SO(5)$ -invarianten Leitermodelle angewendet, wobei ein neues Leitermodell mit einem exakten Grundzustand präsentiert wird.

Schlagnworte: Korrelierte Elektronen; Hubbard-Modell; Matrixprodukt-Grundzustände

PACS: 71.10.Pm, 71.10.Hf, 71.10.Fd

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
Kapitel 1. SO(5)-symmetrische Leitermodelle	3
1.1 Konstruktion elektronischer SO(5)-symmetrischer Leitermodelle	3
1.2 Kopplung benachbarter Sprossen	7
1.3 Matrixprodukt-Ansatz	12
Kapitel 2. Phasendiagramme und Korrelationen SO(5)-invarianter Leitermodelle	17
2.1 Grundzustandsphasendiagramm des SZH-Modells	17
2.1.1 Phasendiagramm bei schwacher Kopplung	19
2.1.2 Phasendiagramm für $t_{\perp} \geq 2t_{\parallel}$	21
2.2 Korrelationen des SZH-Modells im Grundzustand	24
2.2.1 Versteckte Ordnung	27
2.3 SO(5)-symmetrische Erweiterungen	29
2.3.1 Kopplungen auf einer Sprosse	30
2.3.2 Kopplungen zwischen benachbarten Sprossen	35
2.4 Exakte Lösung des SZH-Modells auf zwei Sprossen	39
2.4.1 Lösung für $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$	41
2.4.2 Lösung für $t_{\perp} = t_{\parallel}$	43
2.4.3 Ein „tight-binding“-Modell mit Diagonalkopplung zwischen zwei Sprossen	45
2.5 Dimerisierung	46
2.5.1 Spontane Dimerisierung im SZH-Modell	47
2.5.2 Diagonalkopplung	49
2.6 Symmetrien und Anregungen	49
2.6.1 Höhere Symmetrien in elektronischen Leitermodellen	50
2.6.2 Anregungen im SZH-Modell	52
Kapitel 3. Elektronische Modelle mit exakten Grundzuständen	55
3.1 Elektronische Ketten mit SU(2)-Symmetrie	56
3.1.1 Der Matrixprodukt-Ansatz für ein eindimensionales, elektronisches System	56
3.1.2 Translationsinvariante elektronische Modelle mit exakten Grundzuständen	58
3.2 SO(5)-symmetrische Hamiltonoperatoren mit exakten Grundzuständen	62

3.2.1	Matrixprodukt-Grundzustände	62
3.2.2	Einschränkung der Kopplungen	64
Zusammenfassung und Ausblick		67
Anhang A. Die SO(5)-Symmetrie in einer elektronischen Leiter		69
A.1	Darstellungstheorie der SO(5)	69
A.1.1	Matrixdarstellung der Algebra	69
A.1.2	Darstellung der SO(5) durch Operatoren	70
A.2	SO(5)-symmetrische Zustände in einer Leiter	71
A.3	SO(5)-symmetrische Operatoren	72
A.3.1	Wechselwirkungen auf einer Sprosse	72
A.3.2	Wechselwirkungen zwischen benachbarten Sprossen	73
A.4	Exakte Diagonalisierung der „tight-binding“-Modelle	74
Anhang B. Ergänzungen zum Matrixproduktansatz		77
B.1	Singulett-Struktur des Matrixprodukt-Ansatzes	77
B.1.1	Globales SU(2)-Singulett	78
B.2	Transfermatrix-Methode	78
B.2.1	SO(5)	79
B.2.2	SU(2)	80
B.3	Variationsenergie bei Dimerisierung	81
B.4	SU(2)-symmetrischer Hamiltonoperator mit einem exakten Grundzustand	82

Einleitung

Seit Beginn der systematischen physikalischen Untersuchungen der Materie in ihren verschiedenen Zustandsformen ist das theoretische Verständnis der elementaren Eigenschaften von Festkörpern stets ein zentraler Punkt der Forschung gewesen. In diesem Zusammenhang sind bereits sehr viele physikalische Eigenschaften in Festkörpern gemessen und theoretisch erklärt worden. Allerdings existieren nicht für alle experimentell gefundenen Effekte auch vollständige Theorien.

Ein prominentes Beispiel für ein Phänomen, das bisher nur ansatzweise verstanden wurde, ist die Hochtemperatursupraleitung, die 1986 von Bednorz und Müller entdeckt wurde. Sie tritt hauptsächlich in Kuprat-Verbindungen auf, die näherungsweise eine zweidimensionale Struktur besitzen. Bereits ein quantenmechanisches Modell für ein zweidimensionales Material wie diese Kupratschichten ist zu kompliziert, um es exakt zu lösen. Dabei ist es wichtig, daß das Spektrum exakt bestimmt wird, da sonst die Wechselwirkungen, die z.B. die Supraleitung oder andere Effekte verursachen, nicht genau charakterisiert werden können und es überhaupt nicht klar ist, was in dem Material bei bestimmten Temperaturen vorgeht. Allerdings gibt es bisher nur wenige zweidimensionale Modelle wie beispielsweise das Ising-Modell [1], die exakt gelöst werden können. Sie sind aber nicht geeignet, um Verbindungen mit einer zweidimensionalen Struktur zu beschreiben.

In einer Dimension hingegen existieren sehr viele Methoden, um das Spektrum der Systeme zu berechnen und somit die physikalischen Eigenschaften zu bestimmen (zumindest im Bereich tiefer Temperaturen). Durch die enormen Fortschritte in der Nanotechnologie in den letzten Jahren ist es möglich geworden, diese quasi-eindimensionalen Strukturen zu erzeugen, an denen dann verschiedene Modelle getestet werden können. So sind Materialien wie Li_2CuO_2 und $Y_2BaNi_{1-x}Zn_xO_5$ synthetisiert worden, deren Eigenschaften erfolgreich durch Spinketten beschrieben werden.

Das relativ gute Verständnis der physikalischen Prozesse in einer Dimension ermöglicht es, durch die Betrachtung von Leitermodellen die Änderung der physikalischen Eigenschaften beim Übergang von einer zu zwei Raumdimensionen zu untersuchen, um so mehr über die zweidimensionalen Systeme zu erfahren. Es gibt einige zwei- bzw. dreidimensionale Verbindungen, die effektiv als schwach gekoppelte Leitermodelle beschrieben werden können, wie beispielsweise $KCuCl_3$ und $Sr_2Cu_3O_5$. Es lassen sich aber auch Materialien mit einer Leiterstruktur direkt synthetisieren, so daß insgesamt diese quasi-eindimensionalen Strukturen experimentell sehr gut zugänglich sind. Der entscheidende Vorteil gegenüber den reinen zweidimensionalen Systemen ist allerdings, daß die Leitermodelle noch mit den bereits in einer Dimension verwendeten Methoden untersucht werden können. Aus diesen Gründen ist das Studium dieser Systeme sowohl experimentell als auch theoretisch sehr interessant.

Bei den meisten Materialien, die durch Leitermodelle beschrieben werden können, handelt es sich um reine Spinleitersysteme. Einige physikalische Eigenschaften in Verbindungen wie LiV_2O_5 und NaV_2O_5 lassen sich aber auch durch elektronische Leitermodelle bestimmen [2]. Diese elektronischen Leitersysteme wie beispielsweise die Hubbard-Leiter bilden ein wichtiges

Bindeglied zwischen den elektronischen Modellen in einer und in zwei Raumdimensionen. So wird beispielsweise vermutet, daß sich die Hochtemperatursupraleitung in den Kupraten durch ein zweidimensionales Hubbard-Modell beschreiben läßt. Folglich können diese elektronischen Leitermodelle vielleicht Hinweise geben, wie die Supraleitung überhaupt entsteht, da sie in einer Dimension nicht auftritt.

Zur Bestimmung des Spektrums eines Systems ist die Kenntnis seiner Symmetrien hilfreich. Eine sehr interessante Symmetrie ist dabei die $SO(5)$ -Symmetrie, die im Rahmen der Diskussion der Hochtemperatursupraleiter 1997 von Zhang [3] eingeführt wurde. Er konstruierte ein Modell, dessen niederenergetischer Sektor näherungsweise eine $SO(5)$ -Symmetrie zeigte und zur Beschreibung einiger Eigenschaften wie beispielsweise der Nähe der Supraleitung und der antiferromagnetischen Ordnung im Phasendiagramm der Hochtemperatursupraleiter verwendet wurde.

Ein anderer Zugang ist die Konstruktion mikroskopischer, elektronischer Systeme mit einer $SO(5)$ -Symmetrie, um anschließend das Verhalten im Bereich niedriger Energien zu bestimmen. Scalapino, Zhang und Hanke entwickelten zu diesem Zweck ein $SO(5)$ -invariantes, elektronisches Leitermodell mit zwei Holmen und berechneten das Grundzustandsphasendiagramm im Limes starker Kopplung [4]. Die Eigenschaften dieses Modells sind auch im Bereich schwacher Kopplung mittels Bosonisierung bestimmt worden [5, 6]. Diese Leitersysteme sind aufgrund ihrer vielen Realisierungen in Materialien, die in enger Verbindung zu Hochtemperatursupraleiter stehen, sehr interessant [7].

In dieser Arbeit wird im Kapitel 1 ein Verfahren vorgestellt, das es ermöglicht, allgemeine $SO(5)$ -invariante elektronische Leitermodelle mit zwei Beinen und Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen explizit zu konstruieren. Dabei werden sämtliche $SO(5)$ -invarianten Terme auf einer Sprosse und zwischen zwei benachbarten Sprossen klassifiziert und einige, physikalisch interessante Modelle präsentiert. In diesem Rahmen wird die physikalische Relevanz dieser Systeme diskutiert und auch ihre Verbindung zu reinen Spinleitermodellen. Es wird eine hochkorrelierte, $SO(5)$ -symmetrische Vielteilchenwellenfunktion vorgestellt, die im folgenden als Variationsansatz zur Untersuchung der Leitersysteme dient.

Im zweiten Teil werden die Grundzustandsphasendiagramme und Korrelationen verschiedener $SO(5)$ -invarianter Leitersysteme mittels eines Variationsverfahrens bestimmt. Die exakte Diagonalisierung auf zwei Sprossen ermöglicht dann die Berechnung einiger exakter, globaler Grundzustände in den Modellen und somit den Vergleich mit den Resultaten aus den Variationsberechnungen. Anschließend wird der Ansatz verallgemeinert, um Phasen mit spontaner Dimerisierung beschreiben zu können. Am Ende dieses Kapitels wird noch auf die Symmetrien und Anregungen im SZH-Modell eingegangen.

Im Kapitel 3 werden exakt lösbare Modelle präsentiert. Zuerst wird am Beispiel einer $SU(2)$ -invarianten elektronischen Kette ein Verfahren vorgestellt, um Systeme mit exakten Grundzuständen explizit zu konstruieren. Diese Methode wird dann auf die $SO(5)$ -invarianten Leitersysteme angewendet, und es werden einige Modelle mit exakten Grundzuständen angegeben.

KAPITEL 1

SO(5)-symmetrische Leitermodelle

Die verschiedenen Gründe, die für das starke Interesse an $SO(5)$ -invarianten Systemen und auch an Leitermodellen sprechen, sind bereits eingehend in der Einleitung diskutiert worden. In diesem Kapitel wird nun eine Methode vorgestellt, mit der beliebige $SO(5)$ -symmetrische elektronische Leitermodelle mit zwei Beinen explizit konstruiert werden können. Dabei werden alle möglichen Kopplungen auf einer Sprosse und zwischen benachbarten Sprossen entsprechend der $SO(5)$ -Symmetrie klassifiziert und die physikalisch interessantesten Modelle näher untersucht. Anschließend wird unter Verwendung eines Matrixproduktansatzes eine hochkorrelierte, $SO(5)$ -invariante Vielteilchenwellenfunktion präsentiert, die in den folgenden Kapiteln zur genauen Untersuchung einiger $SO(5)$ -symmetrischer Modelle dient.

1.1 Konstruktion elektronischer SO(5)-symmetrischer Leitermodelle

Ausgangspunkt der Untersuchungen ist eine zweibeinige, elektronische Leiter, auf der lokal auf den Plätzen x kanonische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $c_\sigma^\dagger(x)$ und $c_\sigma(x)$ für Elektronen des oberen Holmes bzw. $d_\sigma^\dagger(x)$ und $d_\sigma(x)$ für Elektronen des unteren Holmes definiert werden ($\sigma = \uparrow, \downarrow$ ist die Projektion des Spins). Zur Konstruktion $SO(5)$ -invarianter physikalischer Größen in diesem System und zur anschließenden Klassifikation aller 16 Zustände auf einer Sprosse bezüglich dieser Symmetrie werden die fermionischen Operatoren in einem vierdimensionalen $SO(5)$ -Spinor angeordnet [4, 8, 9, 10]

$$\Psi_\alpha(x) := \left(c_\uparrow(x), c_\downarrow(x), d_\uparrow^\dagger(x), d_\downarrow^\dagger(x) \right)^T \quad (x \text{ gerade}) \quad (1.1)$$

bzw. bei ungeraden Sprossen x

$$\Psi_\alpha(x) := \left(d_\uparrow(x), d_\downarrow(x), c_\uparrow^\dagger(x), c_\downarrow^\dagger(x) \right)^T \quad (x \text{ ungerade}). \quad (1.2)$$

Dieser Spinor gehorcht den bekannten kanonischen Antikommutatorrelationen

$$\{\Psi_\alpha^\dagger(x), \Psi_\beta(y)\} = \delta(x-y)\delta_{\alpha\beta} \quad \text{und} \quad \{\Psi_\alpha(x), \Psi_\beta(y)\} = \{\Psi_\alpha^\dagger(x), \Psi_\beta^\dagger(y)\} = 0 \quad (1.3)$$

und dient zur Definition der zehn lokalen Operatoren $L_{ab}(x)$ mit

$$L_{ab}(x) := -\frac{1}{2}\Psi_\alpha^\dagger(x)\Gamma_{\alpha\beta}^{ab}\Psi_\beta(x), \quad a, b = 1, \dots, 5, \quad (1.4)$$

die auf jeder Sprosse x eine $SO(5)$ -Algebra generieren. Dabei sind die Größen Γ^{ab} zehn antisymmetrische (4×4) -Matrizen, die ihrerseits eine adjungierte irreduzible Matrixdarstellung der $SO(5)$ bilden¹. Die Basis des Hilbertraums auf einer Sprosse wird nun so gewählt, daß sie in der quadratischen Casimir-Ladung der $SO(5)$ -Algebra

$$C(x) = \sum_{a < b} L_{ab}^2(x) \quad (1.5)$$

und auch bezüglich der totalen Ladung $Q = \frac{1}{2}(c^\dagger c + d^\dagger d - 2)$ und der z -Komponente des Spins $S^z = \frac{1}{2}(c^\dagger \sigma_z c + d^\dagger \sigma_z d)$ (mit der Paulimatrix σ_z) diagonal ist. Ausgehend von den Eigenwerten von $C(x)$ kann der Hilbertraum in sechs $SO(5)$ -Multipletts zerlegt werden:

- Drei $SO(5)$ -Singulets ($C = 0$), (für die explizite Form von R siehe Anhang A.4)

$$\begin{aligned} |\Psi_{0,0}^{(1)}\rangle &= |\Omega\rangle := \frac{c^\dagger d^\dagger - c^\dagger d^\dagger}{\sqrt{2}} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{array}{c} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{array} - \begin{array}{c} |\downarrow\rangle \\ |\uparrow\rangle \end{array} \right) \\ |\Psi_{0,0}^{(2)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{8}} \Psi_\alpha R_{\alpha\beta} \Psi_\beta |\Omega\rangle \sim \begin{array}{c} |\uparrow\downarrow\rangle \\ - \\ |-\rangle \end{array} \\ |\Psi_{0,0}^{(3)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{8}} \Psi_\alpha^\dagger R_{\alpha\beta} \Psi_\beta^\dagger |\Omega\rangle \sim \begin{array}{c} |-\rangle \\ \uparrow\downarrow \end{array}. \end{aligned} \quad (1.6)$$

- Ein $SO(5)$ -Vektorquintett ($C = 4$), das den ferromagnetisch polarisierten Zustand bei Halbfüllung enthält

$$|\Psi_{5,\alpha}^{(1)}\rangle \in \left\{ \begin{array}{c} |-\rangle \\ - \\ |-\rangle \end{array}, \begin{array}{c} |\uparrow\downarrow\rangle \\ |-\rangle \end{array}, \begin{array}{c} |\uparrow\rangle \\ |-\rangle \end{array}, \begin{array}{c} |\downarrow\rangle \\ |-\rangle \end{array}, \begin{array}{c} |\uparrow\rangle \\ |-\rangle \end{array} + \begin{array}{c} |\downarrow\rangle \\ |-\rangle \end{array} \right\} \quad \alpha = 1, \dots, 5. \quad (1.7)$$

- Zwei $SO(5)$ -Spinorquartetts ($C = 5/2$), in denen eine ungerade Anzahl von Elektronen auf einer gegebenen Sprosse enthalten sind

$$\begin{aligned} |\Psi_{4,\alpha}^{(1)}\rangle &\sim \sqrt{2} \Psi_\alpha |\Omega\rangle \in \left\{ \begin{array}{c} |-\rangle \\ |-\rangle \\ |-\rangle \end{array}, \begin{array}{c} |-\rangle \\ |-\rangle \\ |-\rangle \end{array}, \begin{array}{c} |\uparrow\rangle \\ |-\rangle \\ |-\rangle \end{array}, \begin{array}{c} |\downarrow\rangle \\ |-\rangle \\ |-\rangle \end{array} \right\}, \quad \alpha = 1, \dots, 4, \\ |\Psi_{4,\alpha}^{(2)}\rangle &\sim \sqrt{2} \Psi_\alpha^\dagger |\Omega\rangle \in \left\{ \begin{array}{c} |\uparrow\rangle \\ |-\rangle \\ |-\rangle \end{array}, \begin{array}{c} |\downarrow\rangle \\ |-\rangle \\ |-\rangle \end{array}, \begin{array}{c} |\uparrow\downarrow\rangle \\ |-\rangle \\ |-\rangle \end{array}, \begin{array}{c} |\uparrow\downarrow\rangle \\ |-\rangle \\ |-\rangle \end{array} \right\}, \quad \alpha = 1, \dots, 4. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Das Vektorquintett (1.7) kann auch direkt aus den $SO(5)$ -Spinoren konstruiert werden, und zwar unter Verwendung eines Operators²

$$n_a(x) := \frac{1}{2} \Psi_\alpha^\dagger(x) \Gamma_{\alpha\beta}^a \Psi_\beta(x), \quad a = 1, \dots, 5. \quad (1.9)$$

¹Eine kurze Einführung in die Darstellungstheorie der $SO(5)$ und der im folgenden relevanten Größen wird im Anhang A.1 präsentiert. Dabei wird in A.1.2 auch auf die allgemeine Definition der Spinoren in zwei Dimensionen und der Einschränkung auf Leitermodelle eingegangen.

²Dieser Operator n_a wird bei Scalapino et al. [4] Superspin Vektor genannt und steht in direkter Beziehung zu den Operatoren $\vec{S}_c = \frac{1}{2} c^\dagger \vec{\sigma} c$, $\vec{S}_d = \frac{1}{2} d^\dagger \vec{\sigma} d$ und Δ, Δ^\dagger (mit $\Delta^\dagger = \frac{i}{2} c^\dagger \sigma_y d^\dagger$).

Die explizite Form der Diracschen Γ -Matrizen Γ^a ist im Anhang A.1.1 gegeben. Mit dieser Definition ergibt sich für das Vektorquintett

$$|\Psi_{5,1(2)}^{(1)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(n_1 \pm n_5)|\Omega\rangle, \quad |\Psi_{5,3(4)}^{(1)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(n_2 \pm n_3)|\Omega\rangle, \quad |\Psi_{5,5}^{(1)}\rangle = n_4|\Omega\rangle. \quad (1.10)$$

Insgesamt läßt sich ein Zustand $|\Psi_{d,\alpha}^{(k)}\rangle$ auf einer Sprosse durch die Dimension d des zugehörigen $SO(5)$ -Multipletts und durch einen zusätzlichen Index k , der die Multipletts gleicher Casimir-Ladung kennzeichnet, charakterisieren. Die Zustände innerhalb eines Multipletts besitzen unterschiedliche Eigenwerte bezüglich der Operatoren Q und S^z und werden durch den Index α numeriert ($\alpha = 1, \dots, d$). Auf ähnliche Weise können die Zustände auf mehreren Sprossen in $SO(5)$ -Multipletts unterteilt werden, wobei natürlich auch Multipletts mit sehr großen Dimensionen d entstehen (siehe z.B. Abschnitt 1.2 für die Klassifizierung der Zustände auf zwei Sprossen). Die Zustände (1.6)–(1.8) auf einer Sprosse dienen im folgenden der Konstruktion $SO(5)$ -symmetrischer Systeme.

Jedes elektronische Leitermodell mit einer lokalen $SO(5)$ -Symmetrie auf einer Sprosse hat die Entartung der Energie innerhalb der Zustände eines jeden Multipletts zu erhalten. Der zugehörige $SO(5)$ -invariante Hamilton-Operator auf einer Sprosse x kann aus diesem Grund stets als Summe von Projektionsoperatoren auf die Zustände (1.6)–(1.8) geschrieben werden

$$h_x = \lambda_5 \sum_{\mu=1}^5 |\Psi_{5,\mu}^{(1)}\rangle\langle\Psi_{5,\mu}^{(1)}| + \sum_{k,l=1}^2 \lambda_4^{(k,l)} \sum_{\mu=1}^4 |\Psi_{4,\mu}^{(k)}\rangle\langle\Psi_{4,\mu}^{(l)}| + \sum_{k,l=1}^3 \lambda_0^{(k,l)} |\Psi_{0,0}^{(k)}\rangle\langle\Psi_{0,0}^{(l)}|. \quad (1.11)$$

Die Kopplungskonstanten $\lambda_d^{(k,l)}$ erfüllen aufgrund der Hermitizität von h_x die Bedingung $\lambda_d^{(k,l)} = (\lambda_d^{(l,k)})^*$. Die Projektionsoperatoren auf die einzelnen Zustände³

$$\hat{P}_{d,\mu}^{k,l} := |\Psi_{d,\mu}^{(k)}\rangle\langle\Psi_{d,\mu}^{(l)}| \quad (1.12)$$

sind vollständig im Anhang A.3.1 angegeben, dargestellt durch die Elektronerzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $c_\sigma^\dagger, d_\sigma^\dagger$ bzw. c_σ, d_σ . In dieser Basis der Operatoren auf einer Sprosse lautet der Projektionsoperator auf das erste Singulett

$$\hat{P}_{0,0}^{1,1} = |\Psi_{0,0}^{(1)}\rangle\langle\Psi_{0,0}^{(1)}| = -\frac{1}{3}\vec{S}_c(x)\vec{S}_d(x) + \frac{4}{3}(\vec{S}_c(x)\vec{S}_d(x))^2, \quad (1.13)$$

mit dem Spinoperator $\vec{S}_c(x) = \frac{1}{2}c^\dagger(x)\vec{\sigma}c(x)$ (analog $\vec{S}_d(x)$ für die untere Sprosse d). Der in den Spinoperatoren bilineare Term bezeichnet die Spinaustauschwechselwirkung zwischen benachbarten Plätzen, die in vielen physikalischen Systemen bei tiefen Temperaturen die dominierende Wechselwirkung darstellt und je nach Vorzeichen der Kopplung eine ferromagnetische oder antiferromagnetische Ordnung bevorzugt. In einigen eindimensionalen Modellen tritt sie auch zusammen mit dem biquadratischen Wechselwirkungsterm auf und ermöglicht bei bestimmten Verhältnissen der Kopplungskonstanten die exakte Lösung des Modells, wie z.B. beim AKLT-Modell [11, 12], der integrablen, isotropen Spin-1 Heisenbergkette [13, 14] und der $SU(3)$ -symmetrischen Spin-1 Kette [15].

³In den nächsten Abschnitten wird diese abkürzende Schreibweise für die Projektionsoperatoren und der komplette Ausdruck abwechselnd verwendet.

Ein anderer $SO(5)$ -invarianter Term ist das Paarhüpfen zwischen den beiden Plätzen einer Sprosse

$$\hat{P}_{0,0}^{2,3} + \hat{P}_{0,0}^{3,2} = d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} c_{\uparrow} c_{\downarrow} + H.c., \quad (1.14)$$

der die Propagation eines Elektronenpaares beschreibt und besonders bei der Supraleitung wichtig werden kann.

Es gibt noch viele weitere $SO(5)$ -symmetrische Operatoren auf einer Sprosse, wobei **sämtliche** invarianten Terme durch Linearkombinationen der Projektionsoperatoren $\hat{P}_{d,\mu}^{k,l}(x)$ gebildet werden können, so daß eine ganze Klasse von elektronischen Leitermodellen konstruiert werden kann. Das erste $SO(5)$ -symmetrische Leitermodell wurde von Scalapino, Zhang und Hanke [4] vorgestellt und ist eine Verallgemeinerung einer Hubbardleiter⁴. Der Anteil des SZH-Hamiltonoperators, der nur die Kopplungen auf einer Sprosse enthält, lautet

$$\begin{aligned} H_{\text{Sp}} &= H_{\text{Spin/Ladung}} + H_{\text{Hüpfen}} \\ &= \sum_x \left[U \left((n_{c\uparrow}(x) - \frac{1}{2})(n_{c\downarrow}(x) - \frac{1}{2}) + (c \rightarrow d) \right) + V (n_c(x) - 1)(n_d(x) - 1) \right. \\ &\quad \left. + J \vec{S}_c(x) \vec{S}_d(x) - 2t_{\perp} (c_{\sigma}^{\dagger}(x) d_{\sigma}(x) + H.c.) \right], \end{aligned} \quad (1.15)$$

mit der Austauschamplitude $J = 4(U + V)$. Diese Bedingung an J garantiert die Entartung der fünf Zustände des $SO(5)$ -Quintetts (1.7) und somit die lokale $SO(5)$ -Symmetrie des Systems. Die benachbarten Sprossen werden nur über das Hüpfen einzelner Elektronen gekoppelt, das auch $SO(5)$ -invariant ist (siehe Abschnitt 1.2). Dieses Modell läßt sich auf einer Sprosse natürlich auch durch eine Linearkombination von lokalen Projektionsoperatoren bei der Wahl

$$\lambda_0 = \begin{pmatrix} -\frac{7}{2}U - 3V & 2\sqrt{2}t_{\perp} & -2\sqrt{2}t_{\perp} \\ * & \frac{U}{2} - V & 0 \\ * & * & \frac{U}{2} - V \end{pmatrix}, \quad \lambda_4 = \begin{pmatrix} 0 & -2t_{\perp} \\ * & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \lambda_5 = \frac{U}{2} + V$$

der Kopplungskonstanten in (1.11) darstellen. Zusätzlich zu den Wechselwirkungen in der Hubbardleiter werden in diesem System auch die Spinaustauschwechselwirkung J und die Coulombwechselwirkung V zwischen den beiden Plätzen einer Sprosse betrachtet. Die Bedingung an J zur Erhaltung der $SO(5)$ -Symmetrie wirft natürlich die Frage auf, ob es Materialien gibt, die sich mit diesem Modell beschreiben lassen. Im allgemeinen ist die Coulombwechselwirkung U auf einem Platz stark repulsiv und die Spinwechselwirkung J eine kleine positive Größe, so daß folglich die Wechselwirkung V zwischen den benachbarten Plätzen stark attraktiv sein müßte und nicht wie zu vermuten wäre eine repulsive Coulombwechselwirkung. Diese attraktive, lokale Wechselwirkung würde dann für eine Paarung von Elektronen sorgen. Es gibt nun tatsächlich eine große Menge von supraleitenden Materialien, bei denen eine solche Paarung auftritt. Sie lassen sich hervorragend mit dem zweidimensionalen $t - U - V$ Modell

$$H = \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} -t (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + H.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j \quad (1.16)$$

⁴Im folgenden wird dieses Modell mit SZH-Modell bezeichnet nach den Anfangsbuchstaben der Autorennamen.

mit der Kopplung $V < 0$ beschreiben [16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24]. Besonders die Arbeit von Micnas et al. [16] erklärt sehr gut die verschiedenen Mechanismen, die für das Auftreten dieser attraktiven lokalen Wechselwirkung verantwortlich sein können. Diese attraktive Wechselwirkung tritt auch beim zweidimensionalen Modell von van Duin und Zaanen [24] auf, das sogar für bestimmte Modellparameter eine „mean field“ $SO(5)$ -Symmetrie besitzt. Aus diesem Grund ist zu erwarten, daß auch bei den quasi-eindimensionalen Leitermodellen die Bedingung $J = 4(U + V)$ zu physikalischen Systemen führen kann, die geeignet sind, um Materialien mit einer Leiterstruktur zu beschreiben (analog zum Modell (1.16) für zweidimensionale Systeme wie z.B. Kupraten mit Schichtenstrukturen). Weitere Argumente für die physikalische Relevanz des SZH-Modells sind auch seine Verbindung mit dem $t - J$ Leitermodell bei einer bestimmten Wahl der Kopplungskonstanten, bewiesen von Eder et al. [25] und die approximative $SO(5)$ -Symmetrie der niedrigliegenden Anregungen in allgemeinen Hubbard-Leitermodellen mit zwei Beinen bei Halbfüllung (siehe z.B. [5, 26]). Das $SO(5)$ -symmetrische SZH-Modell (1.15) mit seinen vielen invarianten Erweiterungen ist somit ein sehr interessantes System, das in den folgenden Kapiteln eingehend untersucht wird. Die hohe Symmetrie ermöglicht dabei sogar die Bestimmung des exakten Grundzustandes in bestimmten Bereichen der Kopplungskonstanten.

1.2 Kopplung benachbarter Sprossen

Zur Beschreibung realer quasi-eindimensionaler elektronischer Systeme muß zusätzlich zu den Wechselwirkungen auf einer Sprosse auch die Kopplung zwischen benachbarten Sprossen berücksichtigt werden. Diese Kopplungsterme sollen die Symmetrie erhalten und müssen somit mit den zehn Generatoren der $SO(5)$ $\mathcal{L}_{ab}(x, y) := L_{ab}(x) + L_{ab}(y)$ ($a, b = 1, \dots, 5$), definiert auf den Sprossen x und y , kommutieren. **Sämtliche** $SO(5)$ -symmetrischen Terme können wieder als Linearkombinationen von Projektionsoperatoren geschrieben werden⁵, wobei nun auf die Zustände auf zwei Sprossen projiziert wird. Zur Definition der Projektionsoperatoren erfolgt zunächst die Konstruktion der Zustände auf zwei Sprossen über alle Tensorprodukte der Zustände einzelner Sprossen (insgesamt gibt es 256 Zustände (16×16)). Anschließend werden diese Wellenfunktionen nach Berechnung der Casimir-Ladung

$$C(x, y) := \sum_{a < b} \mathcal{L}_{ab}^2(x, y) \quad (1.17)$$

in die verschiedenen $SO(5)$ -Multipletts unterteilt. Die Wellenfunktionen auf zwei Sprossen können nun aus Tensorprodukten entstehen, bei denen sich auf einer der beiden Sprossen ein Singulett-Zustand befindet ($\mathbf{1} \otimes (\mathbf{1}, \mathbf{4}, \mathbf{5})$). Diese Tensorprodukte führen auf einfache Produktzustände wie z.B. den $SO(5)$ -Singulett auf zwei Sprossen $|\Psi_{0,0}^{(i)}\rangle_x |\Psi_{0,0}^{(j)}\rangle_y$ mit der Casimir-Ladung $C(x, y) = 0$. Es können auf diese Weise aber auch Quartetts und Quintetts mit den entsprechenden Casimir-Ladungen $C = 5/2$ bzw. $C = 4$ gebildet werden. Insgesamt gibt es neun Singulett, zwölf Quartetts und sechs Quintetts mit dieser Struktur. Die restlichen 169 Zustände auf zwei Sprossen entstehen durch die Bildung der Tensorprodukte der Quartetts (1.8) und Quintetts (1.7) auf einer Sprosse. Die Zerlegung dieser Tensorprodukte in irreduzible Dar-

⁵Analog zu (1.11) in Abschnitt 1.1

stellungen der $SO(5)$ ergibt

$$\begin{aligned} 4 \otimes 4 &= 1 \oplus 5 \oplus 10, \\ 4 \otimes 5 &= 4 \oplus 16, \\ 5 \otimes 5 &= 1 \oplus 10 \oplus 14 \end{aligned} \quad (1.18)$$

(die Zahlen bezeichnen die Dimension der zugehörigen irreduziblen Darstellung). Beispielsweise ist eines der vier $SO(5)$ Singulett im Tensorprodukt der Quartett-Zustände (1.8)

$$|\Psi_{0,0}^{(10)}(x,y)\rangle \equiv \frac{1}{2} \left(-|\Psi_{4,1}^{(1)}\rangle|\Psi_{4,3}^{(2)}\rangle - |\Psi_{4,2}^{(1)}\rangle|\Psi_{4,4}^{(2)}\rangle + |\Psi_{4,3}^{(1)}\rangle|\Psi_{4,1}^{(2)}\rangle + |\Psi_{4,4}^{(1)}\rangle|\Psi_{4,2}^{(2)}\rangle \right). \quad (1.19)$$

Eine komplette Liste der 14 $SO(5)$ -Singulett auf zwei Sprossen ist im Anhang A.2 gegeben. Ähnliche Linearkombinationen der Sprossenzustände treten in den anderen Zuständen auf, wobei nun zusätzlich höherdimensionale Darstellungen mit den Casimir-Ladungen $C = 6$ für die Dekupletts, $C = 10$ für die 14-dimensionale und $C = 15/2$ für die 16-dimensionalen Darstellungen erscheinen. Die Zustände innerhalb der Multipletts können wiederum weiter bezüglich ihrer verschiedenen Eigenwerte von $Q(x,y) = Q(x) + Q(y)$ und $S^z(x,y) = S^z(x) + S^z(y)$ unterteilt werden. In Abbildung 1.1 sind die Quantenzahlen der Zustände aller möglichen irredu-

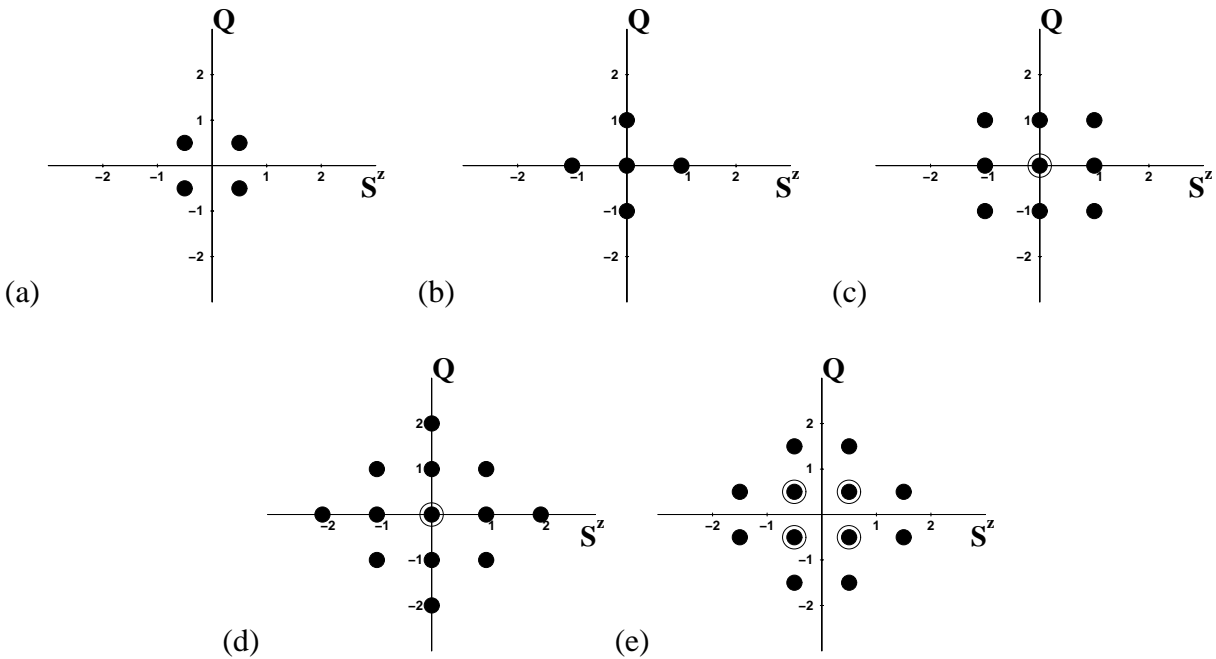


ABBILDUNG 1.1: Die irreduziblen $SO(5)$ -Darstellungen auf einem Paar von Sprossen zerlegt bezüglich der Eigenwerte von Q und S^z : (a) das Quartett (mit Casimir-Ladung $C = 5/2$), (b) das Quintett ($C = 4$), (c) die zehndimensionale ($C = 6$), (d) die 14-dimensionale ($C = 10$) und (e) die 16-dimensionale ($C = 15/2$) irreduzible Darstellung (zwei Kreise bedeuten zwei Zustände mit identischen Eigenwerten).

ziblen Darstellungen der $SO(5)$ auf zwei Sprossen angegeben. Insgesamt gibt es 14 Singulett, 16 Quartetts, zehn Quintetts, fünf Dekupletts, ein 14-dimensionales Multiplett und vier 16-dimensionale Multipletts. Diese Klassifikation wird nun verwendet, um Projektionsoperatoren

zu definieren, die Übergänge zwischen den Zuständen der Multiplets gleicher Casimir-Ladung erzeugen. Beispielsweise bewirkt der Operator

$$\hat{P}_{0,0}^{1,2}(x, y) = |\Psi_{0,0}^{(1)}(x, y)\rangle\langle\Psi_{0,0}^{(2)}(x, y)| \quad (1.20)$$

einen Übergang von einem $SO(5)$ -Singulett zu einem anderen. Diese Operatoren erhalten die $SO(5)$ -Symmetrie des Modells und wie schon im Abschnitt 1.1 für eine Sprosse können nun sämtliche $SO(5)$ -invarianten Terme auf zwei Sprossen durch Linearkombinationen der Projektionsoperatoren ausgedrückt werden⁶. Auf diese Weise kann der allgemeinst mögliche $SO(5)$ -symmetrische Hamiltonoperator auf zwei Sprossen (3.22) konstruiert werden, der sämtliche invarianten Wechselwirkungen beinhaltet (siehe Abschnitt 3.2). Im folgenden werden aber nur die physikalisch interessantesten $SO(5)$ -symmetrischen Kopplungen betrachtet und die Erweiterung des SZH-Modells auf einer Sprosse mit diesen Wechselwirkungen näher untersucht. Der wichtigste Kopplungsterm ist das Hüpfen einzelner Elektronen entlang der beiden Holme der Leiter

$$H_{t_{\parallel}} = -2t_{\parallel} \sum_{\langle x, y \rangle} [c_{\sigma}^{\dagger}(x)c_{\sigma}(y) + d_{\sigma}^{\dagger}(x)d_{\sigma}(y) + H.c.], \quad (1.21)$$

der das itinerante Verhalten der Elektronen beschreibt. Er kann unter Verwendung der alternierenden Definition der Spinoren (1.1, 1.2) in eine manifeste $SO(5)$ symmetrische Form gebracht werden

$$H_{t_{\parallel}} = -2t_{\parallel} \sum_{\langle x, y \rangle} \Psi_{\alpha}(x)R^{\alpha\beta}\Psi_{\beta}(y) + H.c. \quad (1.22)$$

(für die Definition der Matrix R siehe Gleichung (A.4)). Dieser Term ergibt zusammen mit den Kopplungen auf einer Sprosse (1.15) das komplette SZH-Modell [4]. Die physikalischen Eigenschaften dieses Modells sind im Limes starker Kopplung ($U, V \gg t_{\perp}, t_{\parallel}$) bereits von Scalapino et al. bestimmt worden. Sie berechneten das Grundzustandsphasendiagramm des Systems mittels Störungstheorie bei $t_{\perp} = t_{\parallel}$ (siehe Abbildung 1.2)

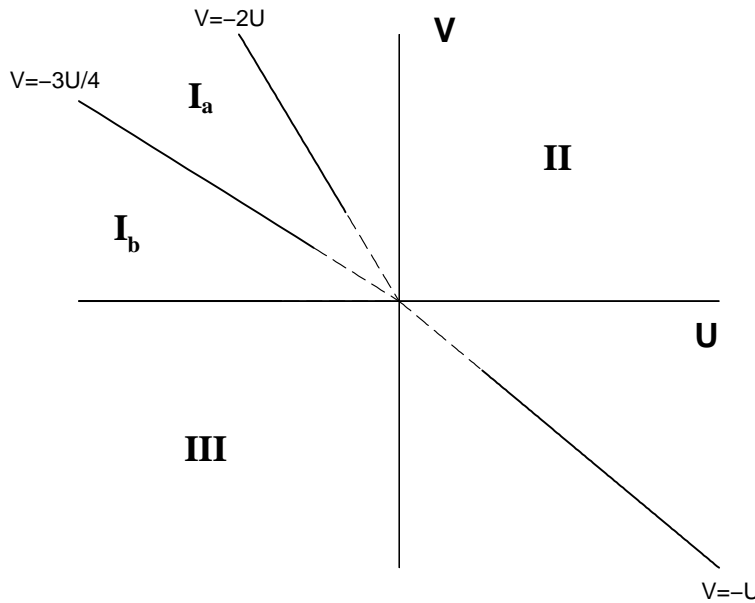


ABBILDUNG 1.2 - Phasendiagramm des SZH-Modells bei starker Kopplung, U und V gemessen in Einheiten von t_{\parallel} ($t_{\perp} = t_{\parallel} = 1$)

⁶Im Anhang A.3.2 werden diese Operatoren und ihre Darstellung in kanonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren detaillierter behandelt.

und fanden vier verschiedene Phasen bei Halbfüllung:

In der Phase I (für $0 \leq V \leq -2U$) sind nur die beiden $SO(5)$ -Singulets aus (1.6) mit der Doppelbesetzung relevant und das Modell kann dort auf ein Ising-artiges System in einem Magnetfeld abgebildet werden (die beiden Singulets entsprechen dabei den Zuständen $|\sigma^z(x) = \pm 1\rangle$). Der effektive Hamiltonoperator lautet [4]

$$\mathcal{H} = \sum_x (-h\sigma^x(x) + K(\sigma^z(x+1)\sigma^z(x) - 1)) \quad (1.23)$$

mit $h = t_\perp^2/|2U + V|$ und $K = t_\parallel^2/|U/2 - V|$. Auf der Linie $h = K$ gibt es nun einen Phasenübergang zwischen zwei Ising-Phasen I_a und I_b . Bei $h > K$ tritt die Phase I_a auf (das entspricht $V \geq -3U/4$ bei $t_\perp = t_\parallel$ in der Abbildung 1.2). Sie ist eine ungeordnete Ising-Phase und besitzt eine Anregungslücke über dem Grundzustand. Die Phase I_b ($h < K$ bzw. $V \leq -3U/4$) hingegen ist eine Ladungsdichtewellen-Phase, in der der Grundzustand aus einer alternierenden Anordnung der $SO(5)$ -Singulets $|\Psi_{0,0}^{(2)}\rangle$ und $|\Psi_{0,0}^{(3)}\rangle$ auf benachbarten Sprossen besteht (siehe Abbildung 1.3.a). Diese beiden Phasen koexistieren allerdings nur für die Kopplungen $t_\perp < 2t_\parallel$, bei $t_\perp \geq 2t_\parallel$ verschwindet die Ladungsdichtewellenphase, und es ist nur noch die ungeordnete Ising-Phase vorhanden.

Eine weitere Phase ist die Phase II , die für $V \geq -U, U \geq 0$ und $V \geq -2U, U \leq 0$ auftritt. Sie besitzt eine d-Wellen Symmetrie, und der Grundzustand läßt sich als Produkt von Singulets auf den einzelnen Sprossen schreiben (Produkt der Zustände $|\Psi_{0,0}^{(1)}\rangle$, siehe Abb. 1.3.b). Durch diese Struktur des Grundzustandes ist der erste angeregte Zustand durch eine Energielücke getrennt, wobei diese „Spinlücke“ der Energie zur Erzeugung eines Magnons entspricht⁷.

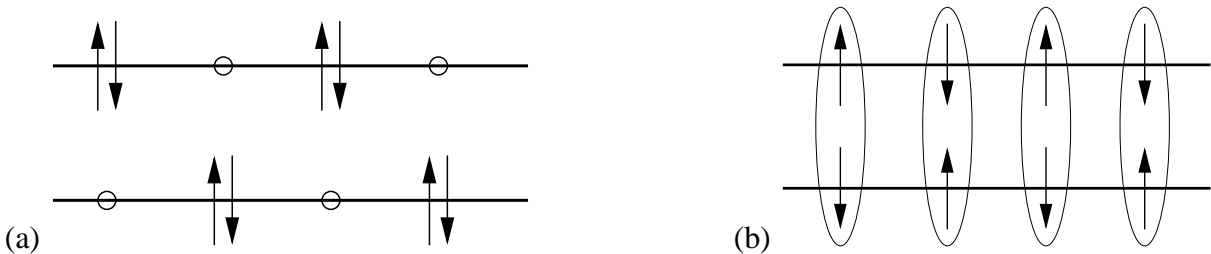


ABBILDUNG 1.3: Schematische Darstellung des Grundzustandes in der Ladungsdichtewellen-Phase I_b (a) und in der Phase II (b).

Phase III ($V \leq -U, V \leq 0$) ist die Superspin-Phase, in der das $SO(5)$ -Quintett dominiert und die Grundzustandseigenschaften des Systems bestimmt. Zur weiteren Untersuchung dieser Phase III haben Scalapino et al. eine endlich korrelierte Wellenfunktion verwendet

$$|\Psi_0^{SSH}\rangle = \text{Spur} \left(\prod_{x=1}^L \Gamma^a n_a |\Omega\rangle \right), \quad (1.24)$$

bei der in dieser Form periodische Randbedingungen vorausgesetzt werden (die Sprosse $L + 1$ wird mit der ersten Sprosse identifiziert). Es wird über den Index a summiert, und die Spur wird

⁷Ersetzung eines Singulets durch einen Spin-1 Zustand des Quintetts auf einer Sprosse.

im (4×4) -Matrixraum genommen, in dem die Matrizen Γ^a definiert sind. Durch diese Spurbildung wird die Wellenfunktion ein globales $SO(5)$ -Singulett⁸. Werden nun zum Hamiltonoperator (1.15) und (1.21) zusätzliche Vielteilchenwechselwirkungen hinzugenommen, so wird der Zustand (1.24) ein exakter Grundzustand des so erhaltenen Modells mit Energie $E = 0$. Er ist nicht eindeutig, da der Hamiltonoperator nur auf ein bestimmtes Multipllett projiziert und die Zustände in den anderen Multipletts auch die Energie $E = 0$ besitzen und mit (1.24) entartet sind. In dem betrachteten, auf das $SO(5)$ -Quintett reduzierten Hilbertraum soll allerdings der so erweiterte Hamiltonoperator mit dem Grundzustand (1.24) die wesentliche Physik des SZH-Modells beschreiben – in Analogie zum AKLT-Modell [11, 12], das als Beispiel für eine Haldane-Spinkette mit Spin $S = 1$ und einer Energielücke über dem Grundzustand dient.

Die Wellenfunktion (1.24) wird der Ausgangspunkt zur Konstruktion einer allgemeinen hochkorrelierten Vielteilchen-Wellenfunktion sein, die alle 16 Zustände auf einer Sprosse beinhaltet (siehe Abschnitt 1.3) und später für Variationswellenuntersuchungen des Grundzustandsphasendiagramms des SZH-Modells und vieler verschiedener $SO(5)$ -symmetrischer Erweiterungen jenseits starker Kopplung dient (siehe Kapitel 2).

Der Hüpfterm (1.21) ist eine von vielen Möglichkeiten, um Kopplungen zwischen benachbarten Sprossen einzuführen, aber die lokale $SO(5)$ -Symmetrie setzt Bedingungen an die explizite Form dieser Terme. So ist die Wechselwirkung V_{xy} zwischen benachbarten Sprossen aus dem $t - U - V$ Modell (1.16) in dieser Form nicht $SO(5)$ -symmetrisch. Des weiteren kann auch die Einführung einer zusätzlichen bilinearen Spinwechselwirkung, ähnlich zu der auf einer Sprosse mit einer entsprechenden Einschränkung an die zugehörige Kopplungskonstante J_{xy} (analog zu $J = 4(U + V)$, siehe Abschnitt 1.1), die Invarianz nicht erhalten. Somit läßt sich das zweidimensionale System (1.16) nicht einfach auf ein $SO(5)$ -symmetrisches Leitersystem mit einer zusätzlichen Spinwechselwirkung reduzieren, höchstens unter Hinzunahme von weiteren Termen zu diesen beiden Kopplungen J_{xy} und V_{xy} , die zwar die Symmetrie erhalten, sich aber physikalisch sehr schwer motivieren lassen.

Es gibt allerdings eine Reihe weiterer, physikalisch interessanter $SO(5)$ -symmetrischer Terme, die zur Beschreibung möglicher Materialien dienen können. So ist das Diagonalhüpfen einzelner Elektronen zwischen zwei Sprossen ebenfalls invariant

$$\sum_{\langle x,y \rangle} [d_{\sigma}^{\dagger}(x)c_{\sigma}(y) - c_{\sigma}^{\dagger}(x)d_{\sigma}(y) + H.c.], \quad (1.25)$$

wobei zur Erhaltung der Symmetrie ein Vorzeichenwechsel zwischen den Termen erforderlich ist. Diese Vorzeichenwechsel beruhen teilweise auf der alternierenden Definition der Spinoren und somit auch der Generatoren der Algebra auf den benachbarten Sprossen (siehe (1.1,1.2)). Der Hüpfterm (1.25) erzeugt Übergänge zwischen allen Multipletts mit gleicher Casimir-Ladung wie bereits (1.21). Er ist aufgrund des Vorzeichens nicht mehr invariant unter der Vertauschung von c_{σ} und d_{σ} (keine Sprossen-Parität).

Weitere $SO(5)$ -invariante Terme sind auch die Zwei-Paarhüpfsterme zwischen zwei Sprossen

$$\left[c_{\uparrow}^{\dagger}(y)c_{\downarrow}^{\dagger}(y)d_{\uparrow}^{\dagger}(x)d_{\downarrow}^{\dagger}(x)c_{\uparrow}(x)c_{\downarrow}(x)d_{\uparrow}(y)d_{\downarrow}(y) + H.c. \right] \quad (1.26)$$

bzw.

$$\left[d_{\uparrow}^{\dagger}(x)d_{\downarrow}^{\dagger}(x)d_{\uparrow}^{\dagger}(y)d_{\downarrow}^{\dagger}(y)c_{\uparrow}(x)c_{\downarrow}(x)c_{\uparrow}(y)c_{\downarrow}(y) + H.c. \right], \quad (1.27)$$

⁸Zum Beweis siehe Abschnitt 1.3 bzw. B.1.

die nur Übergänge zwischen den Singulets bewirken und schließlich Wechselwirkungen der Form

$$\left(c_{\downarrow}^{\dagger}(x)d_{\downarrow}(x) + c_{\uparrow}^{\dagger}(x)d_{\uparrow}(x) \right) c_{\uparrow}^{\dagger}(y)c_{\downarrow}^{\dagger}(y)d_{\uparrow}(y)d_{\downarrow}(y) + H.c., \quad (1.28)$$

bei denen Multipletts verschiedener Casimir-Ladung beteiligt sind. Explizite Ausdrücke für einige der vielen weiteren Kopplungen zwischen benachbarten Sprossen mit $SO(5)$ -Symmetrie sind im Anhang A.3.2 angegeben.

Die bisher betrachteten Kopplungen waren hauptsächlich elektronische Wechselwirkungen oder Einteilchenterme wie die Hüpfsterme, aber der größte Teil der untersuchten Leitersysteme in der Literatur sind reine Spinsysteme wie z.B. die allgemeine, isotrope, translationsinvariante Spin- $\frac{1}{2}$ Heisenbergleiter mit dem lokalen Hamiltonoperator auf zwei Sprossen (siehe Ref. [27])

$$\begin{aligned} \hat{h}_{x,y} &= \frac{1}{2}(J_R + \epsilon_R)\vec{S}_c(x)\vec{S}_d(x) + \frac{1}{2}(J_R - \epsilon_R)\vec{S}_c(y)\vec{S}_d(y) + J_L\vec{S}_c(x)\vec{S}_c(y) + J'_L\vec{S}_d(x)\vec{S}_d(y) \\ &+ J_D\vec{S}_c(x)\vec{S}_d(y) + J'_D\vec{S}_d(x)\vec{S}_c(y) + V_{LL} \left(\vec{S}_c(x)\vec{S}_c(y) \right) \left(\vec{S}_d(x)\vec{S}_d(y) \right) \\ &+ V_{DD} \left(\vec{S}_c(x)\vec{S}_d(y) \right) \left(\vec{S}_d(x)\vec{S}_c(y) \right) + V_{RR} \left(\vec{S}_c(x)\vec{S}_d(x) \right) \left(\vec{S}_c(y)\vec{S}_d(y) \right). \end{aligned} \quad (1.29)$$

Dieses Modell ist, unabhängig von der Wahl der verschiedenen Kopplungskonstanten, in keinem Punkt des Parameterraumes $SO(5)$ -symmetrisch. Allerdings läßt sich die Invarianz unter Hinzunahme bestimmter Terme und Einschränkung der Kopplungen erreichen, z.B. ist

$$\begin{aligned} &- \vec{S}_c(x)\vec{S}_c(y) - \vec{S}_d(x)\vec{S}_d(y) + \vec{S}_c(x)\vec{S}_d(x) + \vec{S}_d(x)\vec{S}_c(y) \\ &+ \frac{1}{2} \left[(c_{\uparrow}^{\dagger}(x)d_{\downarrow}^{\dagger}(x) - c_{\downarrow}^{\dagger}(x)d_{\uparrow}^{\dagger}(x))(c_{\downarrow}(y)d_{\uparrow}(y) - c_{\uparrow}(y)d_{\downarrow}(y)) + H.c. \right] \end{aligned} \quad (1.30)$$

invariant unter $SO(5)$ -Transformationen. Bei freier Wahl der Kopplungsparameter in (1.29) werden allerdings sehr viel mehr Zusatzterme zur Erhaltung der Symmetrie benötigt, die sich physikalisch auch sehr schwer motivieren lassen. Aus diesem Grund werden in den folgenden Kapiteln nur das SZH-Modell und einige interessante Erweiterungen detaillierter untersucht werden, da sie am besten geeignet sind, mögliche Materialien mit einer elektronischen Leiterstruktur zu beschreiben.

1.3 Matrixprodukt-Ansatz

Der Matrixproduktansatz ist eine endlich korrelierte Vielteilchenwellenfunktion mit der allgemeinen Form

$$|\Psi\rangle = \prod_{x=1}^L g_x = \prod_{x=1}^L \sum_{i_x} A(i_x) |i_x\rangle \quad (1.31)$$

bei offenen Randbedingungen, wobei g_x Matrizen am Ort x sind, deren Matrixelemente die lokalen Zustände $|i_x\rangle$ mit unterschiedlichen Amplituden $A_{\alpha\beta}(i_x)$ enthalten ($A(i_x)$ ist die entsprechende Matrix der Amplituden der Zustände). Die Struktur der Matrizen g_x ist abhängig

von der Symmetrie des Modells und der Anzahl der Zustände auf einem Platz x .

Diese Wellenfunktionen (1.31) wurden erfolgreich zur Untersuchung der Grundzustandsphasendiagramme und Korrelationsfunktionen verschiedener Systeme wie den eindimensionalen Spinketten mit Spin 1 [11, 12, 28, 29], den Spinleitern mit Spin 1/2 [27, 30, 31, 32] und Spinmodellen mit anderen Werten des Spins an einem Platz [33, 34, 35] bzw. anderen Symmetrien [36] verwendet. Bei vielen Modellen liefert der Ansatz bei entsprechender Wahl der Matrizen g_x sogar den exakten Grundzustand wie z.B. bei der Spin-1 AKLT-Kette [11, 12], dem Majumdar-Ghosh Modell [37] oder dem Shastry-Sutherland Modell [38, 39], um nur eine kleine Auswahl zu geben. Dort wird der Matrixproduktansatz (1.31) oft mit periodischen Randbedingungen definiert (Identifikation des Platzes $L + 1$ mit dem ersten Platz des Systems), wobei zusätzlich wie in Gleichung (1.24) noch die Spur im Matrixraum genommen wird, damit die Wellenfunktion ein globales Singulett bezüglich der Symmetrie wird⁹. In einigen Fällen lassen sich nicht nur die exakten Grundzustände berechnen, sondern sogar angeregte Zustände (exakt bzw. näherungsweise, siehe z.B. [27, 31, 32, 40]), so daß eine genauere Charakterisierung der jeweiligen Phasen möglich ist.

Außer den (quasi-) eindimensionalen Spinsystemen gibt es natürlich auch eindimensionale, elektronische Modelle [41, 42, 43, 44] und höherdimensionale Systeme [45, 46, 47], die endlich korrelierte Grundzustände besitzen und physikalisch sehr interessant sind¹⁰. Ein bereits diskutiertes elektronisches System mit einem Matrixprodukt-Grundzustand ist das effektive Modell, das die Physik in der Superspin-Phase des SZH-Modells beschreibt (siehe Abschnitt 1.2). In dieser Phase werden im endlich korrelierten Grundzustand (1.24) lokal nur die fünf Zustände (1.10) des Vektorquintetts mit den zugehörigen fünf Matrizen Γ^a verwendet, dabei entsprechen die Γ -Matrizen den Amplituden $A(i_x)$ in (1.31). Im folgenden wird nun die Wellenfunktion (1.24) verallgemeinert und **sämtliche** 16 Zustände auf einer Sprosse berücksichtigt, um anschließend das SZH-Modell und einige Erweiterungen in allen Bereichen der Kopplungskonstanten zu untersuchen (Kapitel 2) und um $SO(5)$ -symmetrische Leitersysteme mit exakten Grundzuständen zu konstruieren (Kapitel 3).

Die Erweiterung der Wellenfunktion erfordert bestimmte Einschränkungen an die Matrizen $A_{\alpha\beta}(i_x)$ der einzelnen Zustände auf einer Sprosse, die durch die Symmetrie gegeben sind. Als Beispiel dienen die zweibeinigen, $SU(2)$ -invarianten Spinleitern mit einem Spin 1/2 auf jedem Platz. Dort gibt es insgesamt auf einer Sprosse vier Zustände (das Singulett $|s\rangle$ und die drei Triplett-Zustände $|t_\alpha\rangle$). Eine Möglichkeit zur Definition der lokalen Matrix g_x ist nun (Translationsinvarianz vorausgesetzt)

$$g_x = a\mathbf{1}|s\rangle + b \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha}|t_{\alpha}\rangle, \quad \alpha = x, y, z. \quad (1.32)$$

Die Matrizen σ^{α} sind die drei Paulimatrizen, die ihrerseits eine $SU(2)$ bilden und die Gewichte a und b sind beliebige reelle Zahlen. Die Verknüpfung der $SU(2)$ -Multipletts der Zustände mit den entsprechenden Multipletts der Matrixdarstellungen der $SU(2)$ – das Singulett $|s\rangle$ mit der Einheitsmatrix $\mathbf{1}$ bzw. das Triplett $|t_{\alpha}\rangle$ zusammen mit den drei Paulimatrizen – garantiert die Erhaltung der Gruppenstruktur der $SU(2)$ im Matrixraum (und somit auch im Hilbertraum des

⁹Bei offenen Randbedingungen gibt es eine von der Dimension der Matrizen g_x abhängige Entartung des Zustandes, während bei periodischen Randbedingungen der Zustand eindeutig ist.

¹⁰Bei den höherdimensionalen Modellen sind es im allgemeinen keine Matrizen mehr an einem Platz x , sondern Tensoren höherer Stufe, die ihrerseits auf Vertexmodelle führen.

Modells) bei der Bildung der einzelnen Matrixprodukte $g_x g_{x+1}$. Der Ansatz (1.32) kann für die $SU(2)$ -Symmetrie durch die Verwendung von Matrixdarstellungen irreduzibler Tensoroperatoren viel allgemeiner formuliert und auch auf andere Systeme erweitert werden (siehe z.B. [48]). Bei der $SO(5)$ -invarianten, elektronischen Leiter können nun analog zur Spinleiter die 16 Zustände auf einer Sprosse teilweise mit den entsprechenden Matrixdarstellungen der Multipletts kombiniert werden. Der erste Schritt dazu wurde bereits von Scalapino et al. gemacht, als sie den Matrixproduktansatz für die Superspinphase formulierten (siehe Gleichung (1.24)). Dabei wurde das $SO(5)$ -Quintett (1.7) mit den fünf Matrizen Γ^a verknüpft, die im (4×4) -dimensionalen Matrixraum eine Vektordarstellung der $SO(5)$ bilden (siehe Gleichung (A.3)). Die drei $SO(5)$ -Singulets (1.6) können nun einfach durch die Kombination mit der Einheitsmatrix hinzugenommen werden, so daß für die Matrix g_x folgt

$$g_x = p_6 \Gamma^a n_a |\Omega\rangle + \sum_{i=1}^3 p_i |\tilde{\Psi}_{0,0}^{(i)}\rangle \mathbf{1} \quad (1.33)$$

mit den Amplituden p_i der einzelnen Multipletts. Die Zustände $|\tilde{\Psi}_{0,0}^{(i)}\rangle$ sind Linearkombinationen der Singulets aus (1.6). Das erste Singulett ist $|\tilde{\Psi}_{0,0}^{(1)}\rangle \equiv |\Psi_{0,0}^{(1)}\rangle$ und die beiden anderen $|\tilde{\Psi}_{0,0}^{(2,3)}\rangle$ sind die symmetrischen und antisymmetrischen Kombinationen¹¹

$$|\tilde{\Psi}_{0,0}^{(2,3)}\rangle \sim \left(\Psi_\alpha^\dagger R_{\alpha\beta} \Psi_\beta^\dagger \mp \Psi_\alpha R_{\alpha\beta} \Psi_\beta \right) |\Omega\rangle. \quad (1.34)$$

Die im Ansatz (1.33) nicht berücksichtigten Quartetts (1.8) besitzen aufgrund ihrer Spinoreigenschaft keine entsprechenden Matrizen, mit denen sie kombiniert werden können, da es im (4×4) -Matrixraum keine vierdimensionale Spinordarstellung der $SO(5)$ gibt. Allerdings lassen sich in einem vierdimensionalen Raum vier Vektoren definieren, die die Transformationseigenschaften eines Spinors unter den zehn Generatoren Γ^{ab} der $SO(5)$ im Matrixraum besitzen (siehe Anhang A.1.1) und die sich mit den Quartetts kombinieren lassen. Diese Spinoren sind $\vec{v}_i \sim \vec{e}_i$ ($i = 1, \dots, 4$) mit den kartesischen Einheitsvektoren \vec{e}_i , die den kompletten Raum aufspannen. Natürlich läßt sich dann jede $SO(5)$ -Transformation $\Gamma^{ab} \vec{v}_i$ wieder in diese vier Spinoren zerlegen. Der Matrixproduktansatz (1.33) wird nun so erweitert, daß die Spinoren \vec{v}_i zusammen mit den Quartetts die fünfte Spalte einer (5×5) -Matrix g_x bilden bzw. die transponierten Spinoren \vec{v}_i^t die fünfte Zeile. Die Struktur der lokalen Matrix g_x mit allen 16 Zuständen ist

$$g_x = \left(\begin{array}{cc|cc|c} \left(p_6 \Gamma^a n_a |\Omega\rangle + \sum_{i=1}^3 p_i \mathbf{1} |\tilde{\Psi}_{0,0}^{(i)}\rangle \right) & & & & |q_1\rangle \\ & & & & |q_2\rangle \\ & & & & |q_3\rangle \\ & & & & |q_4\rangle \\ \hline -|q_3\rangle & -|q_4\rangle & |q_1\rangle & |q_2\rangle & 0 \end{array} \right). \quad (1.35)$$

Dabei sind die vier Zustände $|q_\alpha\rangle$ ($\alpha = 1, \dots, 4$), die mit den Spinoren \vec{v}_i kombiniert werden, $|q_\alpha\rangle = p_4 |Q_\alpha^+\rangle + p_5 |Q_\alpha^-\rangle$, wobei $|Q_\alpha^\pm\rangle$ die symmetrische und antisymmetrische Kombination

¹¹Das Minuszeichen entspricht dabei der symmetrischen Kombination (mit Amplitude p_2) aufgrund der Definition von $|\Psi_{0,0}^{(2)}(x)\rangle$ und $|\Psi_{0,0}^{(3)}(x)\rangle$.

der Quartetts aus (1.8) ist

$$|Q_\alpha^\pm\rangle \sim \left\{ \begin{array}{l} \left| \begin{array}{c} \downarrow \\ - \end{array} \right\rangle \pm \left| \begin{array}{c} - \\ \downarrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{c} \uparrow \\ - \end{array} \right\rangle \pm \left| \begin{array}{c} - \\ \uparrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{c} \uparrow \\ \uparrow\downarrow \end{array} \right\rangle \pm \left| \begin{array}{c} \uparrow\downarrow \\ \uparrow \end{array} \right\rangle, \left| \begin{array}{c} \downarrow \\ \uparrow\downarrow \end{array} \right\rangle \pm \left| \begin{array}{c} \uparrow\downarrow \\ \downarrow \end{array} \right\rangle \end{array} \right\} \quad (1.36)$$

und mit den Amplituden p_4 bzw. p_5 gewichtet wird.

Die Wellenfunktion (1.31) mit der Matrix (1.35) ist nun symmetrisch unter Transformationen der $SO(5)$, da die Gruppenstruktur auch bei der Bildung der Matrixprodukte $g_x g_{x+1}$ erhalten bleibt. Die Multiplikation zweier benachbarter Matrizen kann für die einzelnen Blöcke innerhalb der Matrizen g_x und g_{x+1} – dem (4×4) -Block mit den Γ -Matrizen und der Einheitsmatrix und den beiden Blöcken, die die Spinor-Quartetts enthalten – getrennt voneinander untersucht werden. Innerhalb des (4×4) -Blocks liefert das Matrixprodukt auf zwei Sprossen außer $SO(5)$ -Singulets (aus $\mathbf{1} \times \mathbf{1}$) und $SO(5)$ -Quintetts (aus $\Gamma^a \times \mathbf{1}$) noch ein $SO(5)$ -Dekuplett $\Gamma^{ab} n_a(x) n_b(x+1) |\Omega_x\rangle |\Omega_{x+1}\rangle$ ¹². Analog ergibt die Multiplikation dieses Blocks auf einer Sprosse mit dem Spinoren des Quartetts auf der anderen (fünfte Spalte bzw. Zeile) aufgrund der Struktur der (4×4) -Matrizen in der Matrix $g_x g_{x+1}$ wieder nur Quartettzustände in der entsprechenden Spalte bzw. Zeile, obwohl z.B. nach (1.18) auch ein 16-dimensionales Multipllett vorkommen müßte. Schließlich gibt es noch die beiden möglichen Produkte der Spinoren auf den benachbarten Sprossen; zum einen das Skalarprodukt $\vec{v}_i^t \vec{v}_i$, das aufgrund der Anordnung der Quartetts ein $SO(5)$ -Singulett bildet, und zum anderen das dyadische Produkt $\vec{v}_i \vec{v}_i^t$ (Multiplikation der fünften Spalte von g_x mit der fünften Zeile von g_{x+1}), das sich zerlegen läßt in ein $SO(5)$ -Singulett, ein Quintett und ein Dekuplett mit den zugehörigen Matrizen.

Insgesamt sind im Matrixprodukt auf zwei Sprossen zwei $SO(5)$ -Singulets, zwei Quartetts, ein Quintett und ein Dekuplett enthalten (25 Zustände, genau wie die Dimension der Matrix). Diese Zustände sind Linearkombinationen der Zustände der einfachsten Basis auf zwei Sprossen. Sie können bezüglich der Spin- $SU(2)$ Subalgebra in Spin-Singulett, Dublett und Triplettzustände unterteilt werden (Zustände mit $S^z > 1$ gehören zur 14 und 16-dimensionalen Darstellung, siehe Abbildung 1.2). Aus diesem Grund ist es nicht möglich, unter Verwendung des Ansatzes die Entstehung von ferromagnetischen Domänen mit Zuständen höheren Spins zu beschreiben. Ein analoges Argument gilt für die höheren Eigenwerte der Ladung Q , die zu starken lokalen Abweichungen der Halbfüllung gehören.

Bei der Bildung weiterer Matrixprodukte auf mehreren Sprossen (z.B. $g_{x-1} g_x g_{x+1}$) zeigt sich, daß sich an der grundlegenden Struktur der Produktmatrix nichts ändert. Selbst bei der Multiplikation des im Vergleich zur Matrix g_x neu hinzugekommenen Dekupletts auf zwei Sprossen (Γ^{ab}) im (4×4) -Block mit den anderen Matrizen bzw. Spinoren der Zustände der weiteren Sprossen läßt sich die daraus entstehende Matrix stets in die bereits bekannten Größen zerlegen. Die allgemeine Form des Matrixproduktansatzes mit offenen Randbedingungen lautet

$$|\Psi\rangle = \prod_{x=1}^L g_x, \quad (1.37)$$

¹²Das Dekuplett entsteht aus $\Gamma^a \Gamma^b = 2\delta_{ab} + 2i\Gamma^{ab}$, während die 14-dimensionale Darstellung bei der Bildung des Tensorproduktes der beiden Quintetts aufgrund der Matrixstruktur verschwindet.

bzw. nach der Multiplikation aller Matrizen g_x ist $|\Psi\rangle$ in Form einer Matrix gegeben:

$$\left(\begin{array}{c} \left(A_{10}\Gamma^{ab}|\Psi_{10,ab}\rangle + A_5\Gamma^a|\Psi_{5,a}\rangle + \mathbf{1}(A_0^{(1)}|\Psi_{0,0}^{(1)}\rangle + A_0^{(2,1)}|\Psi_{0,0}^{(2)}\rangle) \\ \hline A_4^{(2)}|\Psi_{4,3}^{(2)}\rangle \quad A_4^{(2)}|\Psi_{4,4}^{(2)}\rangle \quad A_4^{(2)}|\Psi_{4,1}^{(2)}\rangle \quad A_4^{(2)}|\Psi_{4,2}^{(2)}\rangle \end{array} \middle| \begin{array}{c} A_4^{(1)}|\Psi_{4,1}^{(1)}\rangle \\ A_4^{(1)}|\Psi_{4,2}^{(1)}\rangle \\ A_4^{(1)}|\Psi_{4,3}^{(1)}\rangle \\ A_4^{(1)}|\Psi_{4,4}^{(1)}\rangle \\ \hline A_0^{(2,2)}|\Psi_{0,0}^{(2)}\rangle \end{array} \right). \quad (1.38)$$

Dabei sind die Größen $A_d^{(k)}$ die Amplituden der globalen Vielteilchen-Zustände $|\Psi_{d,\mu}^{(k)}\rangle$ (siehe die in den vorherigen Abschnitten verwendete Bezeichnungweise für die Multipletts der $SO(5)$). Mögliche Phasenfaktoren werden nun in den Definitionen der Zustände absorbiert. Die Zustände in den Matrixelementen sind globale Vielteilchenwellenfunktionen und abhängig von den sechs Parametern p_i , die die Amplituden der lokalen Multipletts (1.6) – (1.8) am jeweiligen Ort x darstellen (siehe (1.35)).

Für Untersuchungen $SO(5)$ -invarianter Leitermodelle ist der Matrixproduktansatz mit offenen Randbedingungen weniger geeignet, so daß noch zusätzlich in (1.38) die Spur im Matrixraum genommen wird

$$|\Psi_0\rangle = \text{Spur} \left(\prod_{x=1}^L g_x(\{p_i\}) \right), \quad (1.39)$$

damit der Ansatz ein globales $SO(5)$ -Singulett bildet (entspricht nun periodischen Randbedingungen). Die Singulett-Struktur bei Spurbildung ist bereits direkt in (1.38) ersichtlich, da die Matrizen Γ^{ab} und Γ^a spurlos sind und somit der einzige Beitrag von den beiden Singulett auf der Diagonalen kommt (für einen direkten Beweis unter Verwendung von globalen, unitären Transformationen siehe Anhang B.1)¹³. In dieser translationsinvarianten Form dient die Wellenfunktion (1.39) im folgenden Kapitel 2 als Ausgangspunkt für Variationsuntersuchungen verschiedenster $SO(5)$ -invarianter Modelle, wobei die Variablen p_i ($i = 1, \dots, 6$) die Variationsparameter darstellen. Im Abschnitt 2.5 wird dann auch auf die Erweiterung der Wellenfunktion zur Behandlung von Dimerisierung und des Auftretens dimerisierter Phasen in den Grundzustandsphasendiagrammen einiger Modelle eingegangen. Schließlich werden im Kapitel 3 Modelle vorgestellt, deren Grundzustand durch die Wellenfunktion (1.39) exakt gegeben ist.

¹³Der Ansatz ist auch invariant unter bestimmten Vorzeichenwechsel der Parameter p_i , z.B. führt $p_4 \rightarrow -p_4$ und $p_5 \rightarrow -p_5$ auf den selben globalen Zustand (1.39). Diese Vorzeichenwechsel entsprechen dabei ebenfalls globalen, unitären Transformationen.

KAPITEL 2

Phasendiagramme und Korrelationen $SO(5)$ -invarianter Leitermodelle

Im vorherigen Kapitel 1 wurde eine Methode zur Konstruktion allgemeiner elektronischer, $SO(5)$ -symmetrischer Leitermodelle mit zwei Beinen präsentiert, und die physikalisch interessantesten Kopplungen auf einer bzw. zwischen zwei benachbarten Sprossen wurden diskutiert. Dabei lag der Schwerpunkt der Diskussionen auf dem SZH-Modell, das aufgrund seiner Struktur und seiner Ähnlichkeit mit der Hubbard-Leiter am geeignetsten erscheint, reale Materialien zu beschreiben oder als ein effektives Modell zu dienen. Es ist bereits im Limes starker und schwacher Kopplung mit verschiedenen Methoden untersucht worden (siehe z.B. [4, 5, 6, 25, 26, 49]), allerdings gibt es bisher keine verlässlichen Aussagen über das Grundzustandsphasendiagramm bei mittleren Kopplungsstärken. Gegenstand dieses Kapitels wird nun zum einen die Untersuchung des SZH-Modells gerade in diesem physikalisch relevanten Bereich mittlerer Kopplung sein, zum anderen aber auch die Erweiterung dieses Modells durch andere, interessante $SO(5)$ -invariante Kopplungen und das Studium ihrer Auswirkungen auf das Phasendiagramm. Dabei wird die in Abschnitt 1.3 vorgestellte Wellenfunktion (1.39) als Variationswellenfunktion verwendet, um die Grundzustandsphasendiagramme und Korrelationsfunktionen der verschiedenen $SO(5)$ -symmetrischen Modelle zu untersuchen (Abschnitt 2.1 bis 2.3). Die exakte Diagonalisierung einiger Systeme auf zwei Sprossen in Abschnitt 2.4 ermöglicht dann die Bestimmung weiterer Eigenschaften. In Abschnitt 2.5 wird die translationsinvariante Wellenfunktion für den Fall des Auftretens einer Dimerisierung verallgemeinert. Schließlich werden in Abschnitt 2.6 allgemein die Symmetrien und möglichen Anregungen des SZH-Modells näher betrachtet.

2.1 Grundzustandsphasendiagramm des SZH-Modells

Das SZH-Modell ist im Bereich mittlerer Kopplungen noch nicht untersucht worden, da die meisten verwendeten Methoden die Entwickelbarkeit des Hamiltonoperators um kleine Werte der Kopplungsparameter voraussetzen, die es aber gerade dort nicht gibt. Auch sind keine exakten Lösungen bekannt, aus denen auf das Grundzustandsphasendiagramm bei mittleren Kopplungsstärken zumindest in Teilbereichen geschlossen werden könnte. Im folgenden wird nun versucht, diese Lücke zwischen starker und schwacher Kopplung zu schließen, um das komplette Phasendiagramm des SZH-Modells zu bestimmen. Zur Berechnung der Grundzustandswellenfunktion und ihrer Energie wird dabei ein Variationsverfahren verwendet. Die Güte dieses Verfahrens läßt sich dann durch die Varianz ΔH abschätzen, die die Abweichung der Wellenfunktion von einem exakten Eigenzustand des Systems angibt. Ausgangspunkt der Untersuchungen ist die translationsinvariante Wellenfunktion (1.39), mit

der unter Verwendung der sechs Gewichte p_i der lokalen Multipletts als Variationsparameter die Variationsenergie des SZH-Modells bestimmt wird. Mit dieser Wellenfunktion ergibt sich für die Spin- und Ladungswechselwirkungen auf einer Sprosse

$$\begin{aligned} E_{\text{Sprosse}} &= \langle \Psi_0 | H_{\text{Spin/Ladung}} | \Psi_0 \rangle \\ &\sim (p_2^2 + p_3^2) \left(\frac{U}{2} - V \right) + 5p_6^2 \left(\frac{U}{2} + V \right) - p_1^2 \left(\frac{7}{2}U + 3V \right) \end{aligned} \quad (2.1)$$

(siehe Gleichung 1.15). Der Variationsparameter p_6 ist das Gewicht des lokalen $SO(5)$ -Quintetts (1.7), p_1 gehört zum Singulett $|\Omega\rangle$, und p_2 bzw. p_3 sind die Amplituden der symmetrischen und antisymmetrischen Linearkombination der beiden anderen $SO(5)$ -Singulets in (1.6). Die Variationsenergie des Hüpfers auf einer Sprosse ist

$$E_{t_\perp} = \langle \Psi_0 | H_{\text{Hüpfen}} | \Psi_0 \rangle \sim t_\perp \left[8p_1p_2 + 2 \left(\frac{p_5^2 - p_4^2}{h_2} \right) (w - h_1) \right], \quad (2.2)$$

und der Hüpfers (1.21) zwischen zwei benachbarten Sprossen liefert

$$E_{t_\parallel} \sim t_\parallel \left[p_4p_5 (25p_6^2 + p_1^2 - p_2^2 - p_3^2) + h_2 (p_2p_3 - 5p_1p_6) + (p_4^2 - p_5^2) (5p_2p_6 - p_1p_3) \right] \quad (2.3)$$

mit den Größen¹ $h_1 := 5p_6^2 + p_1^2 + p_2^2 + p_3^2$, $h_2 := p_4^2 + p_5^2$ und $w := \sqrt{h_1^2 + 16h_2^2}$.

Im Fall starker Kopplung ($U, V \gg t_\perp, t_\parallel$) können nun die reinen Hüpfers (2.2) und (2.3) vernachlässigt werden. Die Minimierung der Variationsenergie in bezug auf die Parameter p_i und die anschließende Bestimmung der einzelnen Phasen liefert das bekannte Grundzustandsphasendiagramm in Abbildung 1.2, das von Scalapino et al. mittels Störungstheorie berechnet wurde. Der translationsinvariante Ansatz erlaubt allerdings auch bei Berücksichtigung der Hüpfers nicht die Bestimmung der Phasengrenze $V = -3U/4$ bzw. die Unterscheidung zwischen den beiden Ising-Phasen I_a und I_b , die bei der Kopplung $t_\perp = t_\parallel$ auftreten. Zu diesem Zweck muß eine dimerisierte Variationswellenfunktion verwendet werden, wie sie im Abschnitt 2.5 vorgestellt wird.

Die einzelnen Phasen werden im Variationsansatz durch die Eigenwerte der Projektionsoperatoren auf die sechs lokalen Multipletts festgelegt, d.h. nach Berechnung der Grundzustandsenergie und der Bestimmung der Werte der sechs Variationsparameter p_i an einem Punkt in der $U - V$ -Ebene (bei festen Werten von t_\perp und t_\parallel) werden mit dem so erhaltenen Grundzustand $|\Psi_0\rangle$ aus (1.39) die Erwartungswerte der Projektionsoperatoren auf die im Ansatz enthaltenen sechs Multipletts berechnet. Es ergibt sich für die drei Singulets in (1.35) mit $\hat{P}_i = |\tilde{\Psi}_{0,0}^{(i)}\rangle\langle\tilde{\Psi}_{0,0}^{(i)}|$, $i = 1, \dots, 3$

$$P_i = \langle \Psi_0 | \hat{P}_i | \Psi_0 \rangle \sim p_i^2 \quad (2.4)$$

(die Zustände $|\tilde{\Psi}_{0,0}^{(i)}\rangle$ sind in (1.34) definiert). Analog können auch die Erwartungswerte der Projektionsoperatoren auf die beiden Quartetts und auf das Quintett aus (1.35) mit den Amplituden p_4, p_5 und p_6 berechnet werden. Diese Erwartungswerte P_i sind natürlicherweise auf den Wert Eins normiert und der größte Wert P_{max} dient jetzt zur Festlegung der Phase: Z.B. gilt in der Superspinphase III im Phasendiagramm in Abbildung 1.2 bei starker Kopplung $P_6 \sim p_6^2 \sim 1$,

¹Diese drei neu definierten Größen h_1, h_2 und w werden im folgenden noch häufiger verwendet werden.

während die anderen Gewichte verschwinden. Die Variationsparameter ändern sich dabei stetig beim Übergang von einer Phase zur anderen, wobei die Phasengrenze so definiert wird, daß sie auf dem Punkt liegt, in dem die Parameter gleich groß sind (siehe z.B. Abbildung 2.1 als ein Beispiel für das qualitative Verhalten von zwei Parametern beim Phasenübergang).

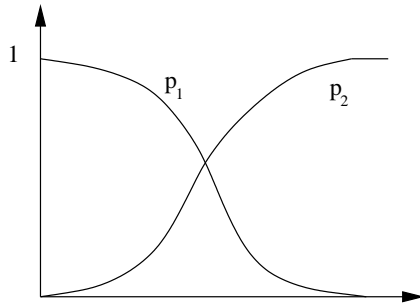


ABBILDUNG 2.1 - Beispiel einer Entwicklung der Werte der Variationsparameter p_1 und p_2 bei einem Phasenübergang von der Phase p_1 zur Phase p_2 (normiert).

Es werden bei dieser relativ willkürlichen Festlegung der Phasen und ihren Phasengrenzen natürlich auch Phasen auftreten können, bei denen mehrere Parameter p_i gleich groß sind und sich dieses Verhältnis nicht ändert. Inwiefern nun die durch den Variationsansatz festgelegten Phasen und die zugehörigen Phasenübergänge auch physikalischer Natur sind, hängt im wesentlichen von der Grundzustandswellenfunktion und den verschiedenen Korrelationsfunktionen ab, die die physikalischen Eigenschaften des Systems bestimmen².

Bei der Anwendung des Variationswellenansatzes auf das SZH-Modell bei starker Kopplung ergibt sich insgesamt, daß die Phase *I* durch den symmetrischen Singulettzustand mit Amplitude p_2 dominiert wird, der Grundzustand in der Phase *II* besteht aus einem Produkt von Singulett (p_1) auf den einzelnen Sprossen, und die Phase *III* ist die bereits bekannte Superspinphase (das Quintett mit Gewicht p_6 ist dort relevant). In diesem Zugang mit translationsinvarianten Parametern p_i auf den einzelnen Sprossen ist es allerdings nicht möglich, die von den Hüpfamplituden t_{\perp} und t_{\parallel} abhängige Phasengrenze zwischen den beiden verschiedenen Ising-Phasen I_a und I_b in Abbildung 1.2 zu reproduzieren, da die Grundzustände dort eine Dimerisierung aufweisen (siehe z.B. Abb. 1.3.a).

Es zeigt sich insgesamt, daß der Variationsansatz bei starker Kopplung sehr gut geeignet ist, um den Grundzustand des SZH-Modells in den einzelnen Phasen approximativ zu beschreiben und um die zugehörige Energie zu berechnen. Im folgenden wird nun der Ansatz zur Analyse des kompletten Phasendiagramms bei schwacher und mittlerer Kopplung verwendet.

2.1.1 Phasendiagramm bei schwacher Kopplung

Zur Untersuchung des SZH-Modells im Bereich schwacher Kopplungen auf einer Sprosse wird zuerst das nicht-wechselwirkende System mit $U = V = 0$ betrachtet. Dieses „tight-binding“-Modell kann exakt diagonalisiert werden (siehe Anhang A.4), so daß die Bandstruktur bei Halbfüllung bestimmt werden kann. Es gibt zwei Energiebänder

$$\epsilon_{\pm}(k) = \pm 2t_{\perp} - 4t_{\parallel} \cos(k), \quad -\pi \leq k \leq \pi, \quad (2.5)$$

und zwei Fälle müssen unterschieden werden:

Für die Werte der Kopplungen $t_{\perp} < 2t_{\parallel}$ schneidet die Fermienergie die beiden Bänder (siehe

²Die Grundzustandskorrelationsfunktionen des SZH-Modells werden im Abschnitt 2.2 näher untersucht werden.

Abbildung 2.2.a) und für $t_{\perp} \geq 2t_{\parallel}$ sind sie durch eine Energielücke voneinander getrennt (für den Übergang bei $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ siehe Abbildung 2.2.b).

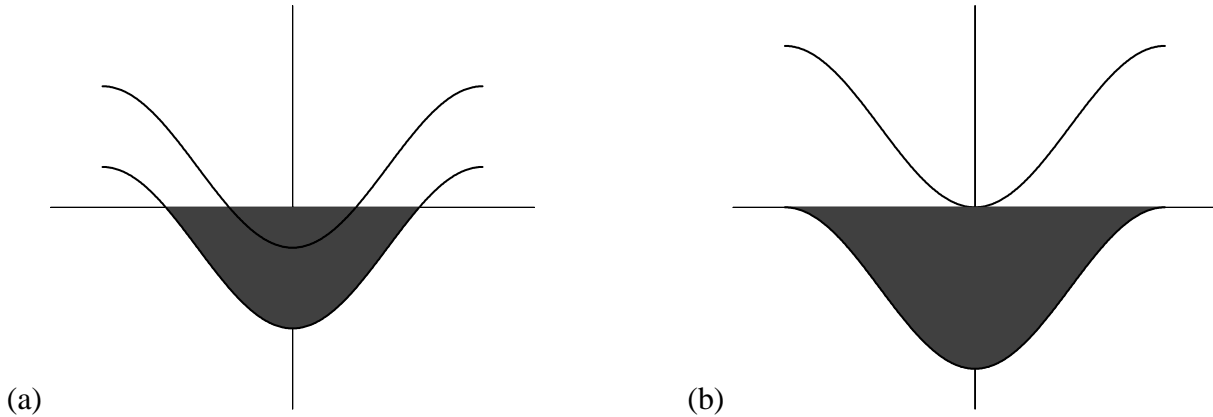


ABBILDUNG 2.2: Bandstruktur eines zweibeinigen Leitermodells für (a) $t_{\perp} = t_{\parallel}$ und (b) $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$.

Das System ohne Energielücke ($t_{\perp} < 2t_{\parallel}$) ist unter Verwendung der Bosonisierung der niedrig liegenden Moden in der Nähe der vier Fermipunkte untersucht worden, um das Phasendiagramm bei schwacher Kopplung zu erhalten ($U, V \ll t_{\perp}, t_{\parallel}$). Lin et al. [5] berechneten durch eine Renormierungsgruppenanalyse, daß das System im Bereich schwacher Kopplung zu einem integrierbaren, $SO(8)$ -symmetrischen Gross-Neveu-Modell getrieben wird³. Sie sagten weiterhin das Auftreten zusätzlicher Phasen voraus, die bei starker Kopplung nicht vorhanden sind, wie beispielsweise eine mehrkomponentige Luttinger-Flüssigkeitsphase, die im Bereich der Superspin-Phase *III* auftritt. Allerdings sind diese Resultate umstritten (siehe die Kritik von Ref. [49]), da nicht klar ist, inwiefern die ursprüngliche $SO(5)$ -Symmetrie korrekt berücksichtigt wurde bzw. ob bei einer Renormierungsgruppenanalyse überhaupt noch Aussagen über die Symmetrie gemacht werden können. Somit ist die genaue Struktur des Phasendiagramms bei schwacher Kopplung noch nicht eindeutig geklärt worden. Auch der Variationsansatz (1.39), der erfolgreich zur Beschreibung des SZH-Modells bei starker Kopplung verwendet wurde, ist bei schwacher Kopplung im Bereich $t_{\perp} < 2t_{\parallel}$ nicht geeignet, da endlich korrelierte Wellenfunktionen immer zu einem exponentiellen Abfall der Korrelationsfunktionen führen (siehe Kapitel 2.2), der die Existenz einer Energielücke zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand andeutet.

Das SZH-Modell bei schwacher Wechselwirkung mit einer Energielücke über dem Grundzustand im nicht-wechselwirkenden System ($t_{\perp} \geq 2t_{\parallel}$) ist durch eine Bosonisierung nicht lösbar, so daß dort andere Methoden angewendet werden müssen. Hier eignet sich jetzt der Matrixproduktansatz (1.39) sehr gut, um als Variationswellenfunktion bei schwachen Kopplungen zu dienen, da aufgrund der Struktur des Ansatzes schon indirekt eine Energielücke berücksichtigt wird. Aus diesem Grund wird das SZH-Modell und viele verschiedene Erweiterungen in den folgenden Abschnitten nur im Bereich $t_{\perp} \geq 2t_{\parallel}$ untersucht werden. Dabei wird versucht, das komplette Phasendiagramm auch im Bereich mittlerer Kopplungsstärken zu bestimmen.

³Das SZH-Modell ist bei Halbfüllung und $t_{\perp} = t_{\parallel}$ untersucht worden.

2.1.2 Phasendiagramm für $t_{\perp} \geq 2t_{\parallel}$

Das Ziel dieses Abschnittes ist die Bestimmung des kompletten Phasendiagramms des SZH-Modells für die Kopplungen $t_{\perp} \geq 2t_{\parallel}$, also im Bereich der Hüpfamplituden, wo das System eine Energielücke über dem Grundzustand bei schwacher Kopplung $U, V \ll t_{\perp}, t_{\parallel}$ besitzt (siehe die Diskussion im vorherigen Abschnitt). Zu diesem Zweck wird der Ansatz (1.39) als Variationswellenfunktion verwendet, um die Grundzustandsenergien bzw. die Grundzustände in der $U - V$ -Ebene bei festen Werten von t_{\perp} und t_{\parallel} näherungsweise zu bestimmen. Dabei liegt der Schwerpunkt der Untersuchungen auf dem Bereich $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$, während größere Werte von t_{\perp} nur am Rande diskutiert werden.

Für das Verhältnis $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ liefert der Variationsansatz im Fall des nicht-wechselwirkenden Systems ($U = V = 0$) den exakten Grundzustand⁴, der sich aus der Wahl $p_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}, p_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ und $p_i \equiv 0$ ($i = 3, \dots, 6$) für die sechs Variationsparameter ergibt. Er lautet

$$|\Psi_0\rangle \sim \prod_{x=1}^L \left(-c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} + c_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} - c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\downarrow}^{\dagger} \right) (x) |0\rangle, \quad (2.6)$$

und er entspricht der kompletten Füllung der Moden mit Energie $\epsilon_{-}(k)$ in der Dispersionsrelation (2.5), so daß dieses System ein Bandisolator ist. Aufgrund der energetischen Entartung verschiedener Multipletts bei $U = V = 0$ (siehe Abschnitt 2.4.1) ist es nicht klar, ob der Grundzustand auch eindeutig ist. Werden nun die Kopplungen auf einer Sprosse eingeschaltet ($U, V \neq 0$), so zeigt sich, daß der Zustand (2.6) auf einer Linie $V = -2U$ mit $U < 0$ im Phasendiagramm den exakten Grundzustand des Modells darstellt (zum Beweis siehe Abschnitt 2.4.1). Er ist dort sogar eindeutig, und es lassen sich sämtliche Grundzustandskorrelationen exakt berechnen (Abschnitt 2.2). Der Variationsansatz ist somit nicht nur bei starker, sondern auch bei schwacher Kopplung bzw. bei mittleren Stärken der Kopplungen, zumindest in der Nähe der Linie $V = -2U$, sehr gut geeignet, um den Grundzustand zu approximieren. Aus diesem Grund wird der Ansatz im folgenden zur Untersuchung des kompletten Phasendiagramms in diesem Bereich der Werte der Hüpfamplituden t_{\perp} und t_{\parallel} verwendet. Die Qualität dieser Methode wird dabei durch die Standardabweichung $\sqrt{\langle(\Delta H)^2\rangle} = \sqrt{\langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2}$ von der Energie gemessen, die die Abweichung der Variationswellenfunktion von einem exakten Eigenzustand angibt. Die Variationsuntersuchungen liefern das komplette Phasendiagramm in Abbildung 2.3, in dem neben den drei bereits bekannten Phasen eine zusätzliche Phase bei mittlerer Stärke der Kopplungen auftritt.

Im Fall schwacher Kopplung gibt es nur zwei Phasen, die ungeordnete Isingphase I (mit der Amplitude p_2) und die d-Wellenphase II (mit Gewicht p_1), die bereits vom Phasendiagramm bei starker Kopplung bekannt sind (siehe Abbildung 1.2). Die Superspinphase (Amplitude $p_6 \sim 0$) verschwindet in diesem Bereich der Kopplungskonstanten U und V . Schließlich besitzen auch die $SO(5)$ -Quartetts keine signifikanten Gewichte ($p_4, p_5 \sim 0$), wie es von einem Bandisolator zu erwarten ist. Die Struktur der Grundzustandswellenfunktion selber ist ähnlich zu (2.6) und auch die Werte der Standardabweichung sind klein, so daß die Approximation an einen exakten Eigenzustand des Systems sehr gut ist und somit der Ansatz bei schwacher Kopplung auch quantitativ gute Resultate liefert.

⁴Der Energie dieser Grundzustandswellenfunktion stimmt mit der Energie aus der exakten Diagonalisierung überein.

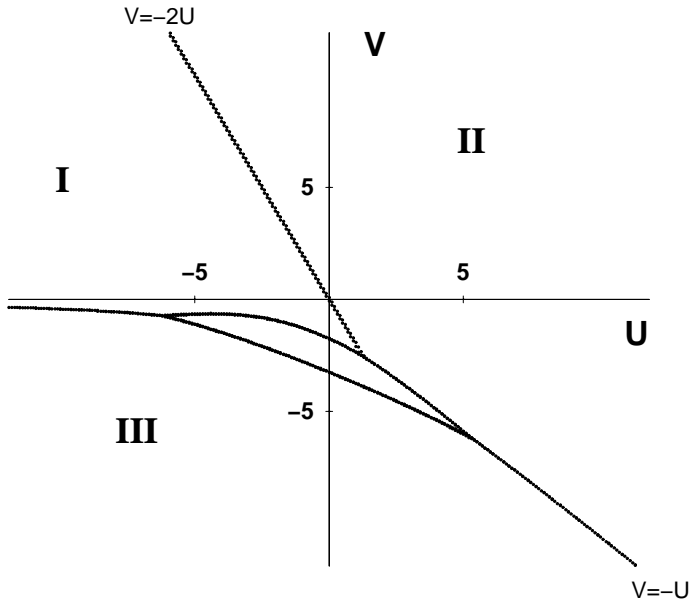


ABBILDUNG 2.3 - Phasendiagramm für $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ mit $t_{\parallel} = 1$: die Phasengrenzen sind durch Vergleich der Amplituden der verschiedenen Multipletts festgelegt worden.

Bei den hier und im folgenden betrachteten Werten der Hüpfamplituden $t_{\perp} \geq 2t_{\parallel}$ tritt die Ladungsdichtewellenphase I_b und somit ein Phasenübergang in der Isingphase I unabhängig von den Werten der Kopplungen nicht mehr auf (siehe das Modell (1.23) und die daraus resultierende Bestimmungsgleichung $h = K$ für den Phasenübergang). Die Isingphase I ist jetzt vollständig ungeordnet und entspricht der Phase I_a in der Abbildung 1.2.

Bei Betrachtung des kompletten Grundzustandsphasendiagramms in Abbildung 2.3 erscheint nun eine zusätzliche Phase im Bereich mittlerer Kopplung ($U, V \cong t_{\perp}, t_{\parallel}$), in der die $SO(5)$ -Quartetts bzw. die symmetrische Kombination $|Q_{\alpha}^{+}\rangle$ aus (1.36) mit der Amplitude p_4 das größte Gewicht besitzen. Auch der symmetrische Singulett-Zustand $(\Psi_{\alpha}^{\dagger} R_{\alpha\beta} \Psi_{\beta}^{\dagger} - \Psi_{\alpha} R_{\alpha\beta} \Psi_{\beta})|\Omega\rangle$ — der den Grundzustand in der Phase I beschreibt — hat dort ein signifikantes Gewicht, so daß die Struktur des Grundzustandes in diesem Bereich nicht mehr so einfach ist wie z.B. im Punkt $U = V = 0$ mit dem zugehörigen Zustand (2.6). Insgesamt gibt es in dieser Phase mehrere lokale Multipletts, die im Grundzustand des Systems mit ähnlich großen Amplituden auftreten. Außerdem ist es aufgrund der großen Werte der Standardabweichung $\langle(\Delta H)^2\rangle$ bei mittleren Kopplungsstärken (besonders im Bereich der Quartett-Phase), die einer schlechten Approximation der Variationswellenfunktion an einen exakten Eigenzustand des Systems entsprechen, nicht möglich, die Phasengrenzen präziser zu bestimmen bzw. detaillierter auf die Grundzustandseigenschaften einzugehen.

Natürlich kann es vorkommen, daß der Grundzustand eine sehr komplexe Struktur besitzt und nicht mal näherungsweise durch den Variationsansatz approximiert wird. Der Matrixproduktansatz ist beispielsweise zur Beschreibung von Phasen mit masselosen Anregungen oder überhaupt Luttinger-Flüssigkeitsphasen, wie sie bei schwacher Kopplung im Phasendiagramm des SZH-Modells für $t_{\perp} = t_{\parallel}$ auftreten (siehe Abschnitt 2.1.1), nicht geeignet. Allerdings ist es möglich, daß selbst in diesem Fall die Variationsenergie zumindest eine gute Näherung an die exakte Grundzustandsenergie repräsentiert. Außerdem gibt der Ansatz in den Phasen, in denen er große Standardabweichungen erzeugt wie in der Quartett-Phase, schon einige Hinweise auf die Struktur des exakten Grundzustandes. Diese Phasen müssen dann noch mit anderen Verfahren untersucht werden. Zur genauen Charakterisierung der Quartett-Phase und zur Bestimmung der Phasengrenzen werden im Abschnitt 2.2 Korrelationsfunktionen berechnet und im

Abschnitt 2.4 wird durch die exakte Diagonalisierung des Systems auf zwei Sprossen versucht, mehr über die Struktur des Grundzustandes zu erfahren. Dort zeigt sich auch, ob der Ansatz in dieser Phase zur Beschreibung des Grundzustandes überhaupt geeignet ist.

Bisher beschränkte sich die Berechnung des Grundzustandsphasendiagramms für $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ gerade auf den Bereich, in dem sich im nicht-wechselwirkenden System die Energielücke zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand öffnet (siehe Abb. 2.2.b). Bereits hier erwies sich der Ansatz als sehr gut geeignet, um die verschiedenen Phasen mit ihren Grundzuständen im kompletten Phasendiagramm approximativ zu beschreiben, so daß für den Bereich $t_{\perp} > 2t_{\parallel}$ mit einer echten Energielücke zwischen den beiden Energiebändern eine qualitative Verbesserung der bisherigen Resultate erwartet werden kann. Zu diesem Zweck wurde das Phasendiagramm des SZH-Modells mit $t_{\perp} = 4t_{\parallel}$ berechnet (siehe Abb. 2.4).

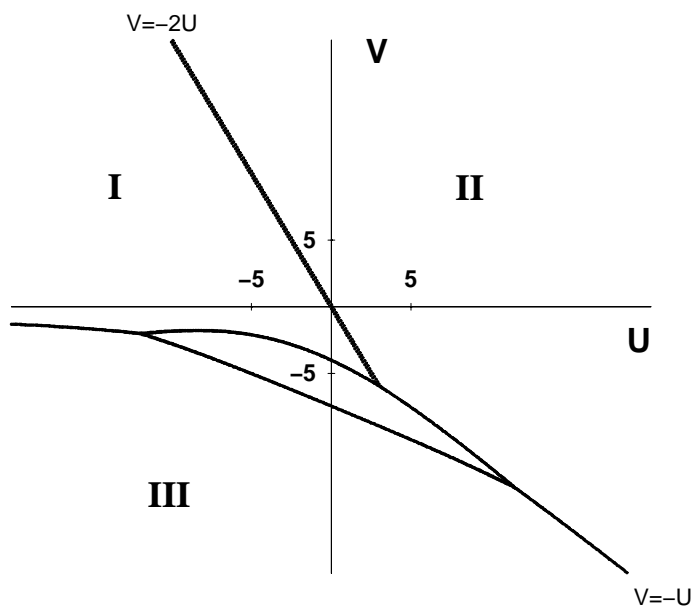


ABBILDUNG 2.4 - Das Grundzustandsphasendiagramm des SZH-Modells für $t_{\perp} = 4t_{\parallel}$ ($t_{\parallel} = 1$)

Bei diesen Werten der Kopplungen bleibt die allgemeine Struktur des Phasendiagramms erhalten. Es vergrößert sich nur die Quartett-Phase und einige Phasengrenzen verschieben sich etwas. Die Skalierung der Quartett-Phase mit t_{\perp} (ihre Vergrößerung mit wachsender Hüpfamplitude!) legt dabei die Vermutung nahe, daß es sich hierbei um eine metallische Phase mit itinerantem Verhalten der Elektronen handelt. Das würde auch die stets große Standardabweichung in diesem Bereich des Phasendiagramms erklären, da der Ansatz (1.39) dann zur Beschreibung des Grundzustandes nicht geeignet ist.

Im restlichen Phasendiagramm hingegen zeigt sich wie erwartet, daß die Standardabweichung für die Variationswellenfunktion, besonders bei mittleren Kopplungen, kleiner wird verglichen mit dem Fall $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$, so daß der Ansatz eine sehr gute Approximation an einen exakten Eigenzustand des Systems repräsentiert. Diese Tendenz setzt sich mit steigenden Werten von t_{\perp} und somit mit einer Vergrößerung der Energielücke fort. Sie liefert aber im wesentlichen keine neuen Erkenntnisse, so daß hier auf eine weitere Untersuchung verzichtet werden kann.

Zur näheren Bestimmung der Phasengrenzen und der physikalischen Struktur innerhalb der Phasen werden nun im nächsten Abschnitt die statischen Grundzustandskorrelationen im SZH-Modell bei $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ untersucht.

2.2 Korrelationen des SZH-Modells im Grundzustand

Die Physik im Grundzustand eines Modells wird durch die Grundzustandskorrelationsfunktionen bestimmt, deren Berechnung sehr wichtig ist, um die theoretischen Vorhersagen mit experimentellen Resultaten vergleichen zu können. Zur weiteren Untersuchung des SZH-Modells und zur genauen Charakterisierung der Phasen in Abbildung 2.3 werden daher im folgenden alle möglichen statischen Korrelationen im Grundzustand bestimmt. Im Fall von endlich korrelierten Wellenfunktionen wie (1.39) können diese Korrelationsfunktionen sehr einfach unter Verwendung einer Transfermatrix-Methode berechnet werden (siehe Anhang B.2).

Die Wellenfunktion (1.39) mit den sechs freien Parametern p_i repräsentiert den Grundzustand für eine große Klasse von Modellen⁵. Im thermodynamischen Limes ($L \rightarrow \infty$) können nun für diese Systeme verschiedenste Korrelationsfunktionen bestimmt werden (eine detaillierte Liste ist im Anhang B.2 gegeben). Diese Korrelationen sind aufgrund der allgemeinen Struktur von Matrixproduktzuständen stets kurzreichweitig, d.h. sie zerfallen exponentiell bzw. verschwinden. Als Beispiel dient hier die Zweipunktfunktion, die die Korrelation zweier Größen $O(r)$ und $O(0)$ an unterschiedlichen Orten beschreibt. Sie besitzt die folgende Form

$$\langle O^\dagger(r)O(0) \rangle = A(\{p_i\}) e^{-\frac{r}{\xi}}, \quad (2.7)$$

bei der die Amplitude $A(\{p_i\})$ und die Korrelationslänge $\xi(\{p_i\})$ von den Parametern p_i der Wellenfunktion abhängen. Bereits die Erwartungswerte eines Operators an einem Platz x , die Einpunktfunktionen, sind teilweise von den Variationsparametern p_i abhängig, sofern sie nicht sogar identisch verschwinden.

Für das SZH-Modell mit $t_\perp = 2t_\parallel$ können nun die verschiedenen Korrelationen im Grundzustand in den einzelnen Phasen in der $U - V$ -Ebene (siehe Abb. 2.3) berechnet werden. Dabei werden die Werte der Parameter p_i im Ansatz (1.39) durch die Minimierung der Energie festgelegt. Es zeigt sich, daß einige der Erwartungswerte von Operatoren, die nur auf einer Sprosse wirken, verschwinden. Beispiele dafür sind der Erwartungswert des Gesamtspins auf einer Sprosse $\langle \vec{S}(x) \rangle = 0$ oder der Erwartungswert des Ordnungsparameters⁶ der $SO(5)$ nach der Definition von Zhang [3] $\langle n_a(x) \rangle \equiv 0$ ($a = 1, \dots, 5$). Andere Einpunktfunktionen wie die mittlere Teilchenzahl auf einer Sprosse $\langle n(x) \rangle = 2$ (entspricht wie erwartet Halbfüllung) liefern parameterunabhängige Werte. Diese Korrelationen, die direkt von den Variablen p_i abhängig sind wie beispielsweise die elektronischen Erwartungswerte $\langle c_g^\dagger(x)c_g(x) \rangle$, sind im Anhang B.2.1 angegeben.

Weitaus interessanter als die lokalen Erwartungswerte sind die Zweipunktfunktionen, da sie etwas über die physikalische Ordnung in dem System aussagen können. Sie besitzen die allgemeine Struktur (2.7) und werden durch die Korrelationslängen sowie den zugehörigen Amplituden vollständig charakterisiert. Im folgenden werden einige ausgewählte Zweipunktfunktionen für das SZH-Modell bestimmt, wobei die Korrelationslängen und die Amplituden jeweils auf Kreisen in der $U - V$ -Ebene berechnet werden (mit Radius $R = \sqrt{U^2 + V^2} = 3$), die die einzelnen Phasen I, II und die Quartett-Phase im Phasendiagramm in Abbildung 2.3 schneiden. Damit ist es möglich, die im Vergleich zum Phasendiagramm bei starker Kopplung neu auftretende Quartett-Phase genauer zu untersuchen. Das Verhalten der Korrelationen im Bereich starker

⁵Siehe Abschnitt 3.2 für die allgemeine Struktur dieser Modelle.

⁶Für die genaue Definition dieses Operators $n_a(x)$ siehe Gleichung (1.9).

und schwacher Kopplung (entspricht $R \gg 1$ bzw. $R \ll 1$), insbesondere in der Superspinphase *III*, wird im Anschluß diskutiert.

Für einige dieser Erwartungswerte im SZH-Modell können nun relativ einfache Ausdrücke angegeben werden, wie z.B. für die Korrelationen mit dem Ordnungsparameter n_a der $SO(5)$ an unterschiedlichen Sprossen. Sie lauten

$$\langle n_a(r)n_b(0) \rangle = \delta_{ab} \frac{2(b_1 p_4 p_5 - 2p_1 p_6)^2}{w(h_1 + w)} \left(\frac{2(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 - 3p_6^2)}{h_1 + w} \right)^{r-2}, \quad a, b = 1, \dots, 5 \quad (2.8)$$

mit den bereits bekannten Größen $h_1 = 5p_6^2 + p_1^2 + p_2^2 + p_3^2$, $h_2 = p_4^2 + p_5^2$, $w = \sqrt{h_1^2 + 16h_2^2}$ und dem aus der Normierung stammenden Wert $b_1 = (w - h_1)/(2h_2)$. Des weiteren können auch andere Erwartungswerte wie die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \vec{S}_{c,d}(r)\vec{S}_{c,d}(0) \rangle$ (siehe Abbildung 2.5) oder die Elektron-Elektron-Korrelationen $\langle c_\alpha^\dagger(r)c_\beta(0) \rangle$, $\alpha, \beta \in \{g, u\}$ (siehe Abbildung 2.6) berechnet werden. Sie werden aber aufgrund ihrer komplizierten Struktur nur graphisch angegeben.

Die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \vec{S}_{c,d}(r)\vec{S}_{c,d}(0) \rangle$ in Abbildung 2.5 besitzen nur im Bereich der Quartett-Phase eine nicht verschwindende Amplitude. Dort tritt ein kleiner Unterschied in der Stärke zwischen den Spin-Korrelationen auf dem gleichen Holm der Leiter und den Spin-Korrelationen zwischen unterschiedlichen Holmen auf. Weiterhin ist in diesem Bereich des Phasendiagramms die Korrelationslänge sehr klein: Ein Indiz für sehr starke Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen und gegen eine langreichweitige Ordnung. Die ausgeprägte Spitze bei $\phi \sim \frac{5}{8}\pi$ könnte trotz der dort verschwindenden Amplitude ein möglicher Hinweis auf einen Phasenübergang zwischen den Phasen *I* und *II* sein, wo die Korrelationslänge divergiert (entspricht der Linie $V = -2U$ im Phasendiagramm in Abb. 2.3).

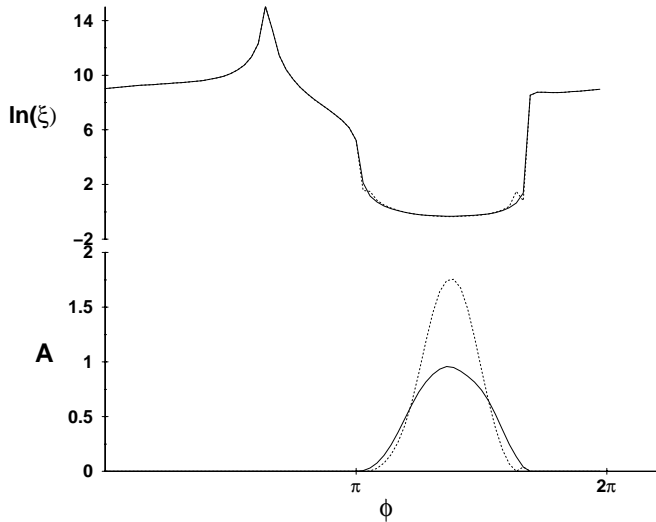


ABBILDUNG 2.5 - Korrelationslänge und Amplitude der Spin-Spin-Korrelationsfunktion auf einem Kreis mit Radius $R = 3$ in der $U - V$ -Ebene bei $t_\perp = 2t_\parallel$ und $t_\parallel = 1$, die gestrichelte Linie gehört zu $\langle \vec{S}_{c(d)}(r)\vec{S}_{c(d)}(0) \rangle$ und die durchgezogene zu $\langle \vec{S}_{c(d)}(r)\vec{S}_{d(c)}(0) \rangle$.

Dieses unterschiedliche Verhalten der Korrelationsfunktion in den einzelnen Phasen ist ein weiterer Hinweis darauf, daß sich die Quartett-Phase nicht nur durch etwas andere Werte der Variationsparameter von den aus dem Phasendiagramm bei starker Kopplung bekannten physikalischen Phasen *I* und *II* unterscheidet, sondern daß hier eine neue, physikalische Phase mit anderen Eigenschaften vorliegt.

Einige weitere, interessante Korrelationsfunktionen sind die Elektron-Elektron-Korrelationen in Abbildung 2.6, die zwischen geraden und ungeraden Größen $c_{g,u}(x) = (c_\uparrow(x) + c_\downarrow(x)) \pm$

$(d_{\uparrow}(x) + d_{\downarrow}(x))$ berechnet werden. Diese Zweipunktfunktionen unterscheiden sich allerdings nur durch die absoluten Werte ihrer Amplituden A , die Korrelationslänge ξ ist unabhängig von der betrachteten Linearkombination. Sie ist für alle Winkel ϕ klein, mit einem Extremum im Bereich der Quartett-Phase. Die Amplituden hingegen können sehr große Werte annehmen. Dabei ist die Änderung der Korrelationslänge $\xi(\phi)$ und der zugehörigen Amplitude gerade im Bereich des Phasenübergangs in die Quartett-Phase bei $\phi \sim \pi$ bzw. $\phi \sim 7/4\pi$ maximal. In dieser Phase besitzen auch die Amplituden und die Korrelationslänge im Vergleich mit den anderen Phasen des Phasendiagramms eine andere Form. Dies ist ein weiterer Hinweis auf die neue, physikalische Struktur der Quartett-Phase.

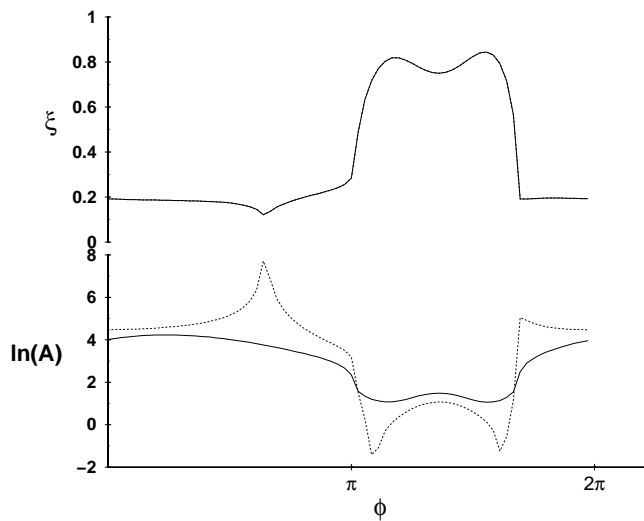


ABBILDUNG 2.6 - Die Korrelationslänge und Amplitude des Erwartungswertes $\langle c_{g,u}^{\dagger}(r)c_{g,u}(0) \rangle$ auf einem Kreis mit Radius $R = 3$ in der $U - V$ -Ebene bei $t_{\perp} = 2t_{\parallel}, t_{\parallel} = 1$, die gestrichelte Linie gehört zu $\langle c_{g(u)}^{\dagger}(r)c_{g(u)}(0) \rangle$ und die durchgezogene zu $\langle c_{g(u)}^{\dagger}(r)c_{u(g)}(0) \rangle$.

Die Korrelationsfunktion (2.8), die eine mögliche Ordnung bezüglich der $SO(5)$ beschreibt, weist ebenfalls ein leicht unterschiedliches Verhalten in den einzelnen Phasen auf (siehe Abbildung 2.7), auch wenn es nicht so ausgeprägt ist.

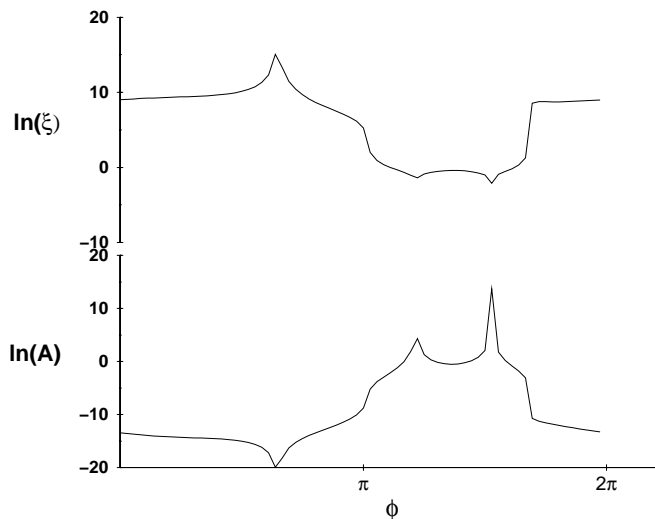


ABBILDUNG 2.7 - Amplitude und Korrelationslänge der Korrelationsfunktion $\langle n_a(r)n_a(0) \rangle$ auf dem Kreis mit $R = 3$ in der $U - V$ -Ebene bei $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ und $t_{\parallel} = 1$.

In der Korrelationslänge zeigt sich wieder eine ausgeprägte Spitze bei $\phi \sim \frac{5}{8}\pi$ bei verschwindender Amplitude, analog zum Verhalten von ξ bei der Spin-Spin-Korrelation. Im Bereich der Quartett-Phase ändert sich die Korrelationslänge ξ ebenfalls wieder, verglichen mit den Phasen

I und *II*.

Insgesamt zeigt sich bei der Berechnung einiger statischen Korrelationsfunktionen in diesem Bereich des Phasendiagramms, daß die neue Quartett-Phase eine andere physikalische Struktur besitzt als die anderen Phasen (starke Nächste-Nachbar-Korrelationen) und daß die vorher relativ willkürlich festgelegten Phasengrenzen physikalischer Natur sind⁷.

Die hier berechneten Korrelationsfunktionen lassen sich im Limes starker Kopplung im SZH-Modell untersuchen, wobei hier statt der Quartett-Phase jetzt die Superspinphase *III* auftritt. Die Spin-Spin-Korrelationen besitzen dabei nur in dieser Superspin-Phase eine nicht verschwindende Amplitude, bei allerdings sehr kleinen Werten der Korrelationslänge ξ (wieder ein Zeichen starker Nächste-Nachbar-Wechselwirkung). Die Elektron-Elektron-Korrelationen treten hingegen auch in den anderen Phasen auf, ebenfalls mit kleinen Korrelationslängen (die Werte von ξ liegen dabei im Bereich $0.12 - 0.25$).

Analog zur Bestimmung der Korrelationen bei starker Kopplung können nun auch die Korrelationsfunktionen in den beiden Phasen *I* und *II* im schwach koppelnden System berechnet werden ($U, V \ll t_{\perp}, t_{\parallel}$ im Phasendiagramm in Abbildung 2.3). Hier treten bei den Spin-Spin-Korrelationen extrem große Korrelationslängen bei sehr kleinen Amplituden auf (mit ausgeprägten Spitzen an den beiden Grenzlinien), während die reinen Elektron-Elektron-Korrelationen große Amplituden bei kleinen Werten von ξ besitzen.

Die bisher betrachteten statischen Korrelationsfunktionen konnten einen sehr guten Einblick in die physikalische Struktur des SZH-Modells in den einzelnen Phasen geben, wobei insbesondere die neue Quartett-Phase mit ihren teilweise starken Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen auffiel. Leider läßt sich dabei die exakte Lage der Phasengrenzen nicht genauer bestimmen, so daß weiterhin die Änderung der Variationsparameter als Anhaltspunkt für einen Phasenübergang verwendet werden muß. Für eine genauere Bestimmung der Struktur in den einzelnen Phasen müssen die niedrigliegenden Anregungen über dem Grundzustand und eventuell dynamische Korrelationen berechnet werden. Die Bestimmung von angeregten Zuständen wird aber der Gegenstand der Untersuchungen in Abschnitt 2.6 sein, so daß hier auf eine weitere Diskussion verzichtet wird.

Im folgenden wird das Auftreten einer möglichen, versteckten Ordnung im Matrixproduktansatz (1.39) betrachtet, die ebenfalls weitere Hinweise auf die physikalische Natur in den einzelnen Phasen liefern kann.

2.2.1 Versteckte Ordnung

Eine besondere Eigenschaft der endlich korrelierten Zustände ist das Auftreten einer „string order“, einer versteckten langreichweitigen Ordnung in der Wellenfunktion (auch „hidden order“ genannt), die bei geeigneter Definition eines Ordnungsparameters auftritt. Diese versteckte Ordnung wurde zuerst von den Nijs und Rommelse [50] im Rahmen von Untersuchungen von VBS-Modellen („valence bond solid“) eingeführt. Sie bewiesen, daß die Grundzustände der VBS-Modelle eine String-Ordnung besitzen. Daraufhin wurden die Untersuchungen dieser neuen versteckten Ordnung auf Spinketten mit $S = 1$ ausgedehnt (siehe z.B. [51, 52, 53]), bei

⁷Die Phasengrenzen wurden durch die Eigenwerte der Projektionsoperatoren auf die lokalen Multipletts festgelegt, siehe Abschnitt 2.1.

denen der Ordnungsparameter folgendermaßen definiert wird

$$O_{\text{string}}^\alpha := \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} \left\langle S_i^\alpha \prod_{k=i+1}^{j-1} \exp(i\pi S_k^\alpha) S_j^\alpha \right\rangle, \quad \alpha = x, y, z. \quad (2.9)$$

Die Bestimmung der String-Ordnung wurde auch für die allgemeinen VBS-Modelle mit Spin S von Totsuka und Suzuki [54] mit einer entsprechenden Modifikation der Definition von (2.9) durchgeführt. Diese Ordnungsparameter sind aber nicht nur erfolgreich für Spinketten definiert worden, sondern auch für Leitersysteme, wobei der Spinoperator S_i^α am Platz i durch den Spinoperator $S_i^\alpha = S_{c,i}^\alpha + S_{d,i}^\alpha$ auf einer Sprosse ersetzt wird (siehe [55] für eine zweibeinige Spinleiter).

In diesem Abschnitt wird nun versucht, einen Ordnungsparameter für den Variationsansatz (1.39) zu finden, um damit vielleicht eine langreichweitige Ordnung in einigen Phasen des SZH-Modells nachzuweisen. Dabei liefert die Verwendung der Definition des Ordnungsparameters O_{string}^α der zweibeinigen Spinleitersysteme keine brauchbaren Resultate für den Ansatz (1.39): Er verschwindet überall. Zur Definition eines geeigneten Ordnungsparameters muß sicherlich die $SO(5)$ -Symmetrie berücksichtigt werden, so daß es sich anbietet, statt des Operators S^α in (2.9) den Operator n^a zu verwenden (siehe Gleichung (1.9)). Der entsprechende Ordnungsparameter lautet nun

$$O_{\text{string}}^a := \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} \left\langle n_i^a \prod_{k=i+1}^{j-1} \exp(i\pi n_k^a) n_j^a \right\rangle, \quad a = 1, \dots, 5. \quad (2.10)$$

Er läßt sich analog zu den anderen Korrelationen wieder durch eine Transfermatrixmethode berechnen (siehe Anhang B.2). Im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$, wo der größte Eigenwert dominiert, ergibt sich dann näherungsweise

$$O_{\text{string}}^a \sim \frac{1}{\mu^a \lambda} \left((\vec{e}_\lambda)^t Z(n^a) \vec{e}_{\mu^a} \right)^2 \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} \left(\frac{\mu^a}{\lambda} \right)^{|i-j|}. \quad (2.11)$$

Hier ist $Z(n^a)$ die zum Operator n^a gehörende Transfermatrix und μ^a und λ sind die größten Eigenwerte der Transfermatrizen $Z(\exp(i\pi n^a))$ bzw. $G = Z(1)$ mit den Eigenvektoren \vec{e}_{μ^a} und \vec{e}_λ . Damit der Ordnungsparameter nun nicht identisch verschwindet bzw. divergiert, muß offensichtlich $\lambda = \mu^a$ gelten. Dabei lassen sich die Eigenwerte μ^a nur numerisch berechnen, so daß auch das Verhältnis μ^a/λ nur im Rahmen der Rechengenauigkeit bestimmt werden kann. Zur Untersuchung der Phasen des SZH-Modells werden die Ordnungsparameter O_{string}^a analog zu den statischen Korrelationsfunktionen auf Kreisen in der $U - V$ -Ebene mit Radius R um den Ursprung berechnet, wobei zunächst nur die Verhältnisse der Eigenwerte μ^a und λ betrachtet werden. In der Abbildung 2.8 ist z.B. das Verhältnis μ^1/λ für den Ordnungsparameter mit $a = 1$ angegeben, berechnet bei starker Kopplung ($R \sim 100$). Die vier anderen Eigenwerte μ^a ($a = 2, \dots, 5$) weisen eine fast identische Abhängigkeit vom Winkel ϕ auf (es gilt $\mu := \mu^1 \sim \mu^a$), so daß es im folgenden ausreicht, sich bei der Untersuchung auf den Eigenwert $\mu = \mu^1$ der Transfermatrix $Z(\exp(i\pi n^1))$ zu beschränken.

Die bekannten Phasengrenzen bei starker Kopplung sind in der Abbildung 2.8 sehr deutlich erkennbar⁸, und die Phasen selbst unterscheiden sich durch drei verschiedene Werte des Eigen-

⁸Zum Vergleich siehe das Phasendiagramm in Abbildung 1.2 bei starker Kopplung; die Winkel 115° , 180° und 315° entsprechen dabei genau den Phasengrenzen $V = -2U, V = 0$ (bei $U < 0$) und $V = -U$ (bei $U > 0$).

wertes μ . In der Phase II ist $\mu \sim 0$ (im Winkelbereich $0 \leq \phi \leq 115^\circ$ und $315^\circ \leq \phi \leq 360^\circ$), in der Ising-Phase $\mu \sim \lambda$ ($115^\circ \leq \phi \leq 180^\circ$) und in der Superspinphase III $\mu \sim \frac{3}{5}\lambda$. Zur Unterscheidung der drei Phasen wäre somit der Ordnungsparameter

$$O_{\text{phase}}^a(|i-j|) := \left\langle \prod_{k=i}^j \exp(i\pi n_k^a) \right\rangle = \left(\frac{\mu^a}{\lambda} \right)^{|i-j|+1} \quad a = 1, \dots, 5, \quad (2.12)$$

sehr gut geeignet, da er nur vom Verhältnis der beiden Eigenwerte μ^a und λ abhängt.

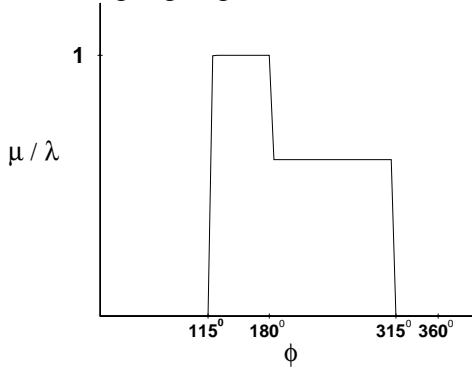


ABBILDUNG 2.8 - Das Verhältnis der Eigenwerte μ^a und λ für $a = 1$ ($\mu \equiv \mu^1$), berechnet auf einem Kreis in der $U - V$ -Ebene bei starker Kopplung.

Aus der Abbildung 2.8 ergibt sich weiterhin, daß höchstens im Bereich der Ising-Phase I überhaupt eine langreichweitige String-Ordnung mit nicht verschwindenden Ordnungsparametern nach (2.11) möglich ist. Die Berechnung von $(\vec{e}_\lambda^t Z(n^a) \vec{e}_{\mu^a})$ in dieser Phase zeigt, daß dort $O_{\text{string}}^a \equiv 0$ gilt und somit insgesamt bei starker Kopplung keine String-Ordnung auftritt. Im Fall schwacher und mittlerer Kopplungen sind in allen Phasen bereits die Eigenwerte μ^a kleiner als λ , so daß auch dort keine langreichweitige Ordnung bezüglich des Ordnungsparameters (2.11) vorhanden ist.

Obwohl es nun sicherlich im Ansatz (1.39) aufgrund seiner Struktur eine versteckte Ordnung geben muß, ist es dennoch sehr schwierig, einen geeigneten Ordnungsparameter zu definieren, der diese widerspiegelt.

2.3 $SO(5)$ -symmetrische Erweiterungen

Das SZH-Modell ist nur eines von sehr vielen elektronischen Leitersystemen mit einer $SO(5)$ -Symmetrie. Es lassen sich, wie bereits im ersten Kapitel gezeigt wurde, eine Vielzahl von invarianten Kopplungen auf einer Sprosse und zwischen benachbarten Sprossen definieren, die geeignet sind, eventuell Materialien mit einer elektronischen Leiterstruktur zu beschreiben. Diese zusätzlichen Wechselwirkungen werden nun der Gegenstand der Untersuchungen in diesem Abschnitt sein, wobei das SZH-Modell mit einigen dieser Kopplungen erweitert wird und die entsprechenden Grundzustandsphasendiagramme und Korrelationen bei $t_\perp = 2t_\parallel$ ($t_\parallel = 1$) unter Verwendung des Variationsansatzes (1.39) berechnet werden.

Zunächst wird im folgenden Abschnitt 2.3.1 die Erweiterung des SZH-Modells mit einigen physikalisch interessanten $SO(5)$ -invarianten Kopplungen auf einer Sprosse behandelt, bevor im Abschnitt 2.3.2 zusätzliche Kopplungen zwischen zwei benachbarten Sprossen betrachtet werden.

2.3.1 Kopplungen auf einer Sprosse

Sämtliche Wechselwirkungen auf einer Sprosse können durch die Verwendung der Projektionsoperatoren aus Abschnitt 1.1 konstruiert werden, und eine detaillierte Liste aller möglichen Terme ist im Anhang A.3.1 zusammengestellt worden. Werden nun unter Verwendung des Ansatzes (1.39) die Beiträge zur Variationsenergie jedes einzelnen dieser Terme berechnet, so ergibt sich für den Erwartungswert der Projektionsoperatoren $\hat{P}_{(0,0)}^{k,l}$ auf die verschiedenen Singulett-Zustände

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}_{(0,0)}^{1,1} \rangle &= \frac{p_1^2}{w}, & \langle \hat{P}_{(0,0)}^{2,2} \rangle &= \frac{1}{2w}(p_2 + p_3)^2, & \langle \hat{P}_{(0,0)}^{3,3} \rangle &= \frac{1}{2w}(p_2 - p_3)^2, \\ \langle \hat{P}_{(0,0)}^{1,2} + \hat{P}_{(0,0)}^{2,1} \rangle &= \frac{\sqrt{2}}{w}p_1(p_3 + p_2), & \langle \hat{P}_{(0,0)}^{1,3} + \hat{P}_{(0,0)}^{3,1} \rangle &= \frac{\sqrt{2}}{w}p_1(p_3 - p_2), & (2.13) \\ \langle \hat{P}_{(0,0)}^{2,3} + \hat{P}_{(0,0)}^{3,2} \rangle &= \frac{1}{w}(p_3^2 - p_2^2). \end{aligned}$$

Die Variationsenergien der entsprechenden Operatoren der Quartett-Zustände $\hat{P}_{(4,\mu)}^{k,l}$ sind

$$\begin{aligned} \sum_{\mu=1}^4 \langle \hat{P}_{(4,\mu)}^{1,1} \rangle &= \frac{w - h_1}{2wh_2}(p_4 - p_5)^2, & \sum_{\mu=1}^4 \langle \hat{P}_{(4,\mu)}^{2,2} \rangle &= \frac{w - h_1}{2wh_2}(p_4 + p_5)^2, \\ \sum_{\mu=1}^4 \langle \hat{P}_{(4,\mu)}^{1,2} + \hat{P}_{(4,\mu)}^{2,1} \rangle &= \frac{w - h_1}{wh_2}(p_4^2 - p_5^2), & (2.14) \end{aligned}$$

und die Energie des Projektionsoperators auf das Quintett ist

$$\sum_{\mu} \langle \hat{P}_{(5,\mu)}^{0,0} \rangle = \frac{5p_6^2}{w} \quad (2.15)$$

mit den bekannten Größen h_1 , h_2 und w .

Das SZH-Modell kann nun mit beliebigen, $SO(5)$ -symmetrischen Kopplungen auf einer Sprosse erweitert werden, die sich auch aus Linearkombinationen der Projektionsoperatoren zusammensetzen können. Dabei müssen bei der approximativen Bestimmung der Grundzustandsenergie entsprechend die Anteile der Zusatzterme (2.13)–(2.15) an der Variationsenergie berücksichtigt werden. Diese möglichen Erweiterungen des SZH-Modells führen dann zu Modifikationen im Grundzustandsphasendiagramm in Abbildung 2.3: Z.B. verursachen die Terme $\langle \hat{P}_{(0,0)}^{1,1} \rangle$ und $\sum_{\mu} \langle \hat{P}_{(5,\mu)}^{0,0} \rangle$ eine Verschiebung der Phasengrenzen, ohne allerdings die allgemeine Struktur zu ändern (für die explizite Form der Operatoren siehe Gleichung (1.13) und (A.22)).

In den folgenden beiden Abschnitten werden nun zwei zusätzliche Wechselwirkungen und ihre Auswirkungen auf das Phasendiagramm explizit untersucht.

2.3.1.1 Paarhüpfen auf einer Sprosse

Ein interessanter $SO(5)$ -symmetrischer Zusatzterm ist das Hüpfen von Elektronenpaaren von einem Holm zum anderen auf einer Sprosse. Der Beitrag dieses Terms zur Variationsenergie des SZH-Modells (2.1)–(2.3) ist

$$t_{\text{pair}} \langle \hat{P}_{0,0}^{2,3} + \hat{P}_{0,0}^{3,2} \rangle = t_{\text{pair}} \langle d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} c_{\uparrow} c_{\downarrow} + H.c. \rangle = \frac{t_{\text{pair}}}{w} (p_3^2 - p_2^2). \quad (2.16)$$

Je nach Wahl des Vorzeichens der Kopplungskonstanten t_{pair} wird dieses Paarhüpfen der Elektronen energetisch bevorzugt bzw. unterdrückt, und das unter Verwendung des Variationsansatzes berechnete Phasendiagramm des erweiterten Modells verändert sich dementsprechend. Im folgenden sind die Phasendiagramme und zugehörige Korrelationen für einige Werte der Kopplungskonstanten t_{pair} berechnet worden.

Für die Kopplung $t_{\text{pair}} < 0$ mit $|t_{\text{pair}}| \leq t_{\parallel}$ spaltet sich im Phasendiagramm in Abbildung 2.3 die ungeordnete Ising-Phase I mit der Amplitude p_2 in zwei Singulett-Phasen auf: eine symmetrische Phase $I(p_2)$ wie bisher und eine neue antisymmetrische Phase $I(p_3)$ (siehe z.B. Abbildung 2.9.a mit der Kopplung $t_{\text{pair}} = -1$). Die Phasengrenzen zwischen den benachbarten, anderen Phasen ändern sich dabei nur leicht. Wird nun die Kopplungsstärke $|t_{\text{pair}}|$ kontinuierlich erhöht, so verschiebt sich die Übergangslinie zwischen den Phasen $I(p_2)$ und $I(p_3)$ immer weiter in Richtung der Phase II . Schließlich ist bei $t_{\text{pair}} = -4$ die symmetrische Phase $I(p_2)$ vollständig verschwunden (siehe Abb. 2.9.b), allerdings treten die Zustände mit der Amplitude p_2 noch auf der Phasengrenze auf (dort ist $p_2 \sim p_1$). Mit der stetigen Erhöhung der Kopplungsstärke verschieben sich auch die anderen Phasengrenzen und die Struktur der Quartett-Phase verändert sich stark (siehe Abb. 2.9.b für das Phasendiagramm mit $t_{\text{pair}} = -4$).

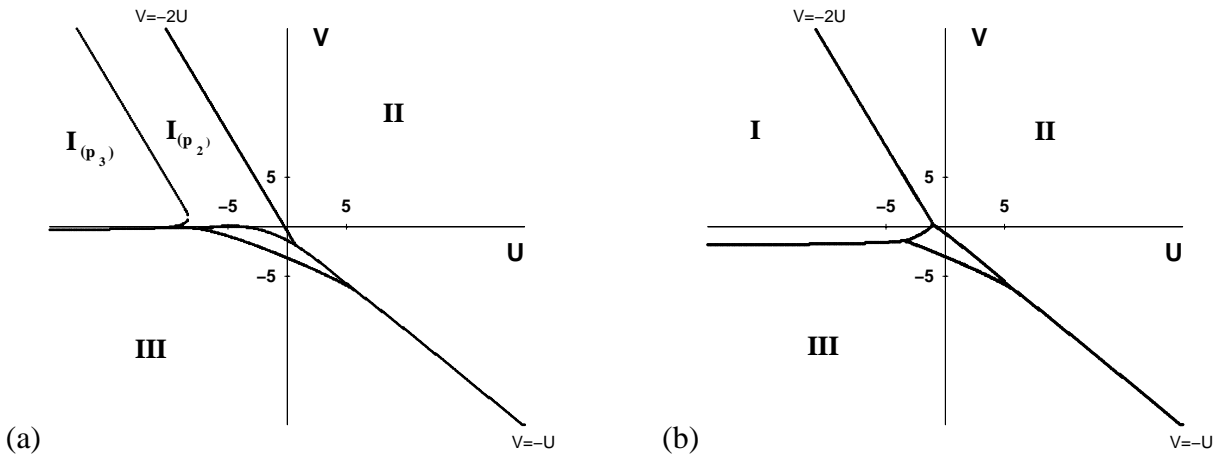


ABBILDUNG 2.9: Phasendiagramme des SZH-Modells mit Paarhüpfen auf einer Sprosse mit der Amplitude (a) $t_{\text{pair}} = -1$ und (b) $t_{\text{pair}} = -4$ bei $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$, $t_{\parallel} = 1$.

Die Standardabweichung ist in den beiden betrachteten Phasendiagrammen in Abbildung 2.9 außerhalb der Quartett-Phase klein, so daß der Variationsansatz dort sehr gute Resultate liefert. Im Bereich der Quartett-Phase werden allerdings die Werte der Varianz sehr groß und die Variationswellenfunktion ist dort folglich keine gute Näherung mehr an einen exakten Eigenzustand des Systems. Das ist aber aufgrund des metallischen Charakters der Quartett-Phase verständlich.

Analog zum Abschnitt 2.2 lassen sich auch sämtliche Grundzustandskorrelationsfunktionen berechnen, um die Phasen genauer zu charakterisieren. Die Korrelationen werden wieder auf Kreisen in der $U - V$ -Ebene mit Radius $R = \sqrt{U^2 + V^2}$ berechnet, wobei im folgenden hauptsächlich die Phasen bei mittlerer Stärke der Kopplungskonstanten betrachtet werden (entspricht $R = 3$). Für die Kopplung $t_{\text{pair}} = -4$ ergibt sich beispielsweise, daß sich bei der Zweipunktfunktion $\langle n_a(r)n_a(0) \rangle$ des Ordnungsparameters der $SO(5)$ die Korrelationslänge deutlich beim Übergang von einer Phase in eine andere ändert (siehe Abb. 2.10). Weiterhin ist in der

Quartett-Phase die Korrelationslänge bei nicht verschwindender Amplitude sehr klein, ein Hinweis auf starke Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen. In den anderen Phasen ist die Amplitude fast identisch Null, so daß die Korrelationsfunktion dort verschwindet. Die Berechnung der anderen Korrelationsfunktionen führt zu ähnlichen Resultaten, auch in den Bereichen starker und schwacher Kopplung im Phasendiagramm in Abbildung 2.9.

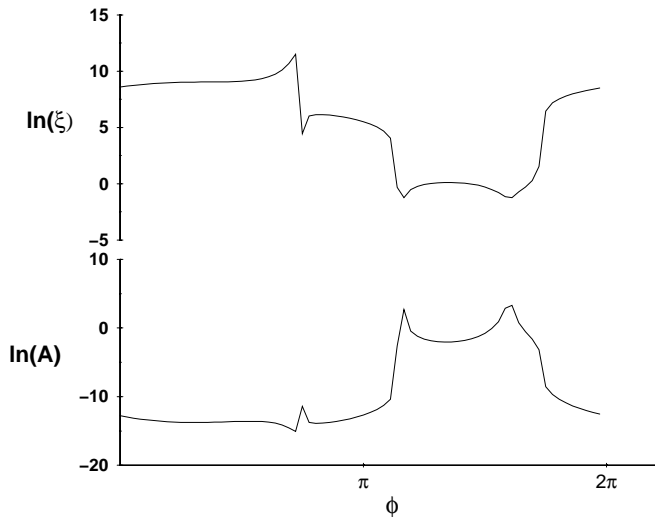


ABBILDUNG 2.10 - Amplitude und Korrelationslänge der Korrelationsfunktion $\langle n_a(r)n_a(0) \rangle$ bei Radius $R = 3$ in der $U - V$ -Ebene für $t_{\text{pair}} = -4$, ($t_{\perp} = 2t_{\parallel}, t_{\parallel} = 1$).

Bisher wurden nur negative Werte der Kopplungskonstanten t_{pair} betrachtet, so daß das Hüpfen von Elektronenpaaren energetisch begünstigt wurde. Für die im folgenden betrachteten positiven Kopplungen wird das Paarhüpfen je nach Stärke der Kopplung mehr oder weniger unterdrückt. Dabei wird das Grundzustandsphasendiagramm entsprechend modifiziert.

Für kleine, positive Kopplungen $t_{\text{pair}} > 0$ tritt keine antisymmetrische Phase auf: Die allgemeine Struktur des Phasendiagramms in Abbildung 2.3 mit den vier bekannten Phasen bleibt erhalten. Bei kontinuierlicher Vergrößerung der Hüpfamplitude $t_{\text{pair}} \gg t_{\parallel}$ wird die Quartett-Phase allerdings immer kleiner (siehe Abb. 2.11 für $t_{\text{pair}} = +4$), bis sie schließlich ganz verschwindet. Die ungeordnete Ising-Phase I hingegen wird größer und erstreckt sich über den Ursprung hinaus.

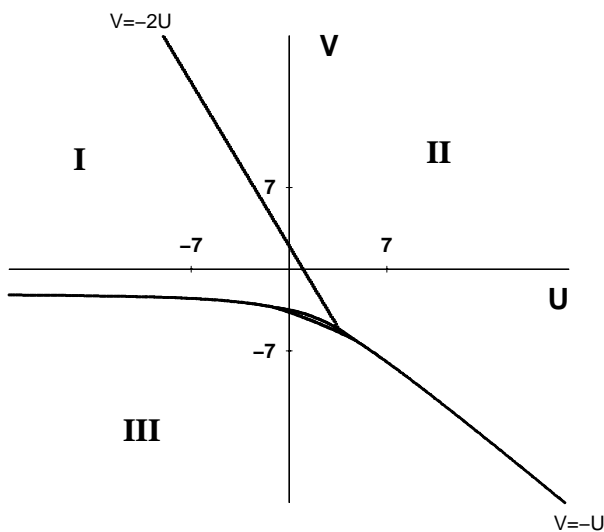


ABBILDUNG 2.11 - Das Grundzustandsphasendiagramm des SZH-Modells mit Paarhüpfterm auf einer Sprosse für $t_{\text{pair}} = +4$, ($t_{\perp} = 2t_{\parallel}, t_{\parallel} = 1$).

Im Phasendiagramm in Abbildung 2.11 ist die Standardabweichung im Bereich starker und

schwacher Kopplung sehr klein, so daß der Variationsansatz dort sehr gute Resultate liefert. Bei mittleren Kopplungsstärken ist der Ansatz nur für den Winkelbereich $0 \leq \phi \leq \pi$ und $3\pi/2 \leq \phi \leq 2\pi$ geeignet, da außerhalb die Varianz und somit die Abweichung von einem exakten Eigenzustand zu groß wird, um verlässliche Aussagen machen zu können⁹.

Bei der Berechnung der verschiedenen Korrelationsfunktionen in den Phasen in Abbildung 2.11 zeigt sich sehr deutlich die Verkleinerung der Quartett-Phase bei mittlerer Kopplungsstärke ($R = 3$). Ein sehr gutes Beispiel dafür ist die Korrelationsfunktion $\langle n_a(r)n_a(0) \rangle$ (siehe Abbildung 2.12): Hier ist die Quartett-Phase durch ein parabelförmiges Minimum in der Korrelationslänge gekennzeichnet (starke Nächste-Nachbar-Wechselwirkung). Außerdem lassen sich auch die beiden Phasenübergänge bei $\phi \sim 5\pi/8$ und $\phi \sim 5\pi/3$ durch ausgeprägte Spitzen in der Korrelationslänge nachweisen.

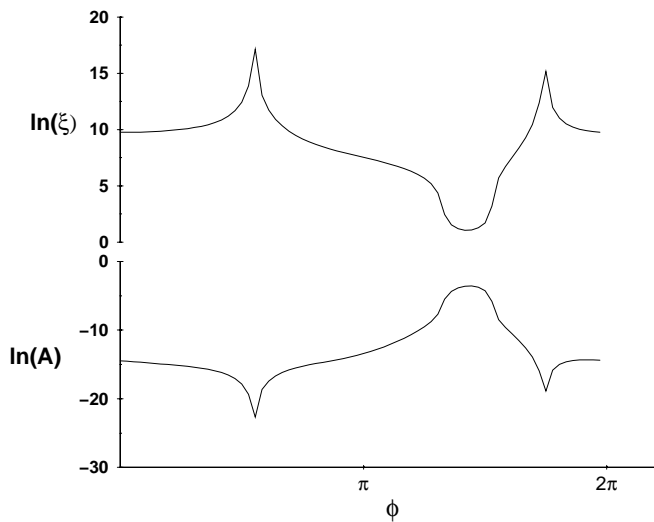


ABBILDUNG 2.12 - Amplitude und Korrelationslänge der Korrelationsfunktion $\langle n_a(r)n_a(0) \rangle$ bei Radius $R = 3$ in der $U - V$ -Ebene für $t_{\text{pair}} = +4$, ($t_{\perp} = 2t_{\parallel}, t_{\parallel} = 1$).

Die Berechnung der anderen Korrelationen liefert keine neuen Resultate, so daß hier auf eine Diskussion verzichtet wird.

Insgesamt ergibt sich, daß sich der Variationsansatz auch zur Untersuchung des SZH-Modells mit einem zusätzlichen Paarhüpfterm auf einer Sprosse sehr gut eignet. Durch die Erweiterung des Modells treten dabei signifikante Änderungen in den Phasendiagrammen und Grundzustandskorrelationen in Abhängigkeit von der Kopplungsstärke t_{pair} auf, die sogar zur Entstehung einer neuen Phase führen können (die Phase $I(p_3)$ in der Abbildung 2.9.a). Bemerkenswert ist auch, daß die Quartett-Phase bei steigender Unterdrückung des Paarhüpfens ($t_{\text{pair}} > 0$) verschwindet und der metallische Charakter in diesem Bereich des Phasendiagramms verloren geht, obwohl nur das Paarhüpfen betroffen ist. Die Modifikation und Verschiebung der Quartett-Phase für $t_{\text{pair}} < 0$ ist unter diesem Gesichtspunkt ebenfalls sehr interessant.

2.3.1.2 Quartett-Wechselwirkung auf einer Sprosse

Eine weitere interessante $SO(5)$ -invariante Wechselwirkung ist ein Hüpfterm, der die Bewegung einzelner Elektronen in Anwesenheit von weiteren Ladungen auf der Sprosse beschreibt (eine sogenannte „bond-charge“-Wechselwirkung). Die explizite Form dieser Wechselwirkung

⁹Hier deutet sich wieder die komplizierte Struktur der Superspinphase in diesem Bereich der Kopplungen an.

ist

$$\begin{aligned}
 t_{\text{quar}} \sum_{\mu=1}^4 \langle \hat{P}_{(4,\mu)}^{1,2} + \hat{P}_{(4,\mu)}^{2,1} \rangle &= t_{\text{quar}} \left\langle \left[(c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + H.c.) (1 - (n_{c\downarrow} - n_{d\downarrow})^2) + \uparrow \leftrightarrow \downarrow \right] \right\rangle \\
 &= t_{\text{quar}} \frac{w - h_1}{wh_2} (p_4^2 - p_5^2), \tag{2.17}
 \end{aligned}$$

wobei t_{quar} die zugehörige Kopplungskonstante ist. Dabei kommt es genau dann zu einem Hüpfen eines Elektrons von einem Holm zum anderen, wenn keines bzw. zwei Teilchen mit entgegengesetztem Spin auf der Sprosse vorhanden sind¹⁰. Der Term (2.17) verursacht, je nach Stärke und Vorzeichen der Kopplungskonstante t_{quar} , eine Vergrößerung bzw. Verkleinerung der Quartett-Phase im Phasendiagramm in Abbildung 2.3. In der Quartett-Phase selbst bleibt der symmetrische Zustand mit der Amplitude p_4 dominant.

Für negative Werte der Hüpfamplitude ($t_{\text{quar}} < 0$) wird die Quartett-Phase mit zunehmender Stärke der Kopplung größer (siehe Abb. 2.13.a für $t_{\text{quar}} = -4$), da der Hüpfprozeß jetzt energetisch bevorzugt wird (ein weiterer Hinweis auf den metallischen Charakter dieser Phase). Der Verlauf der anderen Phasengrenzen bleibt dabei weitestgehend erhalten. In dieser Quartett-Phase ist allerdings die Standardabweichung von der Energie sehr groß, so daß dort der Variationsansatz zur Beschreibung des Grundzustandes nicht geeignet ist¹¹.

Bei positiven Werten der Kopplungskonstanten ($t_{\text{quar}} > 0$) wird das Hüpfen der Elektronen unterdrückt. Dadurch wird die Quartett-Phase um so kleiner, je stärker die Kopplung ist, bis sie sogar komplett verschwindet (siehe Abbildung 2.13.b für die Kopplung $t_{\text{quar}} = +4$). Die Varianz ist wieder sehr klein im gesamten Phasendiagramm, ausgenommen im Winkelbereich $\pi \leq \phi \leq \frac{5}{3}\pi$ bei mittlerer Stärke der Kopplungen U und V , wo die Abweichung der Variationswellenfunktion von einem exakten Eigenzustand des Systems sehr groß ist.

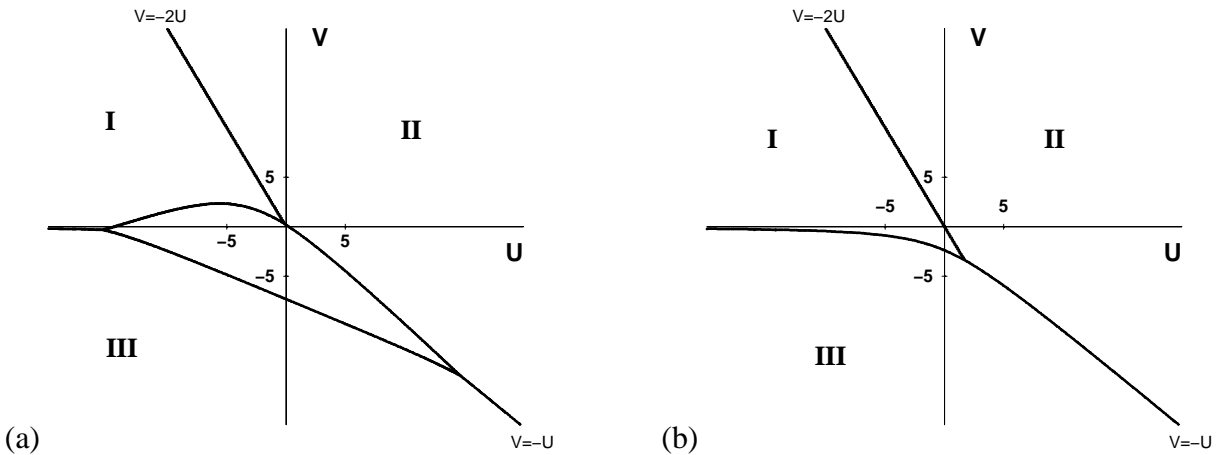


ABBILDUNG 2.13: Phasendiagramme des SZH-Modells mit einer Quartett-Wechselwirkung auf einer Sprosse mit Amplitude (a) $t_{\text{quar}} = -4$ und (b) $t_{\text{quar}} = +4$ bei $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ und $t_{\parallel} = 1$.

Für das SZH-Modell mit der zusätzlichen Quartett-Wechselwirkung (2.17) lassen sich sämtliche Grundzustandskorrelationsfunktionen berechnen. Sie liefern die zu erwartenden Resultate,

¹⁰Ob der Prozeß stattfindet, hängt natürlich wesentlich vom Vorzeichen der Kopplungskonstante t_{quar} ab.

¹¹In den anderen Phasen des Phasendiagramms hingegen liefert die Wellenfunktion (1.39) sehr gute Resultate.

wie beispielsweise die Zweipunktfunktion $\langle n_a(r)n_a(0) \rangle$ für $t_{\text{quar}} = +4$ bei mittlerer Kopplungsstärke (siehe Abb. 2.14). Bei dieser Korrelationsfunktion ergibt sich wieder das bekannte Bild mit zwei ausgeprägten Spitzen in der Korrelationslänge an den Übergangslinien zwischen den Phasen II und I und den Phasen III und II (siehe Abb. 2.14), wobei hier die Phase III erscheint und nicht wie bisher die Quartett-Phase. Die vergrößerte Superspinphase III ist bei mittlerer Kopplungsstärke durch eine kleine Korrelationslänge bei nicht verschwindender Amplitude gekennzeichnet, während die Amplituden der Korrelationsfunktion in den anderen Phasen verschwindet.

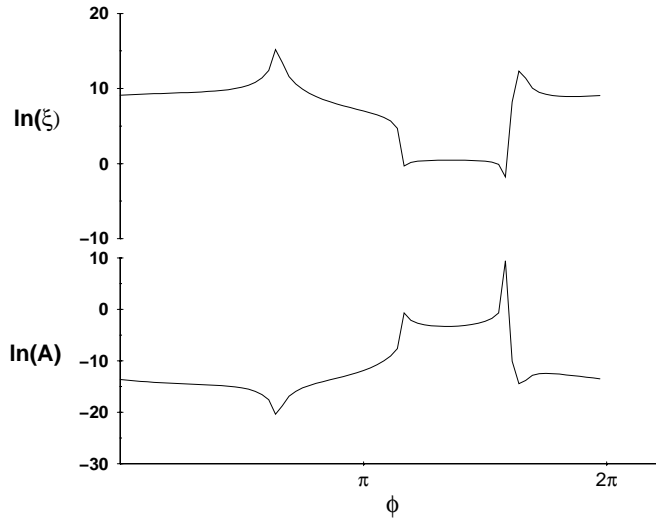


ABBILDUNG 2.14 - Amplitude und Korrelationslänge der Korrelationsfunktion $\langle n_a(r)n_a(0) \rangle$ bei Radius $R = 3$ in der $U - V$ -Ebene für $t_{\text{quar}} = +4$ ($t_{\perp} = 2t_{\parallel}, t_{\parallel} = 1$).

Die Berechnung weiterer Korrelationen liefert keine neuen relevanten Ergebnisse, so daß hier auf eine ausführliche Diskussion verzichtet wird.

Auch die Erweiterung des SZH-Modells mit einer zusätzlichen Quartett-Wechselwirkung auf einer Sprosse führt zu interessanten Änderungen im Grundzustandsphasendiagramm, auch wenn hier keine neuen Phasen auftreten. Dabei zeigt sich wieder, daß der Variationsansatz insgesamt für die Kopplung $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ zur Untersuchung der erweiterten SZH-Modelle sehr gut geeignet ist, ausgenommen der Bereich mittlerer Kopplungen bei $U, V < 0$, wo die Varianz sehr groß wird und nur qualitative Aussagen gemacht werden können.

Im nächsten Abschnitt werden nun Erweiterungen des SZH-Modells mit $SO(5)$ -invarianten Kopplungen zwischen zwei benachbarten Sprossen diskutiert.

2.3.2 Kopplungen zwischen benachbarten Sprossen

In den meisten Fällen besitzen die $SO(5)$ -symmetrischen Wechselwirkungen zwischen zwei benachbarten Sprossen eine sehr komplexe Struktur, aber für einige dieser Kopplungen können einfache Ausdrücke in Termen von Elektronenerzeugungs- und Vernichtungsoperatoren angegeben werden (siehe Anhang A.3.2). Die Erweiterung des SZH-Modells mit diesen Wechselwirkungen kann dabei zu signifikanten Änderungen im Phasendiagramm in Abbildung 2.3 führen, analog zu den Modifikationen durch die Zusatzterme auf einer Sprosse im vorherigen Abschnitt 2.3.1. Im folgenden werden drei verschiedene Erweiterungen des SZH-Modells mit Wechselwirkungen zwischen benachbarten Sprossen unter Verwendung des Variationsansatzes (1.39) untersucht und die Phasendiagramme und zugehörigen Grundzustandskorrelationsfunktionen

bestimmt.

2.3.2.1 Hüpfen von zwei Paaren

Ein interessanter $SO(5)$ -symmetrischer Term, der zwei benachbarte Sprossen koppelt, beschreibt das gleichzeitige Hüpfen von zwei Elektronenpaaren von einem Holm zum anderen auf zwei Sprossen

$$t_{2p} \left\langle \left[d_{\uparrow}^{\dagger}(x) d_{\uparrow}^{\dagger}(y) d_{\downarrow}^{\dagger}(x) d_{\downarrow}^{\dagger}(y) c_{\uparrow}(x) c_{\uparrow}(y) c_{\downarrow}(x) c_{\downarrow}(y) + H.c. \right] \right\rangle = t_{2p} \frac{(p_2^2 - p_3^2)^2}{w(h_1 + w)}, \quad (2.18)$$

wobei t_{2p} die zugehörige Hüpfamplitude ist¹².

Werden nun für verschiedene Werte der Kopplungskonstanten die Grundzustandsphasendiagramme unter Verwendung des Variationsansatzes berechnet, so zeigt sich, daß aufgrund der Struktur des zusätzlichen Terms, unabhängig von der Stärke der Kopplung und des Vorzeichens, keine signifikanten Änderungen im Phasendiagramm des SZH-Modells auftreten. Die Phasengrenzen verändern sich nur leicht, z.B. verschiebt sich für starke positive Werte der Kopplungskonstanten die Phasengrenze zwischen der Superspin-Phase *III* und der Ising-artigen Phase $I(p_2)$ etwas in Richtung $I(p_2)$. Auch die Quartett-Phase vergrößert sich ein wenig (siehe Abb. 2.15 für $t_{2p} = +4$).

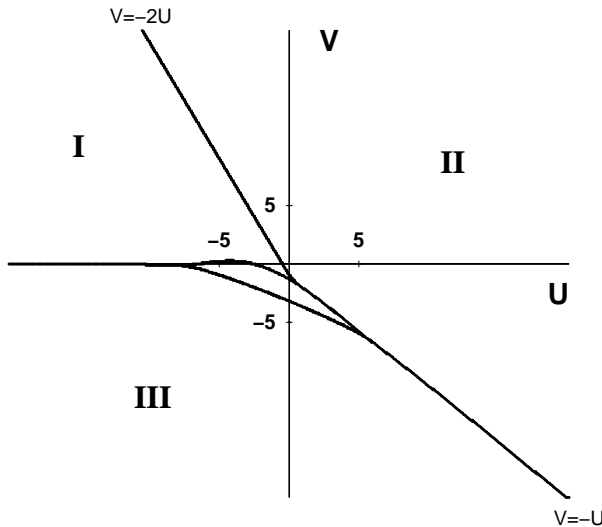


ABBILDUNG 2.15 - Das Grundzustandsphasendiagramm des SZH-Modells mit Hüpfen von zwei Paaren zwischen zwei Sprossen für $t_{2p} = +4$ ($t_{\perp} = 2t_{\parallel}$, $t_{\parallel} = 1$).

Die Standardabweichung ist dabei bis auf einen Bereich bei mittlerer Kopplungsstärke ($U, V \sim t_{\perp}, t_{\parallel}$) im kompletten Phasendiagramm klein, so daß dort der Ansatz sehr gute Resultate liefert¹³.

Bei negativen Werten der Kopplungskonstanten ergibt sich ein ähnliches Bild, so daß hier auf eine weitere Diskussion verzichtet werden kann. Die Berechnung der Grundzustandskorrelationsfunktionen in den einzelnen Phasen liefert nur die bereits bekannten Resultate.

Der Zusatzterm (2.18) bewirkt insgesamt auch bei großen Werten der Kopplungskonstanten t_{2p} keine signifikanten Änderungen im Grundzustandsphasendiagramm des SZH-Modells, obwohl

¹²Diese Kopplung ist nicht einfach ein Produkt des Paarhüpftermes (2.16) auf zwei Sprossen.

¹³Die Varianz ist wieder im Bereich der Quartett-Phase bei mittleren Werten der Kopplungen U und V sehr groß.

bereits das in Abschnitt 2.3.1.1 diskutierte Hüpfen eines Elektronenpaares auf einer Sprosse zu starken Modifikationen der Phasengrenzen und zum Auftreten neuer Phasen führte. Diese zusätzliche Kopplung müßte noch mit anderen Methoden bzw. vielleicht mit einem dimerisierten Ansatz (siehe z.B. Abschnitt 2.5) untersucht werden, um genauere Aussagen über die Veränderungen in den Phasen machen zu können.

2.3.2.2 Quartett-Wechselwirkung auf zwei Sprossen

In Analogie zu den Quartett-Wechselwirkungen auf einer Sprosse im Abschnitt (2.3.1.2) gibt es natürlich auch Kopplungen zwischen benachbarten Sprossen, die nur aus Projektionsoperatoren auf die Quartetts konstruiert werden können (siehe Gleichung (A.27) im Anhang A.3.2). Diese Kopplungen können, ausgedrückt durch Elektronerzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, eine relativ einfache Struktur besitzen. In diesem Abschnitt wird nun die Erweiterung des SZH-Modells mit einer dieser Quartett-Kopplungen näher untersucht. Der $SO(5)$ -invariante Zusatzterm lautet

$$\begin{aligned}
t_{2\text{-quar}} & \left\langle \left[\left((n_{c\uparrow}(x) - n_{d\uparrow}(x))^2 - 1 \right) c_{\uparrow}^{\dagger}(y) c_{\downarrow}^{\dagger}(x) c_{\downarrow}^{\dagger}(y) d_{\uparrow}(y) d_{\downarrow}(x) d_{\downarrow}(y) \right. \right. \\
& \left. \left. + \left((n_{c\downarrow}(x) - n_{d\downarrow}(x))^2 - 1 \right) c_{\uparrow}^{\dagger}(x) c_{\uparrow}^{\dagger}(y) c_{\downarrow}^{\dagger}(y) d_{\uparrow}(x) d_{\uparrow}(y) d_{\downarrow}(y) + H.c. \right] \right\rangle \quad (2.19) \\
& = t_{2\text{-quar}} \frac{w - h_1}{2wh_2(w + h_1)} (p_2^2 - p_3^2) (p_4^2 - p_5^2)
\end{aligned}$$

mit der Kopplungskonstanten $t_{2\text{-quar}}$. Er beschreibt das gleichzeitige Hüpfen von drei Elektronen von einem Holm der Leiter zum anderen auf zwei Sprossen bei Anwesenheit von weiteren Ladungen.

Diese Kopplung (2.19) führt allerdings bei der Berechnung des Phasendiagramms für verschiedene Kopplungsstärken, wie bereits der im vorherigen Abschnitt diskutierte Hüpfterm von zwei Paaren (2.18), zu keinen strukturellen Änderungen. Es gibt nur sehr kleine Modifikationen an den Phasengrenzen und je nach Wahl der Kopplungskonstanten $t_{2\text{-quar}}$ kommt es zu einer Verstärkung ($t_{2\text{-quar}} < 0$) oder Abschwächung ($t_{2\text{-quar}} > 0$) der Gewichte p_2 und p_4 der symmetrischen Zustände in den jeweiligen Phasen (der Phase $I(p_2)$ und der Quartett-Phase). Der Einfluß dieser Wechselwirkung auf das Phasendiagramm in Abbildung 2.3 des SZH-Modells ist somit sehr gering, so daß auch die Berechnung der verschiedenen Korrelationen keinen neuen Resultate liefert.

Die bisher betrachteten $SO(5)$ -invarianten Terme auf zwei Sprossen haben das Phasendiagramm des SZH-Modells in Abbildung 2.3 – wenn überhaupt – nur leicht modifiziert. Dabei traten keine neuen Phasen auf und es gab keine Änderung der Struktur in den bekannten Phasen. Im nächsten Abschnitt wird nun das Hüpfen einzelner Elektronen zwischen benachbarten Sprossen diskutiert, das aufgrund seiner Form schon zu stärkeren Veränderungen im Grundzustandsphasendiagramm führen muß.

2.3.2.3 Diagonalhüpfsterme zwischen benachbarten Sprossen

Ein weiterer $SO(5)$ -invarianter Zusatzterm ist das diagonale Hüpfen einzelner Elektronen zwischen benachbarten Sprossen mit der Kopplungskonstanten t_D (siehe Gleichung (1.25)). Dieser

Term ergibt zusammen mit den Kopplungen, die das Hüpfen einzelner Elektronen zwischen den beiden Holmen auf einer Sprosse (1.15) und entlang der Holme (1.21) beschreiben, ein „tight-binding“-Modell

$$\sum_{\langle x,y \rangle} \left\{ -2t_{\parallel} [c_{\sigma}^{\dagger}(x)c_{\sigma}(y) + d_{\sigma}^{\dagger}(x)d_{\sigma}(y) + H.c.] - 2t_D [d_{\sigma}^{\dagger}(x)c_{\sigma}(y) - c_{\sigma}^{\dagger}(x)d_{\sigma}(y) + H.c.] \right\} - 2t_{\perp} \sum_x (c_{\sigma}^{\dagger}(x)d_{\sigma}(x) + H.c.). \quad (2.20)$$

Dieses System kann durch eine Fouriertransformation mit anschließender unitärer Transformation exakt diagonalisiert werden (siehe Anhang A.4). Die zugehörige Dispersionsrelation für die beiden Energiebänder lautet

$$\epsilon_{\pm}(k) = -4t_{\parallel} \cos(k) \pm 2\sqrt{t_{\perp}^2 + t_D^2 \sin^2(k)}. \quad (2.21)$$

Im Grenzfall $t_D = 0$ ergibt sich daraus die bereits bekannte Beziehung (2.5). Die Hüpfamplitude t_D geht nun quadratisch in die Dispersionsrelation ein, so daß es ausreicht, im folgenden nur positive Kopplungen $t_D > 0$ zu betrachten¹⁴.

Bei der genauen Untersuchung der Dispersionsrelation (2.21) zeigt sich, daß sich beide Energiebänder im Fall $t_{\perp} < 2t_{\parallel}$ bei Halbfüllung überlagern (ganz analog zum Fall $t_D = 0$ in Abbildung 2.2.a). Mit steigender Stärke der Kopplung t_D ($t_D \geq t_{\perp}$) bilden sich sogar zwei Minima im unteren bzw. zwei Maxima im oberen Energieband aus (siehe Abb. 2.16.a). Für die Kopplungskonstanten $t_{\perp} \geq 2t_{\parallel}$ werden diese beiden Energiebänder bei Halbfüllung wieder durch eine Lücke getrennt und auch hier kommt es zu einer Bildung von zwei Maxima und Minima bei $t_D \geq t_{\perp}$ (siehe Abbildung 2.16.b).

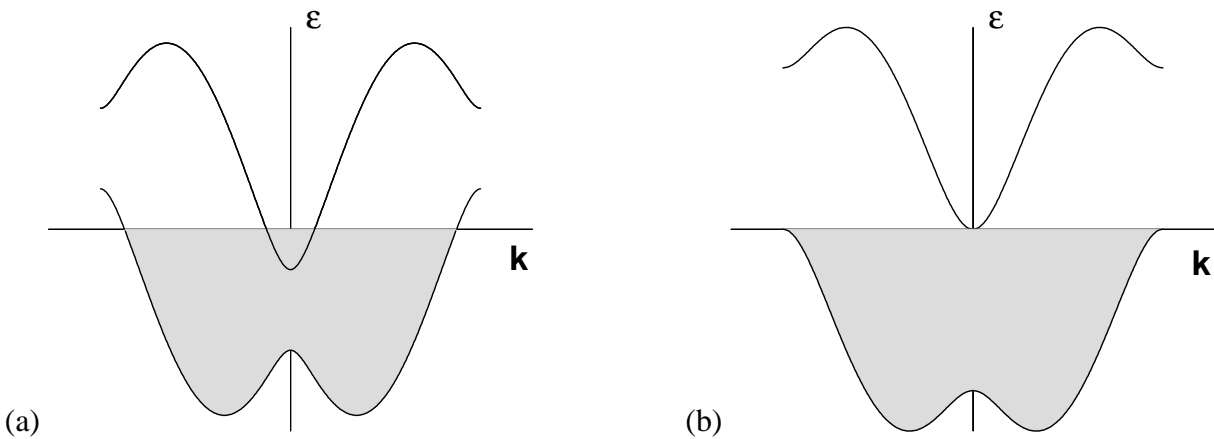


ABBILDUNG 2.16: Bandstruktur eines zweibeinigen Leitermodells für (a) $t_{\perp} = t_{\parallel}$ und (b) $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ bei der Diagonalkopplung $t_D = 4t_{\parallel}$.

Aus der Dispersionsrelation (2.21) läßt sich die Grundzustandsenergie pro Sprosse bei $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$

¹⁴Der Übergang $t_D \rightarrow -t_D$ entspricht einer Vertauschung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren der oberen Sprosse $c_{\sigma}^{\dagger}, c_{\sigma}$ mit den entsprechenden Operatoren $d_{\sigma}^{\dagger}, d_{\sigma}$ der unteren Sprosse im gesamten Hamiltonoperator und führt nicht zu einer Änderung der Energie (Invarianz des Systems unter $c \leftrightarrow d$).

($t_{\parallel} = 1$) in Abhängigkeit von der Kopplungskonstanten t_D sehr einfach berechnen. Sie lautet

$$\frac{E}{L} = -\frac{4}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \sqrt{1 + \left(\frac{t_D}{2}\right)^2 \sin^2(k)} = -\frac{16}{\pi} \mathcal{E} \left(\sqrt{-\frac{t_D^2}{4}} \right) \quad (2.22)$$

mit dem vollständig elliptischen Integral

$$\mathcal{E}(t) = \int_0^1 dx \frac{\sqrt{1-t^2x^2}}{\sqrt{1-x^2}} \quad (2.23)$$

(für Details der Rechnung siehe Anhang A.4). Die zu dieser Energie zugehörige Grundzustandswellenfunktion hingegen kann für $t_D \neq 0$ nicht so einfach bestimmt werden wie beim Modell ohne Diagonalkopplung, wo der Variationsansatz bereits den exakten Grundzustand des Systems liefert (siehe Gleichung (2.6)). Aus diesem Grund wird dieses System ohne Wechselwirkung in Abschnitt 2.4.3 nochmals exakt diagonalisiert werden. Diesmal allerdings nur auf zwei Sprossen, um die genaue Änderung der Grundzustandswellenfunktion bei Einschalten der Diagonalwechselwirkung t_D zu untersuchen und um vielleicht daraus auf die Struktur des Grundzustandes für $L \rightarrow \infty$ zu schließen.

Werden nun zum „tight binding“-Modell die Wechselwirkungen des SZH-Modells hinzugenommen, so kann dieses System nicht mehr durch eine Fouriertransformation exakt diagonalisiert werden, so daß zur Bestimmung des Phasendiagramms andere Methoden verwendet werden müssen. Für die Kopplungskonstanten $t_{\perp} = t_{\parallel}$ und $U, V \ll t_{\perp}, t_{\parallel}$ kann das Modell vielleicht durch eine Bosonisierung um die vier Fermipunkte gelöst werden (siehe z.B. Abbildung 2.16.a), analog zum SZH-Modell bei schwacher Kopplung [5]. Im folgenden wird aber nur das System mit $t_{\perp} \geq 2t_{\parallel}$ betrachtet (siehe Abbildung 2.16.b), das sich aufgrund der Energielücke zwischen Grundzustand und erstem angeregten Zustand wieder für eine Untersuchung unter Verwendung eines Matrixproduktansatzes anbietet. Allerdings führt der bisherige translationsinvariante Ansatz (1.39) zu widersprüchlichen Ergebnissen, denn die mit ihm berechnete Variationsenergie für den Diagonalhüpfterm

$$E_{\text{Var}} \sim t_D \left[(p_5^2 - p_4^2) (25p_6^2 + p_3^2 - p_1^2 - p_2^2) - 2h_2 (5p_3p_6 + p_1p_2) + 4p_4p_5 (p_1p_3 + 5p_2p_6) \right] \quad (2.24)$$

liefert für die Amplituden $\pm t_D$ offensichtlich unterschiedliche Energien. Diese Variationsenergien müßten aber aufgrund der Invarianz des Systems unter $c \leftrightarrow d$ gleich sein, so daß folglich der Ansatz in dieser Form nicht geeignet ist. Zur Untersuchung des Systems muß daher eine Verallgemeinerung der Wellenfunktion (1.39) verwendet werden (siehe Abschnitt 2.5), die unterschiedliche Sätze von Parametern auf geraden und ungeraden Sprossen besitzt (Einführung einer Dimerisierung, siehe Gleichung (2.32)) und die zumindest diese Invarianz berücksichtigt. Im Abschnitt 2.5.2 wird dann mit dieser dimerisierten Variationswellenfunktion das SZH-Modell mit der zusätzlichen Diagonalkopplung t_D näher untersucht.

2.4 Exakte Lösung des SZH-Modells auf zwei Sprossen

Die Untersuchungen in den vorherigen Abschnitten unter Verwendung eines Variationsansatzes lieferten viele Informationen über das Grundzustandsphasendiagramm des Systems (1.15,1.21)

und den Korrelationsfunktionen in den einzelnen Phasen. Dabei stellt sich natürlich die Frage, wie gut dieser translationsinvariante Ansatz (1.39) für den Grundzustand ist und in welchen Bereichen das Modell durch ihn eventuell sogar exakt gelöst wird. Zur Beantwortung dieser Frage wird in diesem Abschnitt das SZH-Modell auf zwei Sprossen exakt diagonalisiert und das Phasendiagramm bestimmt. Anschließend wird versucht – ausgehend vom Grundzustand auf zwei Sprossen – auf den globalen Grundzustand des Modells für $L \rightarrow \infty$ zu schließen und diesen mit dem Variationsansatz zu vergleichen¹⁵. In den Bereichen des Phasendiagramms, in denen der Zustand mit niedrigster Energie auf zwei Sprossen als einfaches Tensorprodukt von Zuständen auf einer Sprosse dargestellt werden kann, ist es möglich, den globalen Grundzustand bei periodischen Randbedingungen exakt anzugeben. Er muß selbst ein einfacher Produktzustand mit einer ähnlichen Struktur wie der Variationsansatz (1.39) sein, so daß sich der Ansatz dort sehr gut überprüfen läßt.

Das SZH-Modell wird zuerst in eine Summe lokaler Systeme auf zwei Sprossen zerlegt

$$H_{\text{SZH}} = \sum_{x=1}^L H_{x,x+1}, \quad H_{x,x+1} = \frac{h_x}{2} + h_{x,x+1} + \frac{h_{x+1}}{2} \quad (2.25)$$

mit periodischen Randbedingungen (Sprosse $L + 1 \equiv 1$) und den lokalen Operatoren

$$h_x = \left[U \left((n_{c\uparrow}(x) - \frac{1}{2})(n_{c\downarrow}(x) - \frac{1}{2}) + (c \rightarrow d) \right) + V (n_c(x) - 1)(n_d(x) - 1) \right. \\ \left. + J \vec{S}_c(x) \vec{S}_d(x) - 2t_{\perp} (c_{\sigma}^{\dagger}(x) d_{\sigma}(x) + H.c.) \right] \quad (2.26)$$

sowie

$$h_{x,x+1} = -2t_{\parallel} [c_{\sigma}^{\dagger}(x) c_{\sigma}(x+1) + d_{\sigma}^{\dagger}(x) d_{\sigma}(x+1) + H.c.] \quad (2.27)$$

Es ist nur eine etwas andere Darstellung des Hamiltonoperators (1.15,1.21), da jetzt nur über die Orte x summiert wird und nicht mehr über die nächsten Nachbarn¹⁶. Der Vorteil dieser Zerlegung liegt darin, daß von einem exakten Grundzustand des Operators $H_{x,x+1}$, der als einfaches Produkt von Einsprossenzuständen dargestellt werden kann, durch die Additivität sofort der globale Grundzustand extrapoliert werden kann¹⁷. Anschließend wird das so entstandene Modell auf zwei Sprossen $H_{x,x+1}$ für die Kopplungen $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ und $t_{\perp} = t_{\parallel}$ exakt diagonalisiert und die Grundzustandsphasendiagramme und zugehörigen Grundzustandswellenfunktionen mit den aus Variationsrechnungen bekannten Resultaten verglichen (siehe die Abschnitte 2.4.1 und 2.4.2). In Abschnitt 2.4.3 wird noch kurz auf das SZH-Modell mit dem Diagonalhüpfterm (1.25) eingegangen.

¹⁵Eine ähnliche Methode wurde auch bei Kim et al. [56] für das Hubbardmodell auf einer Leiter verwendet. Dort wurde nach der exakten Diagonalisierung auf zwei Sprossen eine rekursive Variationsmethode benutzt, um den globalen Grundzustand zu bestimmen.

¹⁶Es gibt natürlich mehrere Möglichkeiten der Zerlegung, sie sind aber aufgrund der Linearität der Operatoren äquivalent.

¹⁷Aus diesem Grund werden auch periodische Randbedingungen vorausgesetzt, um die Randterme nicht berücksichtigen zu müssen.

2.4.1 Lösung für $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$

Zur Berechnung des gesamten Spektrums des Operators $H_{x,y}$ (mit $y \equiv x + 1$) werden alle 50 Multipletts auf zwei Sprossen benötigt (siehe Abschnitt 1.2). Da der lokale Hamiltonoperator $H_{x,y}$ aufgrund seiner $SO(5)$ -Invarianz die Casimir-Ladung der Zustände nicht verändert, reicht es aus, ihn in den Multipletts mit gleicher Casimir-Ladung zu diagonalisieren, d.h. die 14 Singulets, 16 Quartetts, zehn Quintetts, fünf Dekupletts, die 14-dimensionale Darstellung und die vier 16-dimensionalen Darstellungen können jeweils getrennt voneinander betrachtet werden. Es zeigt sich, daß sich der Grundzustand des Systems im gesamten Phasendiagramm stets als eine bestimmte Linearkombination der 14 $SO(5)$ -Singulets darstellen läßt. Er lautet

$$|\Psi\rangle = \sum_{\mu=1}^{14} \alpha_{\mu}(U, V) |\Psi_{0,0}^{(\mu)}(x, y)\rangle \quad (2.28)$$

mit den im Anhang A.2 definierten $SO(5)$ -Singulets $|\Psi_{0,0}^{(\mu)}(x, y)\rangle$ auf zwei Sprossen. Für die Koeffizienten α_{μ} der Zustände gilt

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= n f_1, & \alpha_2 &= -\alpha_3 = \alpha_4 = -\alpha_5 = n f_2, & \alpha_6 &= \alpha_9 = n f_3, \\ \alpha_7 &= \alpha_8 = n f_4, & \alpha_{10} &= \alpha_{13} = 0, \\ \alpha_{11} &= -\alpha_{12} = n f_5, & \alpha_{14} &= n f_6. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Die Gewichte $f_i, i = 1, \dots, 6$ sind Funktionen in den Kopplungen U und V . Der Parameter n legt die Norm des Zustandes fest. Die beiden $SO(5)$ -Singulets auf zwei Sprossen, die im Matrixprodukt $g_x g_{x+1}$ des Variationsansatzes (1.39) auftreten, besitzen eine ähnliche Struktur (allerdings sind dort sämtliche Koeffizienten von Null verschieden).

Der Grundzustand (2.6) auf zwei Sprossen ist im gesamten Phasendiagramm eindeutig, bis auf den Punkt $U = V = 0$, wo eine starke Entartung mit den anderen $SO(5)$ -Multipletts vorliegt. An diesem wechselwirkungsfreien Punkt ist es allerdings nicht möglich, festzustellen, ob diese energetische Entartung für Systemgrößen $L > 2$ aufgehoben wird und somit der globale Grundzustand (2.6) auch bei $L \rightarrow \infty$ eindeutig werden kann. Eine weitere Eigenschaft des Zustandes (2.28) ist seine Invarianz unter der Vertauschung der Zustände der Sprossen x und y (siehe z.B. den gleichen Vorfaktor α_2 vor den Zuständen $|\Psi_{0,0}^{(2)}(x, y)\rangle$ und $|\Psi_{0,0}^{(4)}(x, y)\rangle$). Somit gibt es keinen Hinweis auf eine mögliche dimerisierte Struktur des Grundzustandes bei größeren Systemlängen $L (> 2)$. Eine Dimerisierung darf aber nicht ganz ausgeschlossen werden, da nicht klar ist, ob die Grundzustandswellenfunktion auf zwei Sprossen überhaupt für größere Systeme aufgrund ihrer Form realisiert werden kann¹⁸.

Aus der Kenntnis des exakten Grundzustandes für sämtliche Werte der Kopplungskonstanten U und V läßt sich jetzt ein Phasendiagramm bestimmen (siehe Abb. 2.17).

Analog zum Auftreten der vier Phasen im Grundzustandsphasendiagramm in Abbildung 2.3 des SZH-Modells können hier durch die sechs verschiedenen Funktionen f_i maximal sechs verschiedene Phasen definiert werden, die durch die jeweils größte Amplitude f_i festgelegt werden¹⁹.

¹⁸Zur Klärung dieser Frage müßte das SZH-Modell zumindest auf vier Sprossen exakt diagonalisiert werden. Dort sollten dann bereits Ansätze einer möglichen Dimerisierung erkennbar sein.

¹⁹Die Parameter f_i sind dabei das Analogon der sechs Gewichte p_i im Ansatz (1.39) und entsprechend werden auch die Phasengrenzen und die Phasen selbst bestimmt.

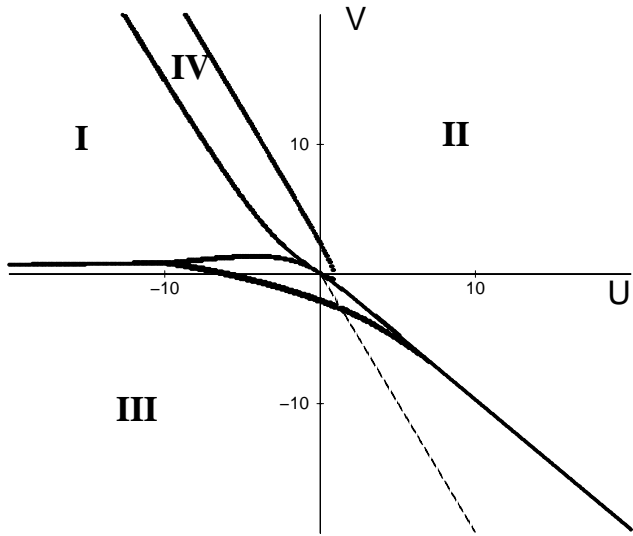


ABBILDUNG 2.17 - Das Grundzustandsphasendiagramm des SZH-Modells auf zwei Sprossen für $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ ($t_{\parallel} = 1$).

Dabei treten nun zusätzlich zu den vier bekannten Phasen I (f_3), II (f_1), III (f_6) und der Quartett-Phase (f_5) im Phasendiagramm des SZH-Modells zwei weitere Phasen auf: Eine Phase IV mit Amplitude f_2 (zwischen der Phase I und II) und eine Phase mit Amplitude f_4 , die nur auf einer Linie $V = -2U$, $U > 0$ realisiert wird (in der Abbildung 2.17 gestrichelt gekennzeichnet). Auf dieser Linie $V = -2U$ sind in dieser neuen Phase alle Amplituden der restlichen Singulett-Zustände fast identisch Null bzw. sehr klein, so daß der Grundzustand bis auf geringe Abweichungen nur aus einer Linearkombination der beiden $SO(5)$ -Singulett in (1.6) mit der Doppelbesetzung auf dem oberen bzw. unteren Holm besteht. Bereits in einer infinitesimalen Umgebung der Linie verschwindet allerdings die Amplitude f_4 und eine der beiden anderen Phasen I oder III tritt dann auf, deren Grundzustand eine vollständig andere Struktur besitzt. Die zweite neue Phase ist die Phase IV , in der der Grundzustand aus einer Linearkombination der Zustände mit dem $SO(5)$ -Singulett $|\Psi_{0,0}^{(1)}\rangle$ auf einer Sprosse und den beiden $SO(5)$ -Singulett $|\Psi_{0,0}^{(2,3)}\rangle$ auf der anderen Sprosse besteht (Doppelbesetzung oben bzw. unten, siehe Gleichung (1.6)). Streng genommen ist die Phase IV eine Art Mischphase zwischen den Phasen I und II .

Natürlich kann vom Grundzustand des Systems auf zwei Sprossen im allgemeinen nicht auf den Grundzustand des Modells im thermodynamischen Limes geschlossen werden. Die Ähnlichkeit des Phasendiagramms in Abbildung 2.17 mit dem durch den Variationsansatz (1.39) bestimmten Phasendiagramm in Abbildung 2.3 und die Invarianz von (2.28) unter der Vertauschung der Zustände der Sprossen x und y (Translationsinvarianz) lassen aber schließen, daß der translationsinvariante Variationsansatz zur Untersuchung des SZH-Modells bei $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ für $L \rightarrow \infty$ sehr gut geeignet ist. Ein weiterer Punkt ist noch die starke Übereinstimmung der Struktur der Wellenfunktionen (2.28) und der Singulett im Ansatz (1.39) (beschränkt auf zwei Sprossen).

Eng verknüpft mit der Frage nach der Qualität bzw. der Güte des Variationsansatzes ist natürlich auch die Frage, in welchen Bereichen des Phasendiagramms der Ansatz (1.39) eventuell sogar den exakten Grundzustand des Modells repräsentiert. An diesen exakt lösbaren Punkten im Raum der Kopplungsparameter U und V muß sich dazu der Grundzustand auf zwei Sprossen als Produkt einer bestimmten Linearkombination von Zuständen auf einer Sprosse schreiben lassen ($|\Psi(x, y)\rangle = |\phi(x)\rangle \otimes |\phi(y)\rangle$). Das bedeutet, daß in dieser Linearkombination nur die drei Singulett (1.6) enthalten sein können, da die Quartetts (1.8) und das Quintett (1.7) bei einer Tensorproduktbildung nur bei einer sehr speziellen Anordnung wie z.B. in der Matrix (1.35)

im Matrixproduktansatz (1.39) zu einem $SO(5)$ -Singulett auf zwei Sprossen führen. Bei dieser speziellen Anordnung entstehen aber immer auch noch andere Multipletts höherer Casimir-Ladung, die nicht im Grundzustand auf zwei Sprossen vorkommen dürfen (z.B. die Dekuplett-Zustände auf der Hauptdiagonalen in $g_x g_{x+1}$ in (1.38)). Folglich besitzt ein möglicher exakter Grundzustand des SZH-Modells bei einer bestimmten Kopplung U und V die Form

$$|\Psi\rangle \sim \prod_{x=1}^L \left(\sum_{i=1}^3 \beta_i |\Psi_{0,0}^{(i)}(x)\rangle \right), \quad (2.30)$$

wobei die drei Parameter β_i von den Kopplungskonstanten abhängen. Dieser Zustand läßt sich auch stets durch eine bestimmte Wahl der Parameter p_i in der Variationswellenfunktion realisieren, so daß der Ansatz (1.39) an diesem Punkt den exakten Grundzustand repräsentiert.

Bei der Diagonalisierung des Modells auf zwei Sprossen zeigt sich nun, daß sich der Grundzustand (2.28) sogar auf der ganzen Linie $V = -2U$ ($U < 0$) im Phasendiagramm als einfaches Tensorprodukt von Zuständen auf zwei Sprossen schreiben läßt. Er lautet dort

$$|\Psi\rangle \sim \prod_{x=1}^2 \left(-c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} + c_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} - d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} - c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\downarrow}^{\dagger} \right) (x) |0\rangle \quad (2.31)$$

und besitzt die Energie²⁰ $\lambda = 5U/2 - 8$. Die Erweiterung des Zustandes (2.31) auf L Sprossen ist immer noch der Grundzustand des Systems, da es keinen Zustand gibt, der eine niedrigere Energie besitzt als λL . Jede Abweichung von diesem Zustand würde lokal eine höhere Energie erzeugen, und da sich die Gesamtenergie additiv aus den Energien auf zwei Sprossen zusammensetzt (siehe (2.25)), hätte der so generierte Zustand eine höhere Energie und wäre somit nicht mehr der Grundzustand. Es ist exakt derselbe Zustand wie der Grundzustand des SZH-Modells (2.6) bei $U = V = 0$ in Abschnitt 2.1.2 (er entspricht der Wahl $p_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$, $p_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ und $p_i \equiv 0$ ($i = 3, \dots, 6$) der Parameter im Variationsansatz). Die translationsinvariante Wellenfunktion (2.6) ist folglich der Grundzustand des SZH-Modells im thermodynamischen Limes für die Kopplungen $V = -2U$ ($U \leq 0$) und $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$.

Die numerische Berechnung der anderen Grundzustände auf einem Gitter in der $U - V$ -Ebene und der Vergleich mit dem Ansatz (2.30) liefern keine Hinweise auf weitere Bereiche bzw. Punkte im Phasendiagramm des SZH-Modells auf zwei Sprossen, bei denen der Grundzustand faktorisiert und somit der Variationsansatz ein exakter Grundzustand wird²¹.

Insgesamt zeigt sich, daß der Variationsansatz hervorragend geeignet ist, um das SZH-Modell für die Kopplung $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ im gesamten Bereich der Kopplungskonstanten U und V zu untersuchen. Er liefert sogar den exakten Grundzustand auf einer ganzen Linie im Phasendiagramm in Abbildung 2.3.

2.4.2 Lösung für $t_{\perp} = t_{\parallel}$

Die exakte Diagonalisierung des SZH-Modells auf zwei Sprossen kann natürlich auch für die Kopplung $t_{\perp} = t_{\parallel}$ durchgeführt werden, um das Grundzustandsphasendiagramm zumindest für

²⁰Die analytische Berechnung der 49 Energien der anderen Multipletts ergibt, daß diese Energien auf der Linie stets größer sind als $\lambda = 5U/2 - 8$ für $U < 0$. Bei $U = 0$ gibt es, wie bereits erwähnt worden ist, Entartungen.

²¹Natürlich können bei dieser Vorgehensweise weitere einzelne Punkte mit faktorisierenden Grundzuständen nicht ausgeschlossen werden, dazu müßten die Energien analytisch berechnet werden (teilweise Nullstellen von Polynomen sechsten Grades in U und V !).

$L = 2$ im Bereich $U, V \sim t_{\perp}, t_{\parallel}$ zu erhalten, da der Variationsansatz aufgrund seiner Struktur für diese Werte der Kopplungskonstanten zur Untersuchung nicht geeignet ist (siehe die Diskussion in Abschnitt 2.1.1). Dieses so berechnete Grundzustandsphasendiagramm kann dann im Bereich schwacher Kopplung mit dem bekannten Phasendiagramm von Lin et al. [5] verglichen werden. Ein weiterer, sehr interessanter Punkt ist die Bestimmung exakter Grundzustände der Form (2.30), um festzustellen, in welchen Bereichen in der $U - V$ -Ebene die Variationswellenfunktion vielleicht gute Resultate liefern kann.

Im folgenden werden zur Berechnung der exakten Grundzustände des Operators $H_{x,y}$ in (2.25) die 50 Multipletts auf zwei Sprossen benötigt, wobei als Ansätze wieder die Linearkombinationen der Zustände der Multipletts gleicher Casimir-Ladungen mit beliebigen Koeffizienten verwendet werden, wie beispielsweise der Ansatz für die Singulett-Zustände (2.28)). Es zeigt sich, daß auch für die Wahl $t_{\perp} = t_{\parallel}$ der Grundzustand des Systems stets ein $SO(5)$ -Singulett der Form (2.28) ist. Bis auf einen sehr kleinen Bereich in einer Umgebung des Punktes $U = -2.4, V = 4.8$ in der Phase I besitzen die Entwicklungskoeffizienten α_{μ} vor den einzelnen $SO(5)$ -Singulett des Grundzustandes $|\Psi\rangle$ immer dieselbe Form wie in Gleichung (2.29). Allerdings ist die Bestimmungsgleichung für den Eigenwert der Energie $\lambda(U, V)$ anders und auch die Gewichte $f_i, i = 1, \dots, 6$ der Zustände haben eine etwas andere Struktur. Es können nun wieder sechs verschiedene Phasen definiert werden, die den bereits bekannten Phasen im Phasendiagramm in Abbildung 2.17 entsprechen²², wobei sich aber im Vergleich zum Modell mit $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ der Verlauf der Phasengrenzen sehr stark geändert hat (siehe Abb. 2.18).

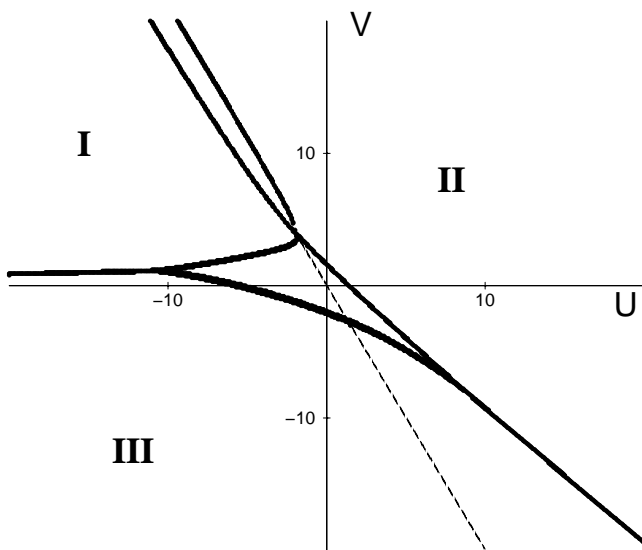


ABBILDUNG 2.18 - Das Grundzustandsphasendiagramm des SZH-Modells auf zwei Sprossen für $t_{\perp} = t_{\parallel}$ ($t_{\parallel} = 1$).

Die Phase IV zwischen der Phase I und II ist verglichen mit der Phase IV in der Abbildung 2.17 schmaler geworden, und die Linie $V = -2U$, auf der die Amplitude f_4 maximal wird, verläuft jetzt bis $U > -2.4$ (in der Abbildung gestrichelt gekennzeichnet). Außerdem ist die Quartett-Phase größer, sie erstreckt sich über den Ursprung hinaus (bei $U = V = 0$ tritt hier keine Entartung der Grundzustandswellenfunktion mehr auf!). Die Größe der Quartett-Phase zeigt deutlich, daß bei kleinen und mittleren Kopplungen der Variationsansatz für $t_{\perp} = t_{\parallel}$ versagen muß (er setzt eine näherungsweise Faktorisierung des Grundzustandes und indirekt eine Energielücke voraus, siehe Abschnitt 2.1.1). Schließlich liefert die exakte Diagonalisierung auf

²²Die größte Amplitude f_i legt wieder die Phase fest.

zwei Sprossen keinen Hinweis auf die genaue Struktur des Phasendiagramms in der Quartett-Phase im thermodynamischen Limes, so daß die Frage nach den genauen physikalischen Phasen bei schwacher Kopplung im Abschnitt 2.1.1 nicht geklärt werden kann. Allerdings haben Lin et al. [5] gezeigt, daß bei schwacher Kopplung im Bereich der Superspin-Phase *III* die Phase eine mehrkomponentige Luttinger-Flüssigkeitsphase darstellt, wenn auch ihre genaue Struktur umstritten ist. Es liegt somit die Vermutung nahe, daß insgesamt die Quartett-Phase im Phasendiagramm in Abbildung 2.3 für $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ mit ihrem metallischen Charakter eine solche Luttinger-Flüssigkeit darstellt. Das würde entsprechend die stets große Standardabweichung der Variationswellenfunktion in diesem Bereich erklären, da der Ansatz (1.39) dort dann nicht geeignet ist. Das bedeutet weiterhin, daß der Bereich der Quartett-Phase, der in den bisher betrachteten Phasendiagrammen auftritt, erneut mit anderen Verfahren untersucht werden muß, die entsprechend masselose Anregungen beschreiben können.

Im Bereich starker Kopplung besitzen die beiden Phasendiagramme in den Abbildungen (2.17) und (2.18) wieder die gleiche Struktur.

Die Berechnung der exakten Grundzustände auf zwei Sprossen auf einem Gitter in der $U - V$ -Ebene zeigt aber auch, daß es wieder einen Bereich gibt, in dem der Ansatz (2.30) bei entsprechender Wahl der Parameter β_i den Zustand niedrigster Energie darstellt. Außerhalb der Quartett-Phase ist die Wellenfunktion (2.31) auf der Linie $V = -2U, U < -2.4$ wieder der exakte Grundzustand des Systems auf zwei Sprossen, so daß für Systemgrößen $L > 2$ der Variationsansatz dort die bereits bekannte Grundzustandswellenfunktion (2.6) des Modells mit der Energie $E/L = 5U/2 - 4$ repräsentiert. Die numerischen Resultate für die Grundzustände im restlichen Phasendiagramm in Abbildung 2.18 liefern keine Hinweise mehr auf weitere Bereiche bzw. Punkte, in denen der Grundzustand in der Form (2.30) geschrieben werden kann und somit eine Extrapolation der Wellenfunktion zu $L \rightarrow \infty$ möglich ist²³.

Insgesamt zeigt sich, daß sich das Phasendiagramm des SZH-Modells für $t_{\perp} = t_{\parallel}$ im Bereich mittlerer und schwacher Kopplungen U und V sehr stark vom System mit $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ unterscheidet. Allerdings besitzt das Modell ebenfalls eine Linie $V = -2U, U < -2.4$, auf der der Grundzustand exakt angegeben werden kann und der Variationsansatz (1.39) sich für weitere Untersuchungen eignen würde. Des weiteren ist nun vermutlich die Frage nach der Struktur der Quartett-Phase in den bisher betrachteten Phasendiagrammen geklärt. Sie entspricht wahrscheinlich einer mehrkomponentigen Luttinger-Flüssigkeitsphase und kann deshalb mit dem Variationsansatz nicht genauer untersucht werden.

2.4.3 Ein „tight-binding“-Modell mit Diagonalkopplung zwischen zwei Sprossen

Die exakte Diagonalisierung auf zwei Sprossen kann natürlich auch für das SZH-Modell mit der in Abschnitt 2.3.2 betrachteten Diagonalkopplung (1.25) durchgeführt werden, um vielleicht Hinweise auf das Phasendiagramm zu erhalten. Für das nicht wechselwirkende System ($U = V = 0$) zeigt sich, daß der Grundzustand ein $SO(5)$ -Singulett ist und sich wieder als eine Linearkombination der 14 Singulettts schreiben läßt. Bereits für kleine Werte der Kopplungskonstanten $|t_D| \ll 1$ besitzt diese Wellenfunktion aber eine komplett andere Struktur als die Grund-

²³Die Existenz einzelner Punkte im Phasendiagramm, bei denen das Modell einen faktorisierenden Grundzustand besitzt, kann dabei natürlich wieder nicht ausgeschlossen werden.

zustandswellenfunktion (2.6) des SZH-Modells bei $t_D = 0$. Mit dem Einschalten der Diagonalkopplung ändert sich der Grundzustand des Systems vollständig: Es gibt keinen stetigen Übergang und die Entwicklungskoeffizienten α_μ in der Linearkombination der $SO(5)$ -Singulets auf zwei Sprossen weisen deutlich auf eine nicht symmetrische Struktur der Wellenfunktion bezüglich des oberen und unteren Holmes hin²⁴. Eine Faktorisierung der Grundzustandswellenfunktion wie bei dem Modell mit $t_D = 0$ tritt hier für $t_D \neq 0$ und $U = V = 0$ nicht auf, so daß auf die exakte Diagonalisierung des wechselwirkenden Systems auf zwei Sprossen mit $U, V \neq 0$ verzichtet werden kann, da sich bereits beim Modell mit $t_\perp = t_\parallel$ im vorherigen Abschnitt 2.4.2 gezeigt hat, daß bei schwacher und teilweise mittlerer Kopplung keine relevanten Ergebnisse für das System im thermodynamischen Limes zu erwarten sind. Das SZH-Modell mit dem Zusatzterm (1.25) wird allerdings noch mit einer dimerisierten Variationswellenfunktion im Limes starker und mittlerer Kopplung untersucht werden (siehe Abschnitt 2.5.2), die die Invarianz der Energie unter der Vertauschung $c \leftrightarrow d$ korrekt berücksichtigt. Dadurch können vielleicht die durch den Hüpfterm verursachten Modifikationen im Phasendiagramm bestimmt werden.

2.5 Dimerisierung

Die Untersuchungen in den vorherigen Abschnitten beschränkten sich alle auf die Verwendung eines translationsinvarianten Ansatzes für die Grundzustandswellenfunktion. Es zeigte sich, daß allerdings bei bestimmten Wechselwirkungen, wie z.B. dem Diagonalhüpfen (2.20), dieser Ansatz offensichtlich zu falschen Resultaten führt. Ein weiterer wichtiger Punkt ist das mögliche Auftreten von Phasen mit spontaner Dimerisierung in den Modellen, bei denen die Elementarzelle nun aus zwei Sprossen besteht. Aus diesen Gründen werden einige der bisher betrachteten Modelle im folgenden mittels einer dimerisierten Variationswellenfunktion untersucht, die unterschiedliche Sätze von Variationsparametern p_i und \tilde{p}_i an benachbarten Plätzen besitzt. Diese dimerisierte Wellenfunktion ist eine Verallgemeinerung des Ansatzes (1.39), und sie lautet

$$|\Psi_{Dim}\rangle = \prod_{x=1}^{L/2} g_{2x}(\{p_i\}) g_{2x+1}(\{\tilde{p}_i\}). \quad (2.32)$$

Die sechs Variationsparameter sind nun vom Ort der Sprosse abhängig: p_i sind die Gewichte der lokalen Multiplets auf geraden und \tilde{p}_i sind die Gewichte auf ungeraden Sprossen. Außerdem werden zur Vereinfachung der Rechnungen eine gerade Anzahl L von Sprossen und periodische Randbedingungen ($L + 1 \equiv 1$) vorausgesetzt.

Aufgrund der doppelten Anzahl an freien Parametern ist es jetzt möglich, daß es nun maximal vier Singulets, vier Quartetts, zwei Quintetts und zwei Dekupletts in den Elementen des Matrixprodukts auf zwei Sprossen $g_{2x}g_{2x+1}$ bzw. $g_{2x+1}g_{2x+2}$ gibt, also zweimal so viele Zustände wie im translationsinvarianten Fall, wo höchstens 25 Zustände in den dort auftretenden sechs Multiplets enthalten sind. Je nach Wahl der Gewichte p_i und \tilde{p}_i reduziert sich die Menge der Zustände, z.B. entspricht $p_i \equiv \tilde{p}_i$ dem translationsinvarianten Ansatz mit 25 Zuständen, aber auch $p_4\tilde{p}_5 = p_5\tilde{p}_4$ führt auf deutlich weniger Zustände (zehn Multiplets mit insgesamt 39

²⁴Die Invarianz des Systems unter der Vertauschung $c \leftrightarrow d$ liefert hier zwei entartete Grundzustandswellenfunktionen, deren Zustände auf einer Sprosse nicht symmetrisch bezüglich der beiden Holme angeordnet sind.

Zuständen²⁵). Dabei sind die Zustände selber wieder komplizierte Linearkombinationen einfacher Tensorproduktzustände auf zwei Sprossen, und sie können bezüglich der Spin- $SU(2)$ Subalgebra in Spin-Singulett, Dublett und Triplettzustände unterteilt werden. Aus diesem Grund ist es nicht möglich, unter Verwendung des Ansatzes (2.32) die Bildung von ferromagnetischen Domänen mit Zuständen höheren Spins zu beschreiben. Ein ähnliches Argument gilt auch hier für die höheren Eigenwerte der Ladung Q (ganz analog zur Klassifikation der Zustände im translationsinvarianten Ansatz (1.39), siehe Abschnitt 1.3).

Bei der Berechnung der Variationsenergie mit dem Ansatz (2.32) zeigt sich, daß sie sich im Gegensatz zum translationsinvarianten Fall aus zwei Anteilen zusammensetzt. Sie lautet

$$E_{Dim} = \frac{L}{2} (E_{p\tilde{p}} + E_{\tilde{p}p}), \quad (2.33)$$

wobei $E_{p\tilde{p}}$ die Energie auf zwei Sprossen ist, die mit den Matrizen $g_{2x}(\{p_i\})g_{2x+1}(\{\tilde{p}_i\})$ bei der Transfermatrixmethode bestimmt wird, und $E_{\tilde{p}p}$ ist die Energie, die mittels $g_{2x-1}(\{\tilde{p}_i\})g_{2x}(\{p_i\})$ berechnet wird (die Variationsenergie ist vollständig im Anhang B.3 angegeben). Durch diese beiden Anteile wird eine eventuell auftretende Dimerisierung auf benachbarten Sprossen berücksichtigt, denn die Energie ist nun invariant unter der Vertauschung von p_i und \tilde{p}_i (periodische Randbedingungen!). Im Raum der Variationswellenfunktionen gibt es noch weitere Symmetrien, da E_{Dim} Terme enthält, die linear in den Gewichten p_i, \tilde{p}_i sind (siehe Gleichung (B.23)). Dadurch werden die zwölf Parameter nur in ihrem Betrag vollständig festgelegt und nicht ihrem Vorzeichen, so daß die Energie unter bestimmten Vorzeichenänderungen der Parameter, wie z.B. $p_i \rightarrow -p_i$, invariant ist. Insgesamt gibt es 16 verschiedene Wahlmöglichkeiten für die Vorzeichen der zwölf Parameter, die alle auf dieselbe Energie führen. Diese 16 Transformationen lassen sich in vier elementare Transformationen zerlegen, die eine Gruppe bilden und somit die restlichen zwölf erzeugen. Diese vier Transformationen sind

$$\begin{aligned} p_i &\rightarrow -p_i, & \tilde{p}_i &\rightarrow -\tilde{p}_i, \\ p_4, p_5, \tilde{p}_4, \tilde{p}_5 &\rightarrow -p_4, -p_5, -\tilde{p}_4, -\tilde{p}_5, \\ p_1, p_2, p_5, \tilde{p}_1, \tilde{p}_2, \tilde{p}_4 &\rightarrow -p_1, -p_2, -p_5, -\tilde{p}_1, -\tilde{p}_2, -\tilde{p}_4. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Dabei sind die ersten drei Vorzeichenänderungen einfache unitäre Transformationen der Wellenfunktion, die den Zustand (2.32) selber nicht ändern²⁶. Die vierte Transformation ist eine unitäre Transformation zusammen mit einer Vertauschung der Zustände des oberen und unteren Holmes ($c \leftrightarrow d$, Invarianz des Systems unter einer Spiegelung).

In den folgenden beiden Abschnitten werden nun die Grundzustandsphasendiagramme des SZH-Modells und des erweiterten Modells mit der zusätzlichen Diagonalkopplung (1.25) unter Verwendung des dimerisierten Variationsansatzes (2.32) berechnet.

2.5.1 Spontane Dimerisierung im SZH-Modell

Wird das Phasendiagramm für das SZH-Modell mit der Kopplung $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ mit dem Ansatz (2.32) berechnet, so ergibt sich, daß in der Superspinphase *III* eine neue Phase *D* mit einer

²⁵Für diese Wahl der Gewichte stimmen das Dekuplett im Matrixprodukt $g_{2x}(\{p_i\})g_{2x+1}(\{\tilde{p}_i\})$ und das Dekuplett in $g_{2x+1}(\{\tilde{p}_i\})g_{2x+2}(\{p_i\})$ überein und auch jeweils ein Singulett in beiden Produkten.

²⁶Der Beweis der Unitarität dieser Transformationen kann analog zum Beweis der Singulett-Struktur des Ansatzes geführt werden (siehe Anhang B.1).

spontanen Dimerisierung auftritt (siehe Abb. 2.19). Die Amplituden p_6 und \tilde{p}_6 des Quintetts dominieren zwar weiterhin, aber die Gewichte auf den einzelnen Sprossen sind jetzt teilweise unterschiedlich²⁷. Dabei wird die Dimerisierung so definiert, daß die Phase als dimerisiert gilt, wenn es dort zwei Parameter p_i und \tilde{p}_i in der Wellenfunktion (2.32) auf benachbarten Sprossen gibt, die sich um mehr als 0.01 unterscheiden (die Gewichte sind alle auf Eins normiert!).

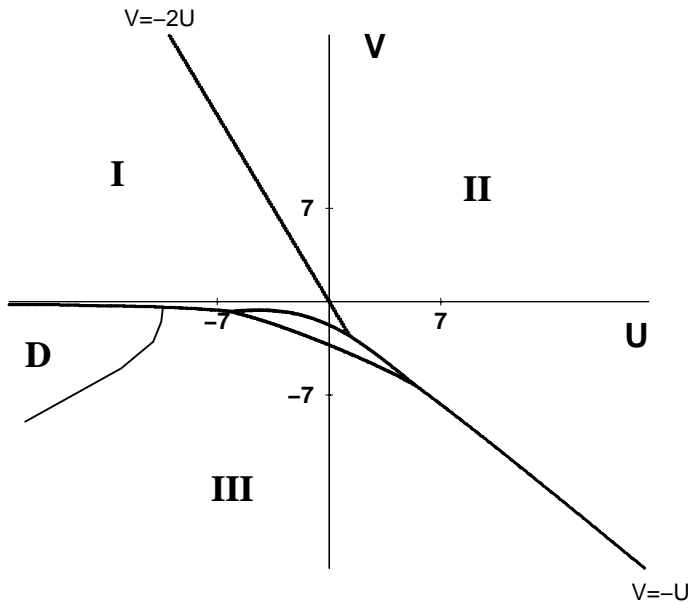


ABBILDUNG 2.19 - Phasendiagramm für $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ ($t_{\parallel} = 1$), berechnet mit dem dimerisierten Ansatz (2.32): die Phasengrenzen sind durch Vergleich der Amplituden der verschiedenen Multipletts festgelegt worden.

In dieser dimerisierten Phase sind dabei hauptsächlich die Gewichte der Quartetts p_4 und \tilde{p}_4 bzw. p_5 und \tilde{p}_5 extrem unterschiedlich und im Vergleich zu den Amplituden p_6 und \tilde{p}_6 , die diese Phase dominieren, auch recht groß ($\sim \pm 0.4$), so daß die Quartetts einen wesentlichen Anteil an dieser dimerisierten Struktur besitzen (zumindest bei mittleren Kopplungen!). Genauere Aussagen über den Grundzustand sind aber aufgrund der Struktur des Matrixproduktansatzes (2.32) nicht möglich. Auch die Berechnung verschiedener Zweipunktfunktionen in dieser Dimer-Phase und der anschließende Vergleich von $\langle O_1 O_{2x} \rangle$ und $\langle O_2 O_{2x} \rangle$ zeigt zwar die Existenz einer Dimerisierung an, aber nur sehr schwach (nur die Amplitude einiger Korrelationsfunktionen ändert sich leicht beim Übergang in die anderen, nicht-dimerisierten Phasen!)²⁸. Der Verlauf der Phasengrenzen zwischen den anderen Phasen ändert sich nicht bei der Verwendung des dimerisierten Ansatzes, so daß die bereits bekannte Struktur des Phasendiagramms erhalten bleibt (zum Vergleich siehe Abb. 2.3).

Im folgenden Abschnitt wird nun unter Verwendung des Ansatzes (2.32) das SZH-Modell mit der zusätzlichen Diagonalkopplung (1.25) im Bereich starker und mittlerer Kopplungen U und V untersucht, um dort das Auftreten von Phasen mit einer spontanen Dimerisierung zu bestimmen.

²⁷Die Phasengrenzen dieser dimerisierten Phase sind nur schematisch angegeben, sie entsprechen nur ungefähr dem realen Verlauf.

²⁸Zur Bestätigung des Auftretens einer dimerisierten Phase müßte das SZH-Modell auf vier Sprossen exakt diagonalisiert werden.

2.5.2 Diagonalkopplung

Das SZH-Modell mit dem Zusatzterm (1.25) ist bereits im Abschnitt 2.3.2.3 und im Abschnitt 2.4.3 eingehend untersucht worden. Es zeigte sich, daß der translationsinvariante Ansatz (1.39) zur Bestimmung des Grundzustandsphasendiagramms nicht geeignet ist, da die mit ihm berechnete Variationsenergie nicht die Invarianz unter der Transformation $c \leftrightarrow d$ berücksichtigte. Außerdem läßt sich der Grundzustand des Systems bei schwacher Kopplung nicht approximativ durch ein Matrixproduktansatz repräsentieren. Im folgenden wird daher das Modell jetzt mit dem dimerisierten Ansatz (2.32), der diese Invarianz $c \leftrightarrow d$ beinhaltet, bei starker und mittlerer Stärke der Kopplungskonstanten U und V genauer untersucht, um das Phasendiagramm und mögliche neue Phasen zu bestimmen.

Der Hüpfterm (1.25) mit der Amplitude t_D liefert folgenden Beitrag zur Variationenergie:

$$E_{t_D}/L = E_{p\tilde{p}}^{t_D} + E_{\tilde{p}p}^{t_D} \quad (2.35)$$

mit den einzelnen Energien auf zwei Sprossen

$$\begin{aligned} E_{p\tilde{p}}^{t_D} &\sim -E_{\tilde{p}p}^{t_D} \\ &\sim 4t_D \{ (p_4\tilde{p}_4 - p_5\tilde{p}_5) (-25p_6\tilde{p}_6 + p_1\tilde{p}_1 + p_2\tilde{p}_2 - p_3\tilde{p}_3) \\ &\quad + (p_4\tilde{p}_4 + p_5\tilde{p}_5) (-5p_6\tilde{p}_3 - 5p_3\tilde{p}_6 - p_2\tilde{p}_1 - p_1\tilde{p}_2) \\ &\quad + (p_4\tilde{p}_5 + p_5\tilde{p}_4) (5p_6\tilde{p}_2 + 5p_2\tilde{p}_6 + p_3\tilde{p}_1 + p_1\tilde{p}_3) \\ &\quad + (p_4\tilde{p}_5 - p_5\tilde{p}_4) (5p_6\tilde{p}_1 - 5p_1\tilde{p}_6 - p_2\tilde{p}_3 + p_3\tilde{p}_2) \}. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Die Energien sind dabei bis auf die Normierung und das Vorzeichen identisch (für die zugehörige Norm siehe Anhang B.3). Analog zur Gesamtenergie des SZH-Modells besteht die Energie des Hüpfterms aus zwei Teilen, damit eine mögliche Dimerisierung berücksichtigt wird (Invarianz unter $p_i \leftrightarrow \tilde{p}_i$).

Bei der Berechnung des Grundzustandsphasendiagramms für verschiedene Werte der Kopplungskonstanten t_D zeigt sich, daß der Variationsansatz die gleichen Resultate für $\pm t_D$ liefert, so daß die Invarianz des Systems unter der Vertauschung $c \leftrightarrow d$ richtig beschrieben wird. Auch die Struktur des Phasendiagramms ist z.B. bei der Kopplung $t_D = +4$ sehr ähnlich zum Phasendiagramm in Abbildung 2.3. Allerdings tritt nun in der gesamten Phase *III* eine dimerisierte Struktur auf, die zwar nicht in allen Bereichen so stark ausgeprägt ist wie in Phase *D* in Abbildung 2.19, aber dennoch die Translationsinvarianz des Systems bricht (die Abweichungen von z.B. p_4 und \tilde{p}_4 sind schon teilweise im Bereich von 0.01, der Grenze zur Festlegung der Dimerisierung). Die Frage nach der genauen Struktur in dieser Phase kann mit diesem Ansatz aber leider nicht beantwortet werden. Insgesamt ist der Variationsansatz (2.32) zur Bestimmung von Phasen spontaner Dimerisierung im SZH-Modell und dem durch den Hüpfterm (1.25) erweiterten System sehr gut geeignet, auch wenn der genaue Grundzustand dadurch nicht exakt bestimmt werden kann.

2.6 Symmetrien und Anregungen

In den vorherigen Abschnitten sind die Eigenschaften des SZH-Modells und verschiedener Erweiterungen im Grundzustand betrachtet worden. Die Kenntnis des Grundzustandes und seiner

Korrelationen reicht aber nicht aus, um das Verhalten des Systems bei tiefen Temperaturen zu beschreiben. Zur Bestimmung von meßbaren Größen bei endlichen Temperaturen, aber auch bei $T = 0$, werden die niedrigliegenden Anregungen über dem Grundzustand bzw. im Idealfall das komplette Spektrum des Modells benötigt. Aus dem Spektrum kann dann über die Zustandssumme die freie Energie berechnet werden und somit sämtliche relevanten thermodynamischen Größen. Das ist allerdings nur für sehr wenige (quasi-) eindimensionale Modelle möglich, z.B. für Systeme, die unter Verwendung des Betheansatzes exakt lösbar sind (siehe z.B. [57, 58, 59, 60, 61, 62]). Bei den Modellen, deren Grundzustand endlich korreliert ist, können dagegen nur in wenigen Fällen Anregungen exakt berechnet werden, so daß meistens Näherungen durchgeführt werden, um zumindest einige angeregte Zustände approximativ zu bestimmen (siehe z.B. [31, 32, 40, 63]).

Im folgenden wird nun versucht, auf der Linie $V = -2U$ mit $U < 0$ im Phasendiagramm des SZH-Modells mit der Kopplung $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ (siehe Abb. 2.3) angeregte Zustände zu berechnen. Der Grundzustand ist dort bei periodischen Randbedingungen exakt bekannt, und die Kenntnis möglicher niedrigliegender Anregungen würde weitere Aussagen über die physikalischen Vorgänge bei tiefen Temperaturen ermöglichen²⁹. Zur Berechnung der Anregungen wird dabei zuerst überprüft, ob nicht sogar eine höhere Symmetrie als die $SO(5)$ auf dieser Linie vorliegt, die die Untersuchungen vielleicht vereinfachen würde (siehe Abschnitt 2.6.1). Anschließend wird im Abschnitt 2.6.2 näher auf die Konstruktion von exakten Anregungen, aber auch auf Näherungsmethoden eingegangen.

2.6.1 Höhere Symmetrien in elektronischen Leitermodellen

Die Kenntnis aller Symmetrien eines Modells ermöglicht oftmals seine exakte Lösung, so daß es sehr wichtig ist, zunächst sämtliche Invarianzen eines Systems zu bestimmen. In der Praxis bedeutet dies, daß alle Operatoren berechnet werden müssen, die mit dem Hamiltonoperator kommutieren, und die Eigenzustände des Systems müssen dann auch Eigenzustände dieser Menge von Operatoren sein³⁰. In diesem Abschnitt wird nun versucht, sämtliche Symmetrien des SZH-Modells, insbesondere auf der Linie $V = -2U$, zu bestimmen, um zu exakten Lösungen zu gelangen. Dabei wird auch kurz auf den Punkt $J \neq 4(U + V)$ im Raum der Kopplungsparameter eingegangen, an dem die $SO(5)$ -Symmetrie explizit gebrochen wird.

Ausgangspunkt der Untersuchungen sind die acht fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $c_{\uparrow,\downarrow}^{\dagger}, d_{\uparrow,\downarrow}^{\dagger}, c_{\uparrow,\downarrow}, d_{\uparrow,\downarrow}$ und der Einheitsoperator $\mathbb{1}$ auf einer Sprosse. Diese neun Operatoren bilden zusammen mit sämtlichen Linearkombinationen, die unter Berücksichtigung der Antikommutatorrelationen zu unterschiedlichen Termen führen, 256 linear unabhängige Operatoren $O_i(x)$ auf einer Sprosse x . Diese 256 Operatoren $O_i(x)$ erzeugen eine Basis, d.h. jeder Operator $K(x)$ kann durch eine Linearkombination von ihnen erzeugt werden, insbesondere der lokale Hamiltonoperator h_x des SZH-Modells (siehe (2.26)). Im folgenden werden für verschiedene Werte der Kopplungen J, U und V sämtliche Operatoren berechnet, die mit h_x kommutieren, um die Symmetrien des Systems zu bestimmen. Zur Berechnung der kommutie-

²⁹Die Konstruktion von Anregungen in den anderen Bereichen des Phasendiagramms des SZH-Modells ist nicht sehr sinnvoll, da dort der Grundzustand nur näherungsweise bekannt ist.

³⁰Der Hamiltonoperator und die Operatoren der Symmetrie müssen simultan diagonalisierbar sein.

renden Operatoren wird dabei ein allgemeiner Ansatz der Form

$$K(x) = \sum_{i=1}^{256} \alpha_i O_i(x) \quad (2.37)$$

verwendet, um dann entsprechend aus dem Kommutator $[h_x, K(x)] = 0$ sämtliche Operatoren K mit den zugehörigen Entwicklungskoeffizienten α_i zu bestimmen.

Bei der Amplitude $J \neq 4(U+V)$ der Spinaustauschwechselwirkung auf einer Sprosse wird nun die $SO(5)$ -Invarianz des SZH-Modells gebrochen (U, V beliebig). In diesem Fall gibt es eine Menge von energetischen Entartungen der Zustände, die auf eine höhere Symmetrie hinweisen, und es lassen sich nun 48 Operatoren berechnen, die mit dem Hamiltonoperator h_x kommutieren. Dabei ist einer dieser Operatoren die Identität und drei weitere sind die Spinoperatoren $S^{x,y,z}$, die bereits eine $SU(2)$ -Symmetrie bilden. Zur Erzeugung von zusätzlichen Symmetrien muß es unter diesen restlichen 44 Operatoren welche geben, die mit h_x und den Spinoperatoren S^α vertauschen. Für diese Operatoren wird wieder ein Ansatz der Form $A(x) = \sum_{i=1}^{44} \beta_i K_i(x)$ mit den mit h_x kommutierenden Größen $K_i(x)$ verwendet. Sie werden dann aus dem Kommutator $[S^\alpha, A] = 0$ berechnet.

Insgesamt gibt es elf Operatoren A_i , die mit h_x und S^α vertauschen, von denen neun sogar eine Lie-Algebra bilden³¹. Wiederum können aus diesen neun durch Linearkombinationen drei Operatoren \tilde{A}_i berechnet werden, die mit allen anderen vertauschen, also eine $U(1) \times U(1) \times U(1)$ -Symmetrie bilden, während die restlichen sechs orthogonalen Operatoren sich nicht weiter einer bestimmten Symmetrie zuordnen lassen.

Insgesamt ergibt sich, daß am Punkt $J \neq 4(U+V)$ im Raum der Kopplungsparameter des SZH-Modells die $SO(5)$ -Symmetrie in eine $SU(2) \times (U(1))^3$ und eine weitere Symmetrie, die sich aber nicht weiter spezifizieren läßt³², gebrochen wird. Dieses Verfahren wird nun im folgenden auf den Fall $J = 4(U+V)$ angewendet.

Am $SO(5)$ -symmetrischen Punkt $J = 4(U+V)$ gibt es jetzt 60 Operatoren, die mit h_x vertauschen, wobei zehn die Generatoren $L_{ab}(x)$ der $SO(5)$ sind. Aus den restlichen 50 können nun, ganz analog zu $J \neq 4(U+V)$, sechs Operatoren berechnet werden, die mit L_{ab} und h_x kommutieren. Diese sechs Operatoren vertauschen auch untereinander. Es sind im einzelnen die beiden Casimiroperatoren der $SO(5)$ auf einer Sprosse (siehe Anhang A.1.2), die Identität, der Hamiltonoperator h_x und noch zwei Operatoren, die die Eigenzustände von h_x auf sich selbst abbilden. Außer der $SO(5)$ -Symmetrie gibt es folglich keine weitere Symmetrie im SZH-Modell. Selbst bei zusätzlichen Einschränkungen der Kopplungen U und V , wie beispielsweise auf der exakten Linie $V = -2U$ oder auf der Linie $V = -U$, wo sogar zusätzliche Entartungen im Spektrum auftreten, entstehen keine anderen Symmetrien. Somit ist es nicht möglich, das SZH-Modell auf der Linie $V = -2U$ mit $U < 0$ durch die Kenntnis weiterer Symmetrien eventuell exakt zu lösen bzw. das Problem zu vereinfachen. Im Abschnitt 2.6.2 werden daher andere Verfahren zur Bestimmung von Anregungen diskutiert.

³¹Die Menge der Operatoren ist bezüglich des Lie-Produktes abgeschlossen und die Jacobiidentität ist ebenfalls erfüllt.

³²Eine $SU(2)$ kann dabei aber ausgeschlossen werden, so daß es keine $SO(4)$ oder eine andere höhere Symmetrie in diesem System gibt.

2.6.2 Anregungen im SZH-Modell

In diesem Abschnitt wird versucht, Anregungen des SZH-Modells auf der Linie $V = -2U$ mit $U < 0$ zu konstruieren, um einen tieferen Einblick in die physikalischen Vorgänge zu bekommen. Dabei gibt es eine Vielzahl von Möglichkeiten zur Berechnung von Anregungen eines Systems, wenn keine exakte Lösung des Modells vorliegt. Im folgenden werden nun neben der Konstruktion exakter Anregungen auch Variationsverfahren diskutiert.

Eine Möglichkeit, angeregte Zustände zu berechnen, ist z.B. Operatoren zu konstruieren, die, angewendet auf den Grundzustand des Systems, weitere Eigenzustände mit größeren Energien erzeugen (wie die Leiteroperatoren beim harmonischen Oszillator). Dieses Verfahren bietet sich hier durch die Kenntnis des exakten Grundzustandes (2.6) an. Für einen solchen Leiteroperator A muß nun $[H, A] = \alpha A$ mit $\alpha > 0$ gelten, damit der Eigenzustand $A|\Psi_0\rangle$ des Hamiltonoperators H (siehe (2.25)) einen größeren Energieeigenwert als der Grundzustand $|\Psi_0\rangle$ besitzt. Wenn jetzt α eine kleine positive Größe ist, so sind die damit berechneten Anregungen bereits niedrigliegende Anregungen.

Der allgemeine Ansatz für einen solchen globalen Leiteroperator A lautet

$$A = \sum_{\alpha_1=1}^{256} \dots \sum_{\alpha_L=1}^{256} f_{\alpha_1 \dots \alpha_L} O_{\alpha_1}(x_1) \dots O_{\alpha_L}(x_L), \quad (2.38)$$

wobei die lokalen Operatoren $O_{\alpha_i}(x_i)$ eine Basis im Raum der Operatoren auf einer Sprosse x_i bilden (siehe Abschnitt 2.6.1) und $f_{\alpha_1 \dots \alpha_L}$ die zugehörigen Entwicklungskoeffizienten sind. Die Bedingung $[H, A] = \alpha A$ liefert nun sehr viele komplizierte Gleichungen für die Koeffizienten $f_{\alpha_1 \dots \alpha_L}$, die im allgemeinen Fall wahrscheinlich nicht gelöst werden können. Im folgenden werden daher einige Spezialfälle betrachtet, um eventuell Lösungen zu finden.

Der einfachste Ansatz für einen solchen Leiteroperator ist natürlich $A = A(x)$, d.h. der Operator wirkt nur lokal auf einer Sprosse x . Für diesen Operator $A(x)$ muß nun gelten

$$[h_x, A(x)] = \beta A(x) \quad \text{und} \quad [h_{x-1,x} + h_{x,x+1}, A(x)] = \gamma A(x) \quad (2.39)$$

mit $\alpha = \beta + \gamma$, wobei β und γ dabei beliebige reelle Zahlen sein können, z.B. auch Null (für h_x und $h_{x,x+1}$ siehe (2.26) und (2.27))³³. Aufgrund der Struktur des Hüpftermes $h_{x,x+1}$ zwischen benachbarten Sprossen ist der Kommutator $[h_{x,x+1}, A(x)]$ stets ein Operator der Form $\tilde{A}(x, x+1)$, der von einem Produkt von Operatoren auf den Sprossen x und $x+1$ abhängig ist, so daß die zweite Bedingung in (2.39) nicht erfüllt werden kann. Diese Behauptung kann sehr einfach mit dem allgemeinst möglichen Ansatz $A(x) = \sum_{i=1}^{256} \alpha_i O_i(x)$ für einen Operator auf einer Sprosse bewiesen werden (die $O_i(x)$ sind die Basisoperatoren, siehe (2.37)). Es gibt somit keine Möglichkeit, nur durch die Änderung eines Zustandes auf einer Sprosse x , z.B. ein Singulett durch einen Quartett- oder Quintettzustand zu ersetzen, eine globale Anregung zu erzeugen.

Die entsprechende Erweiterung dieses Ansatzes ist $A = \sum_{x=1}^L A(x)$, wobei nun die zweite Bedingung in (2.39) leicht modifiziert wird. Sie lautet jetzt

$$[h_{x-1,x} + h_{x,x+1}, A(x)] = \delta_1 A(x-1) + \delta_2 A(x) + \delta_3 A(x+1), \quad \sum_{i=1}^3 \delta_i = \gamma \quad (2.40)$$

³³Die anderen Kommutatoren verschwinden alle, da h_x und $h_{x,x+1}$ stets eine gerade Anzahl von Fermioperatoren enthalten.

aufgrund der Translationsinvarianz (es gelten periodische Randbedingungen!). Aber auch für diesen Ansatz gibt es aufgrund der Struktur des Hüpftermes keine exakte Lösung von (2.40), so daß es insgesamt keine Anregungen wie die Spinwellenanregungen bei reinen Spinsystemen gibt (zumindest im Bereich $U, V \sim t_{\perp}, t_{\parallel}$, bei starker Kopplung ist vielleicht eine näherungsweise Lösung möglich). Das ist ein entscheidender Unterschied zwischen diesem elektronischen Leitermodell und einem Spinleitermodell. Bei den Spinsystemen enthalten die Kopplungen zwischen benachbarten Sprossen bzw. Plätzen stets eine gerade Anzahl von Fermioperatoren bezüglich eines Platzes x , wie beispielsweise $h_{x,x+1} = \vec{S}_c(x)\vec{S}_c(x+1)$ mit $\vec{S}_c(x) = \frac{1}{2}c^{\dagger}(x)\vec{\sigma}c(x)$, so daß die Bedingung (2.40) oft exakt bzw. näherungsweise erfüllt werden kann, während für den Hüpfterm (2.27) mit jeweils einem Fermioperator auf einem Platz x keine Lösungen existieren³⁴.

Insgesamt ergibt sich, daß die Ansätze für globale Leiteroperatoren, die nur ein Operator auf einer Sprosse beinhalten, zur Konstruktion von Anregungen nicht geeignet sind. Gegenstand zukünftiger Untersuchungen müssen daher Ansätze sein, die Produkte von Operatoren wie z.B. $O_i(x_i)O_{i+1}(x_{i+1})$ beinhalten. Das würde hier allerdings zu weit führen, so daß im folgenden noch kurz auf die anderen Möglichkeiten zur Konstruktion von angeregten Zuständen eingegangen wird.

Einzelne exakte Anregungen lassen sich z.B. auch mit der Methode im Abschnitt 2.4.1 bestimmen, bei der aus der Kenntnis der Wellenfunktion auf zwei Sprossen auf den globalen Zustand bei periodischen Randbedingungen geschlossen werden konnte, wie beispielsweise beim Grundzustand (2.6). Es zeigt sich, daß es noch einen weiteren Zustand gibt, der Eigenzustand des SZH-Modells auf dieser Linie $V = -2U$ ist:

$$|\Psi_{+}\rangle \sim \prod_{x=1}^L \left(-c_{\uparrow}^{\dagger}d_{\downarrow}^{\dagger} + c_{\downarrow}^{\dagger}d_{\uparrow}^{\dagger} + d_{\uparrow}^{\dagger}d_{\downarrow}^{\dagger} + c_{\uparrow}^{\dagger}c_{\downarrow}^{\dagger} \right) (x) |0\rangle. \quad (2.41)$$

mit der zugehörigen Energie $E = L(5U/2 + 8)$ (siehe auch (3.26) im Abschnitt 3.2.2). Das ist übrigens auch ein Beispiel für einen globalen Leiteroperator, der aus einem Produkt von Operatoren besteht: Hier wird auf jeder Sprosse ein Singulett-Zustand durch einen anderen Singulett-Zustand ersetzt. Diese Anregung ist allerdings eine extensive Anregung und somit nicht relevant für das Verhalten des Systems bei tiefen Temperaturen.

Außer der Berechnung exakter Anregungen gibt es auch Variationsverfahren unter Verwendung von Matrixproduktansätzen, um Anregungen zumindest näherungsweise zu bestimmen [31, 32, 40, 63]. Allerdings basieren die meisten von ihnen auf der Ersetzung eines Zustandes auf einer Sprosse bzw. einem Platz durch einen anderen Zustand höherer Energie, um eine Anregung zu erzeugen. Bei der Diskussion der exakten Anregungen zeigte sich aber, daß solch ein Zustand nicht einmal näherungsweise ein Eigenzustand des SZH-Modells ist und somit dieses Verfahren hier nicht geeignet erscheint.

Eine weitere Möglichkeit ist die Betrachtung von Randanregungen im System wie z.B. für die Spinketten mit $S = 1$ [64, 65]. Dabei wird eine Spinkette mit offenen Randbedingungen betrachtet und im Matrixproduktansatz werden an den beiden Enden die Spin-1 Zustände durch Zustände mit Spin $S = \frac{1}{2}$ ersetzt. Allerdings ist es nicht klar, wie dieses Verfahren auf das SZH-Modell zu verallgemeinern ist bzw. wodurch die $SO(5)$ -Multipletts im Ansatz (1.39) an

³⁴Wahrscheinlich gibt es Anregungen dieser Art in $SO(5)$ -symmetrischen Leitermodellen mit anderen Kopplungen zwischen den Sprossen.

den Enden zu ersetzen sind, um bei dem System mit offenen Rändern solche Randanregungen beobachten zu können.

Insgesamt ergibt sich, daß es nur eine Anregung über dem Grundzustand des SZH-Modells auf der Linie $V = -2U$ gibt, die sich direkt als Matrixprodukt schreiben läßt (siehe Gleichung (2.41)). Alle anderen angeregten Zustände besitzen eine andere Struktur, so daß auch die Näherungsverfahren, die sich bisher bei Matrixproduktansätzen bewährt haben, hier zur Berechnung von Anregungen nicht geeignet sind. Gegenstand weiterer Untersuchungen sollten daher neben der Konstruktion exakter Anregungen mit der hier vorgestellten Methode durch Leiteroperatoren auch numerische Verfahren wie die exakte Diagonalisierung sein, um Aufschluß über das Spektrum zu erhalten.

KAPITEL 3

Elektronische Modelle mit exakten Grundzuständen

Im vorherigen Kapitel wurde das SZH-Modell unter Verwendung einer Variationswellenfunktion untersucht, um das Grundzustandsphasendiagramm bei mittlerer und schwacher Kopplung zu bestimmen. Dabei zeigte sich, daß der Ansatz (1.39) bei geeigneter Wahl der Variationsparameter sogar den exakten Grundzustand des Modells auf einer kompletten Linie $V = -2U$ mit $U < 0$ im Phasendiagramm in Abbildung 2.3 repräsentiert. Gerade in diesem physikalisch interessanten Bereich bei mittlerer Stärke der Kopplungskonstanten ($t_{\perp}, t_{\parallel} \sim U, V$) gibt es bei allen bekannten Modellen nur sehr wenige exakte Resultate, die Aufschluß über die genaue Struktur des jeweiligen Systems bzw. über die aus den Quantenfluktuationen entstandenen auftretenden Phasen¹ geben können. Auch versagen dort sämtliche Näherungsmethoden, die sonst für die Untersuchungen der Grundzustandsphasendiagramme verwendet werden, da es keine Punkte im Raum der Kopplungsparameter gibt, die sich für Entwicklungen eignen (keine schwachen Kopplungen!)². Die Kenntnis eines exakten Grundzustandes an einem Punkt des Phasendiagramms bei mittleren Kopplungen ist somit die einzige zuverlässige Möglichkeit, um mehr über die Struktur der zugehörigen Phase und über die physikalischen Eigenschaften des Systems dort zu erfahren. Bei den hier betrachteten elektronischen Leitersystemen mit einer $SO(5)$ -Symmetrie sind bisher, außer dem SZH-Modell mit der „exakten“ Linie $V = -2U$, $U < 0$ und dem effektiven Modell für die Superspinphase des SZH-Modells, keine weiteren Systeme bekannt, die exakte Grundzustände besitzen. Aus diesem Grund wird in den folgenden beiden Abschnitten die Fragestellung untersucht, ob es möglich ist, $SO(5)$ -invariante Systeme zu konstruieren, deren Grundzustände sich in einigen Bereichen des zugehörigen Phasendiagramms exakt berechnen lassen und wie diese neuen Modelle physikalisch motiviert werden können (z.B. als effektive Modelle bei Reduzierung des Hilbertraums in bestimmten Phasen, siehe Abschnitt 1.2).

Im Abschnitt 3.1 wird nun zunächst am Beispiel einer $SU(2)$ -symmetrischen, elektronischen Kette eine Methode zur Konstruktion von Systemen mit Matrixprodukt-Grundzuständen vorgestellt, die bereits zu beachtlichen Erfolgen bei sehr vielen Spinmodellen führte [12, 27, 28, 30, 33, 34, 36, 45]. Dabei wird eine große Klasse von neuen, interessanten, eindimensionalen elektronischen Systemen präsentiert, aber es werden auch bereits bekannte Modelle in diesem Rahmen diskutiert. Anschließend wird im Abschnitt 3.2 dieses Verfahren auf die zweibeinigen, $SO(5)$ -invarianten Leitermodelle verallgemeinert.

¹Alle betrachteten Phasenübergänge sind Quantenphasenübergänge bei Temperatur $T = 0$.

²Die Qualität dieser Näherungen läßt sich auch nur durch Vergleich mit exakten Resultaten prüfen und selbst dann können sie noch bei einigen Modellen zu falschen Aussagen führen: Z.B. liefert die Störungstheorie um den Punkt $U = 0$ beim eindimensionalen Hubbard-Modell [66] falsche Resultate.

3.1 Elektronische Ketten mit $SU(2)$ -Symmetrie

Es gibt eine Vielzahl von elektronischen Systemen mit einer $SU(2)$ -Symmetrie, deren Grundzustände exakt bekannt sind: das Hubbard-Modell [66, 67] oder das $t - J$ -Modell [15, 68, 69, 70], um nur zwei Beispiele zu nennen. Die exakte Lösbarkeit dieser beiden Modelle durch den Betheansatz ermöglicht dabei die Bestimmung der Spektren und die Berechnung interessanter thermodynamischer Größen, wie der freien Energie. Bei geeigneter Erweiterung der Modelle durch die Einführung zusätzlicher Wechselwirkungen können wiederum durch den Betheansatz exakt lösbare Modelle entstehen [71], aber auch Systeme, die endlich korrelierte Grundzustände besitzen wie z.B. das erweiterte Hubbardmodell von Nakamura et al. [42, 43]. Diese erweiterten Hubbardmodelle mit Matrixproduktgrundzuständen werden der Gegenstand der Untersuchungen in diesem Abschnitt sein, wobei hauptsächlich neue, interessante Hubbard-ähnliche Ketten präsentiert werden, die vielleicht als effektive Modelle zur Untersuchung von exotischen Phasen verwendet werden können.

Im Abschnitt 3.1.1 wird zuerst eine Matrixprodukt-Wellenfunktion definiert, die sämtliche vier elektronischen Zustände auf einem Platz berücksichtigt. Nach der Klassifizierung der Zustände in der Produktwellenfunktion auf zwei Plätzen gemäß der $SU(2)$ -Symmetrie wird anschließend in Abschnitt 3.1.2 eine Methode zur Konstruktion elektronischer Ketten mit exakten, endlich korrelierten Grundzuständen vorgestellt.

3.1.1 Der Matrixprodukt-Ansatz für ein eindimensionales, elektronisches System

In einem eindimensionalen, elektronischen System gibt es vier Zustände auf einem Gitterplatz x : das Vakuum $|0\rangle$, die beiden Einteilchenzustände $c_{\uparrow}^{\dagger}(x)|0\rangle = |\uparrow\rangle$, $c_{\downarrow}^{\dagger}(x)|0\rangle = |\downarrow\rangle$ und den doppelt besetzten Zustand $c_{\uparrow}^{\dagger}(x)c_{\downarrow}^{\dagger}(x)|0\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$ (in der üblichen Fockraumdarstellung). Die drei Generatoren der $SU(2)$ -Algebra sind in dieser Darstellung durch $S^{\alpha}(x) = \frac{1}{2}c_{\gamma}^{\dagger}(x)\sigma_{\gamma\delta}^{\alpha}c_{\delta}(x)$ mit den Paulimatrizen σ^{α} gegeben. Analog zur Definition des Casimiroperators für die $SO(5)$ -Algebra in Abschnitt 1.1 kann auch hier ein Operator $C(x) = \vec{S}^2(x)$ definiert werden³, um zusammen mit der Quantenzahl S^z die Zustände gemäß der $SU(2)$ klassifizieren zu können. Die vier Zustände auf einem Platz können nun in zwei Spin-Singulets ($|0\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle$) mit $C = 0, S^z = 0$ und ein Dublett ($|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$) mit $C = 3/4, S^z = \pm 1/2$ unterteilt werden. Die Definition der Generatoren der $SU(2)$ auf zwei Gitterplätzen ist gemäß den Regeln der Drehimpulskopplung $S^{\alpha}(x, y) = S^{\alpha}(x) + S^{\alpha}(y)$ und dementsprechend kann der Hilbertraum auch dort bezüglich der Casimir-Ladung $\vec{S}^2(x, y)$ und der z -Projektion des Spins diagonalisiert werden. Die Multipletts aus den 16 Produktzuständen auf zwei Plätzen sind

- Fünf Singulets ($C = 0, S^z = 0$)

$$\begin{aligned} |\Psi_{0,0}^{(1)}\rangle &= |0\rangle|0\rangle, & |\Psi_{0,0}^{(2)}\rangle &= |0\rangle|\uparrow\downarrow\rangle, & |\Psi_{0,0}^{(3)}\rangle &= |\uparrow\downarrow\rangle|0\rangle, \\ |\Psi_{0,0}^{(4)}\rangle &= |\uparrow\downarrow\rangle|\uparrow\downarrow\rangle, & |\Psi_{0,0}^{(5)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle). \end{aligned} \quad (3.1)$$

³ $\vec{S}^2(x)$ ist der Gesamtspin auf einem Platz mit Eigenwert $C = S(S + 1)$.

- Vier Dubletts ($C = \frac{3}{4}, S^z = \pm\frac{1}{2}$)

$$\begin{aligned}
|\Psi_{2,1}^{(1)}\rangle &= |0\rangle |\uparrow\rangle, & |\Psi_{2,2}^{(1)}\rangle &= |0\rangle |\downarrow\rangle, \\
|\Psi_{2,1}^{(2)}\rangle &= |\uparrow\rangle |0\rangle, & |\Psi_{2,2}^{(2)}\rangle &= |\downarrow\rangle |0\rangle, \\
|\Psi_{2,1}^{(3)}\rangle &= |\uparrow\downarrow\rangle |\uparrow\rangle, & |\Psi_{2,2}^{(3)}\rangle &= |\uparrow\downarrow\rangle |\downarrow\rangle, \\
|\Psi_{2,1}^{(4)}\rangle &= |\uparrow\rangle |\uparrow\downarrow\rangle, & |\Psi_{2,2}^{(4)}\rangle &= |\downarrow\rangle |\uparrow\downarrow\rangle.
\end{aligned} \tag{3.2}$$

- Ein Triplet ($C = 2, S^z = \pm 1, 0$)

$$|\Psi_{3,1}^{(1)}\rangle = |\uparrow\rangle |\uparrow\rangle, \quad |\Psi_{3,2}^{(1)}\rangle = |\downarrow\rangle |\downarrow\rangle, \quad |\Psi_{3,3}^{(1)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle). \tag{3.3}$$

Die Wellenfunktionen $|\Psi_{d,\alpha}^{(k)}\rangle(x, y)$ auf zwei Plätzen werden durch die Dimension d des zugehörigen Multipletts ($\alpha = 1, \dots, d$) und einem zusätzlichen Index k bestimmt, der die Multipletts gleicher Casimir-Ladung numeriert.

Nach der Klassifizierung sämtlicher Zustände auf einem bzw. zwei Plätzen kann nun mit dieser Basis ganz analog zu Abschnitt 1.3 eine $SU(2)$ -invariante Matrixprodukt-Wellenfunktion

$$|\Psi\rangle = \prod_{x=1}^L g_x(\{p_i\}) \tag{3.4}$$

mit der Matrix

$$g_x = \begin{pmatrix} p_1 |0\rangle + p_2 |\uparrow\downarrow\rangle & 0 & p_3 |\uparrow\rangle \\ 0 & p_1 |0\rangle + p_2 |\uparrow\downarrow\rangle & p_3 |\downarrow\rangle \\ p_3 |\downarrow\rangle & -p_3 |\uparrow\rangle & 0 \end{pmatrix} \tag{3.5}$$

definiert werden⁴, wobei g_x sämtliche Zustände auf einem Platz x mit den jeweiligen Gewichten p_i enthält. Ausgangspunkt bei der Konstruktion der Matrix g_x ist die Verknüpfung der vier Zustände auf einem Platz mit ihren, den Transformationseigenschaften entsprechenden Darstellungen der $SU(2)$ im (2×2) -dimensionalen Matrixraum, d.h. die beiden Singulets $|0\rangle$ und $|\uparrow\downarrow\rangle$ werden mit der (2×2) -dimensionalen Einheitsmatrix $\mathbf{1}$ kombiniert. Das Dublett, das wie ein Spinor transformiert, wird mit den zwei kartesischen Einheitsvektoren $\vec{e}_i, i = 1, 2$ des zwei-dimensionalen Raums verknüpft, wobei diese beiden Einheitsvektoren ebenfalls wie Spinoren unter den drei Generatoren der $SU(2)$ im Matrixraum, den drei Paulimatrizen, transformieren. Das Dublett bildet nun, wie bereits das Quartett bei der $SO(5)$ in (1.35), zusammen mit den Vektoren \vec{e}_i die dritte Spalte der Matrix (3.5) bzw. mit den transponierten Vektoren $(\vec{e}_i)^t$ bei etwas anderer Anordnung die dritte Zeile. Durch diese Konstruktion ist die $SU(2)$ -Symmetrie bei Bildung der Produkte der Matrizen g_x erhalten und die allgemeine Form des Ansatzes (3.4) ist

$$|\Psi\rangle = \left(\begin{array}{c|c} \left(A_3 \sum_{\mu=1}^3 \sigma_\mu |\Psi_{3,\mu}^{(1)}\rangle + \left(A_0^{(1)} |\Psi_{0,0}^{(1)}\rangle + A_0^{(2,1)} |\Psi_{0,0}^{(2)}\rangle \right) \mathbf{1} & \begin{array}{l} A_2^{(1)} |\Psi_{2,1}^{(1)}\rangle \\ A_2^{(1)} |\Psi_{2,2}^{(1)}\rangle \end{array} \\ \hline A_2^{(2)} |\Psi_{2,2}^{(2)}\rangle & A_2^{(2)} |\Psi_{2,1}^{(2)}\rangle \\ \hline & A_0^{(2,2)} |\Psi_{0,0}^{(2)}\rangle \end{array} \right) \tag{3.6}$$

⁴In dieser Form sind wieder offene Randbedingungen vorausgesetzt worden.

mit den Amplituden $A_d^{(k)}$ der einzelnen Multipletts und den globalen Vielteilchenwellenfunktionen $|\Psi_{d,\mu}^{(k)}\rangle$ (mögliche Phasenfaktoren werden in den Definitionen der Zustände absorbiert). Bereits bei der Bildung des Produktes zweier Matrizen $g_x g_{x+1}$ tritt das in der Matrix (3.6) enthaltene $SU(2)$ -Triplet $|\Psi_{3,\mu}\rangle$ zusammen mit den Paulimatrizen auf⁵. Bei weiteren Multiplikationen entstehen aufgrund dieser Struktur keine größeren Multipletts mehr, so daß die allgemeine Form von (3.6) erhalten bleibt. Jedes Tensorprodukt der Zustände läßt sich dann in diese Multipletts zerlegen, so daß es insgesamt im Ansatz (3.6) zwei Singulets, zwei Dubletts und ein Triplet gibt⁶ mit den zugehörigen Amplituden $A_d^{(k)}$, die genau wie die globalen Vielteilchenwellenfunktionen von den drei Parametern p_i abhängen.

Für die Untersuchungen im folgenden Abschnitt ist der Matrixproduktansatz mit offenen Randbedingungen weniger geeignet, so daß noch zusätzlich in (3.4) die Spur im Matrixraum genommen wird

$$|\Psi_0\rangle = \text{Spur} \left(\prod_{x=1}^L g_x(\{p_i\}) \right), \quad (3.7)$$

damit der Ansatz ein globales $SU(2)$ -Singulett bildet (entspricht nun periodischen Randbedingungen). Die Singulett-Struktur bei Spurbildung ist bereits direkt in (3.6) ersichtlich, da die Matrizen σ_μ spurlos sind und somit der einzige Beitrag von den beiden Singulets auf der Diagonalen kommt (für einen direkten Beweis unter Verwendung von globalen, unitären Transformationen siehe Anhang B.1.1). Diese Wellenfunktion ist der erste Matrixproduktansatz zur Untersuchung elektronischer Ketten, der trotz Berücksichtigung aller vier Zustände separat an jedem Platz nicht die Translationsinvarianz bricht. In dieser translationsinvarianten Form dient die Wellenfunktion (3.7) im folgenden Abschnitt 3.1.2 als Ausgangspunkt zur Konstruktion eindimensionaler, elektronischer Modelle mit exakten Grundzuständen.

3.1.2 Translationsinvariante elektronische Modelle mit exakten Grundzuständen

In diesem Abschnitt wird nun eine Methode vorgestellt, die es ermöglicht, bei Vorgabe einer beliebigen Matrixprodukt-Wellenfunktion ein Modell zu konstruieren, das genau diese Wellenfunktion als Grundzustand besitzt. Dieses Verfahren ist mit großem Erfolg bereits bei den eindimensionalen Spinmodellen und Spinleitern (siehe z.B. [11, 27, 28, 33]) angewendet worden und die Verallgemeinerung auf eindimensionale, elektronische Modelle läßt sich ohne Schwierigkeiten durchführen.

Ausgangspunkt ist ein allgemeiner Hamiltonoperator auf zwei benachbarten Plätzen, der invariant unter der Spin- $SU(2)$ Algebra ist. Er kann stets als Summe von Projektionsoperatoren auf alle Zustände (3.1)–(3.3) mit zugehörigen Koeffizienten $\lambda_d^{(k,l)}$ geschrieben werden

$$h_{x,x+1} = \lambda_3 \sum_{\mu=1}^3 |\Psi_{3,\mu}^{(1)}\rangle \langle \Psi_{3,\mu}^{(1)}| + \sum_{k,l=1}^4 \lambda_2^{(k,l)} \sum_{\mu=1}^2 |\Psi_{2,\mu}^{(k)}\rangle \langle \Psi_{2,\mu}^{(l)}| + \sum_{k,l=1}^5 \lambda_0^{(k,l)} |\Psi_{0,0}^{(k)}\rangle \langle \Psi_{0,0}^{(l)}|. \quad (3.8)$$

⁵Natürlich mit den Triplet-Wellenfunktionen auf zwei Plätzen.

⁶Im Ansatz gibt es neun globale Zustände, genau wie die Dimension der Matrix g_x es erlaubt.

Natürlich sind die Kopplungskonstanten $\lambda_d^{(k,l)}$ von der Wahl der Basis abhängig (in diesem Fall (3.1)–(3.3)), und wie bereits in Abschnitt 1.1 bei den Projektionsoperatoren der $SO(5)$ auf einer Sprosse in (1.11) gilt hier $\lambda_d^{(k,l)} = (\lambda_d^{(l,k)})^*$ aufgrund der Hermitizität von $h_{x,x+1}$. Der gesamte Hamiltonoperator $H = \sum_x h_{x,x+1}$ hat einen Matrixprodukt-Grundzustand $|\Psi_0\rangle$ der Form (3.7) mit Energieeigenwert Null unter der Voraussetzung, daß die folgenden beiden Bedingungen erfüllt sind (siehe z.B.[27]):

- Der Operator $h_{x,x+1}$ muß alle Zustände vernichten, die in den Matrixelementen des Produktes $g_x g_{x+1}$ enthalten sind.
- Alle anderen Eigenzustände von $h_{x,x+1}$ haben eine positive Energie.

Zur Konstruktion eines geeigneten Operators werden zunächst nach der Wahl eines Ansatzes für die Wellenfunktion alle in den Matrixelementen des Produktes $g_x g_{x+1}$ enthaltenen Multipletts bestimmt. Die im Ansatz (3.7) mit der Matrix (3.5) enthaltenen Multipletts sind bereits im vorherigen Abschnitt beschrieben worden, allerdings wird nun die genaue Darstellung in der Basis (3.1)–(3.3) benötigt. Das Triplet (3.3) ist auch genau in seiner ursprünglichen Form in der Wellenfunktion auf zwei Plätzen enthalten, die beiden Singulets und Dubletts bestehen allerdings aus Linearkombinationen der Zustände der alten Basis. In einer neuen Basis $|\tilde{\Psi}_{d,\mu}^{(k)}\rangle$ auf zwei Plätzen lassen sich diese vier Multipletts wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} |\tilde{\Psi}_{0,0}^{(4)}\rangle &\sim p_1 p_2 \left(|\Psi_{0,0}^{(2)}\rangle + |\Psi_{0,0}^{(3)}\rangle \right) + p_1^2 |\Psi_{0,0}^{(1)}\rangle + p_2^2 |\Psi_{0,0}^{(4)}\rangle, & |\tilde{\Psi}_{0,0}^{(5)}\rangle &= |\Psi_{0,0}^{(5)}\rangle, \\ |\tilde{\Psi}_{2,\mu}^{(3)}\rangle &\sim p_1 |\Psi_{2,\mu}^{(1)}\rangle + p_2 |\Psi_{2,\mu}^{(3)}\rangle, & |\tilde{\Psi}_{2,\mu}^{(4)}\rangle &\sim p_1 |\Psi_{2,\mu}^{(2)}\rangle + p_2 |\Psi_{2,\mu}^{(4)}\rangle. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Die übrigen Singulets sind in dieser Darstellung

$$|\tilde{\Psi}_{0,0}^{(1)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\Psi_{0,0}^{(2)}\rangle - |\Psi_{0,0}^{(3)}\rangle \right), \quad (3.10)$$

$$|\tilde{\Psi}_{0,0}^{(2)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{p_1^4 + p_2^4}} \left(p_2^2 |\Psi_{0,0}^{(1)}\rangle - p_1^2 |\Psi_{0,0}^{(4)}\rangle \right), \quad (3.11)$$

$$|\tilde{\Psi}_{0,0}^{(3)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{p_1^4 + p_2^4}}{p_1^2 + p_2^2} \left(|\Psi_{0,0}^{(2)}\rangle + |\Psi_{0,0}^{(3)}\rangle - \frac{2p_1 p_2}{p_1^4 + p_2^4} \left(p_1^2 |\Psi_{0,0}^{(1)}\rangle + p_2^2 |\Psi_{0,0}^{(4)}\rangle \right) \right), \quad (3.12)$$

und die beiden Dubletts, die die Basis auf zwei Sprossen komplettieren, sind

$$|\tilde{\Psi}_{2,\mu}^{(1)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{p_1^2 + p_2^2}} \left(p_2 |\Psi_{2,\mu}^{(1)}\rangle - p_1 |\Psi_{2,\mu}^{(3)}\rangle \right), \quad (3.13)$$

$$|\tilde{\Psi}_{2,\mu}^{(2)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{p_1^2 + p_2^2}} \left(p_2 |\Psi_{2,\mu}^{(2)}\rangle - p_1 |\Psi_{2,\mu}^{(4)}\rangle \right). \quad (3.14)$$

Der Hamiltonoperator, dessen Grundzustand durch den Ansatz (3.7) gegeben ist (mit Energie Null), kann jetzt durch Verwendung der Projektionsoperatoren auf diese fünf im Ansatz nicht enthaltenen Multipletts leicht konstruiert werden

$$h_{x,x+1} = \sum_{k,l=1}^2 \tilde{\lambda}_2^{(k,l)} \sum_{\mu=1}^2 |\tilde{\Psi}_{2,\mu}^{(k)}\rangle \langle \tilde{\Psi}_{2,\mu}^{(l)}| + \sum_{k,l=1}^3 \tilde{\lambda}_0^{(k,l)} |\tilde{\Psi}_{0,0}^{(k)}\rangle \langle \tilde{\Psi}_{0,0}^{(l)}|, \quad (3.15)$$

wobei die Koeffizienten $\tilde{\lambda}$ nun die durch die andere Basiswahl modifizierten Kopplungskonstanten sind. Dieser Operator vernichtet die im Matrixprodukt enthaltenen Zustände (3.3) und (3.9), d.h. sie haben den Energieeigenwert $E = 0$. Werden die Kopplungskonstanten $\tilde{\lambda}_d^{(k,l)}$ in (3.15) so festgelegt, daß die Matrizen $\tilde{\lambda}_0$ und $\tilde{\lambda}_2$ positiv definit sind, so besitzen alle anderen Zustände positive Energieeigenwerte und folglich wird (3.7) der Grundzustand des Systems. Jetzt können je nach Wahl der Parameter p_i im Ansatz ganze Klassen von Hamiltonoperatoren mit exakten Grundzuständen konstruiert werden, die vielleicht als effektive Modelle geeignet sind, um viele neue, interessante Phasen in eindimensionalen, elektronischen Systemen mit einer $SU(2)$ -Symmetrie zu untersuchen.

Der Nachteil dieser Methode ist, daß es sehr viele Möglichkeiten für die geeignete Wahl dieser Koeffizientenmatrizen gibt, die wenigsten aber physikalisch relevante Hamiltonoperatoren liefern (siehe z.B. Anhang B.4). Es ist auch nicht offensichtlich, wie die Parameter p_i und die Kopplungen zu wählen sind, um direkt interessante Modelle zu konstruieren.

Zur weiteren Untersuchung wird nun zunächst die Anzahl der frei wählbaren Parameter p_i reduziert, um durch diese Beschränkung der Freiheitsgrade einen konstruktiven Weg zur Wahl geeigneter Kopplungen zu finden. Dabei wird jetzt der freie Parameter p_1 in (3.7) auf den Wert Null gesetzt, so daß sich die im Ansatz nicht enthaltenen Zustände stark vereinfachen. In diesem Fall sind die Multipletts $|\Psi_{0,0}^{(4)}\rangle$, $|\Psi_{0,0}^{(5)}\rangle$, $|\Psi_{2,\mu}^{(3)}\rangle$ und $|\Psi_{2,\mu}^{(4)}\rangle$ direkt in dieser Form im Matrixprodukt enthalten und nicht mehr als Linearkombinationen (siehe Gleichung (3.9)). Der zugehörige Hamiltonoperator (3.15) lautet

$$h_{x,x+1} = \sum_{k,l=1}^2 \lambda_2^{(k,l)} \sum_{\mu=1}^2 |\Psi_{2,\mu}^{(k)}\rangle \langle \Psi_{2,\mu}^{(l)}| + \sum_{k,l=1}^3 \lambda_0^{(k,l)} |\Psi_{0,0}^{(k)}\rangle \langle \Psi_{0,0}^{(l)}|. \quad (3.16)$$

Ausgehend von diesem Hamiltonoperator können verschiedenste $SU(2)$ -invariante, elektronischen Ketten konstruiert werden, die den Ansatz (3.7) mit $p_1 \equiv 0$ als Grundzustand besitzen. Ein bekanntes Beispiel ist ein von Nakamura et al. vorgestelltes System [42, 43]

$$\begin{aligned} H_{\text{Nak}} = & -t \sum_x B_{x,x+1} + U \sum_x n_{\uparrow}(x) n_{\downarrow}(x) + V \sum_x n(x) n(x+1) \\ & + W \sum_x (B_{x,x+1})^2 + X \sum_{x,s} B_{x,x+1,s} (n_{-s}(x) + n_{-s}(x+1)) \\ & + X' \sum_{x,s} B_{x,x+1,s} (n_{-s}(x) n_{-s}(x+1)) \end{aligned} \quad (3.17)$$

mit

$$B_{xys} := c_s^{\dagger}(x) c_s(y) + c_s^{\dagger}(y) c_s(x), \quad \text{und} \quad B_{xy} := \sum_s B_{xys}. \quad (3.18)$$

Bei der Wahl der Kopplungen $W = U = V = 0$ und $X = -X' = t$ entspricht es dem Modell (3.16) mit den Koeffizientenmatrizen

$$\lambda_0 = 0 \quad \text{und} \quad \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & -t \\ -t & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Der Zustand (3.7) mit $p_1 = 0$ ist zwar ein Eigenzustand dieses Systems, aber nicht notwendigerweise der Grundzustand, da die Matrizen (3.19) für $t > 0$ nicht positiv definit sind. Wird allerdings das Modell (3.17) mit dem Term

$$H_c = (t + c) [1 - (n_{c\uparrow}(x) + n_{c\downarrow}(x) - n_{c\uparrow}(x)n_{c\downarrow}(x)) (n_{c\uparrow}(y) + n_{c\downarrow}(y) - n_{c\uparrow}(y)n_{c\downarrow}(y))](3.20)$$

erweitert (t, c sollen positiv sein), so treten in den Matrizen (3.19) zusätzliche diagonale Kopplungskonstanten $\lambda_d^{(k,k)}$ auf, so daß insgesamt für die Koeffizientenmatrizen des neuen Modells $H_{\text{Nak}} + H_c$ gilt

$$\lambda_0 = \begin{pmatrix} t + c & 0 & 0 \\ 0 & t + c & 0 \\ 0 & 0 & t + c \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \lambda_2 = \begin{pmatrix} t + c & -t \\ -t & t + c \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

Sie sind positiv definit (mit Eigenwerten $t + c$ bzw. $c, 2t + c$ bei $t, c > 0$) und der Grundzustand dieses neuen Systems $H_{\text{Nak}} + H_c$ ist durch den Ansatz (3.7) mit $p_1 = 0$ gegeben. Weiterhin können auch sämtliche Grundzustandskorrelationsfunktionen über eine Transfermatrixmethode bestimmt werden (analog zur $SO(5)$ -Leiter in Abschnitt 2.2) und im Anhang B.2.2 sind für den hier betrachteten Ansatz (3.7) für allgemeine Werte von p_i ($p_1 \neq 0$) einige interessante Korrelationen bestimmt worden.

Dieses Modell $H_{\text{Nak}} + H_c$ ist natürlich nur auf eine sehr spezielle Wahl der Kopplungskonstanten bei $p_1 = 0$ zurückzuführen. Es gibt noch viele weitere Möglichkeiten, um die positive Definitheit der Matrizen λ_0 und λ_2 zu erreichen, damit die Wellenfunktion (3.7) den Grundzustand repräsentiert. Die Behandlung der anderen Möglichkeiten für die Einschränkungen der Kopplungen würde allerdings hier viel zu weit führen, so daß nur ein paar allgemeine Anmerkungen dazu gemacht werden.

Es zeigt sich, daß schon bei dieser einfachen Festlegung $p_1 = 0$ bei geschickter Wahl der Kopplungen⁷ physikalisch interessante Systeme erzeugt werden können, deren Grundzustand exakt bekannt ist. Bei der Verallgemeinerung des Ansatzes auf $p_1 \neq 0$ ist eine entsprechende Wahl der Koeffizientenmatrizen auch möglich, z.B. können reine Diagonalmatrizen mit positiven Eigenwerten verwendet werden (siehe Anhang B.4). Die so entstehenden Hamiltonoperatoren sind aufgrund der noch verbliebenen vielen Freiheitsgrade sehr komplex und müssen noch eingehender untersucht werden.

Insgesamt ergibt sich, daß es eine sehr große Menge von eindimensionalen, elektronischen Systemen gibt, die endlich korrelierte Grundzustände besitzen. Bisher waren nur sehr wenige elektronische Ketten mit dieser Eigenschaft bekannt, die Forschung konzentrierte sich hauptsächlich auf die im Rahmen des Betheansatzes exakt lösbaren Modelle. Außerdem zeigte sich, daß die verwendete Methode mit den Projektionsoperatoren sehr gut geeignet ist, um Modelle mit vorgegebenen Grundzuständen zu konstruieren. Inwieweit diese Modelle dann physikalische Systeme beschreiben können, z.B. direkt oder als effektive Modelle in einigen Phasen eines Systems, ist von der geeigneten Wahl der Kopplungen und der freien Parameter im Ansatz abhängig.

Im nächsten Abschnitt wird das hier vorgestellte Verfahren auf die $SO(5)$ -invarianten Leitermodelle angewendet, und es wird die Fragestellung untersucht, unter welchen Bedingungen bzw. bei welchen $SO(5)$ -symmetrischen Kopplungen Grundzustände in Matrixproduktform bevorzugt werden.

⁷In diesem Fall durch eine entsprechende Anpassung an bereits bekannte Systeme wie das Nakamura-Modell.

3.2 $SO(5)$ -symmetrische Hamiltonoperatoren mit exakten Grundzuständen

In diesem Abschnitt wird die Methode zur Konstruktion von eindimensionalen, elektronischen Modellen mit exakten Grundzuständen auf elektronische Leitermodelle mit einer $SO(5)$ -Symmetrie verallgemeinert, um mehr über diese Leitersysteme gerade im unzugänglichen Bereich bei mittleren Kopplungsstärken zu erfahren und um vielleicht andere, physikalisch interessante Modelle zu erzeugen, die geeignet sind, bestimmte Materialien zu beschreiben. Außerdem können an diesen exakten Modellen die vielen numerischen Verfahren zur Untersuchung von Phasendiagrammen bezüglich ihrer Güte getestet werden. Dabei wird auch die Frage geklärt, unter welchen Bedingungen bzw. bei welchen $SO(5)$ -symmetrischen Kopplungen Grundzustände in Matrixproduktform bevorzugt werden.

Ausgangspunkt der Untersuchungen ist ein allgemeiner $SO(5)$ -symmetrischer Hamiltonoperator auf zwei benachbarten Sprossen

$$\begin{aligned}
 h_{x,x+1} = & \sum_{k,l=1}^4 \lambda_{16}^{(k,l)} \sum_{\mu=1}^{16} \hat{P}_{16,\mu}^{k,l} + \sum_{\mu=1}^{14} \lambda_{14} \hat{P}_{14,\mu} + \sum_{k,l=1}^5 \lambda_{10}^{(k,l)} \sum_{\mu=1}^{10} \hat{P}_{10,\mu}^{k,l} \\
 & + \sum_{k,l=1}^{10} \lambda_5^{(k,l)} \sum_{\mu=1}^5 \hat{P}_{5,\mu}^{k,l} + \sum_{k,l=1}^{16} \lambda_4^{(k,l)} \sum_{\mu=1}^4 \hat{P}_{4,\mu}^{k,l} + \sum_{k,l=1}^{14} \lambda_0^{(k,l)} \hat{P}_{0,0}^{k,l}, \quad (3.22)
 \end{aligned}$$

wobei $\hat{P}_{d,\mu}^{k,l} = |\Psi_{d,\mu}^{(k)}\rangle\langle\Psi_{d,\mu}^{(l)}|$ die Projektionsoperatoren auf alle möglichen $SO(5)$ -Multipletts sind (insgesamt gibt es 50 Multipletts, siehe Abschnitt 1.2). Die Zustände $|\Psi_{d,\mu}^{(k)}\rangle$ sind Wellenfunktionen auf zwei Sprossen, k und l kennzeichnen das Multiplett, μ die Zustände innerhalb des Multipletts und d ist die Dimension der zugehörigen irreduziblen Darstellung. Die Hermitizität des Hamiltonoperators $h_{x,x+1}$ erfordert $\lambda_d^{(k,l)} = (\lambda_d^{(l,k)})^*$, wodurch insgesamt 322 frei wählbare Parameter verbleiben. Zur Konstruktion von Systemen mit exakten Grundzuständen wird jetzt eine Matrixprodukt-Wellenfunktion vorgegeben. Es wird dann versucht, die freien Parameter in (3.22) so anzupassen, daß dieser Zustand die niedrigste Energie besitzt. In den folgenden beiden Abschnitten werden zur Lösung dieses Problems zwei Ansätze untersucht, der erste beruht auf der Verallgemeinerung der im vorherigen Abschnitt vorgestellten Methode (siehe 3.2.1), während der zweite Ansatz die Anzahl der freien Parameter in (3.22) stark einschränkt (siehe Abschnitt 3.2.2).

3.2.1 Matrixprodukt-Grundzustände

Zur Konstruktion von Systemen mit exakten Grundzuständen wird nun unter der Verwendung des Verfahrens aus 3.1.2 die in Abschnitt 1.3 definierte Wellenfunktion (1.39) verwendet. Dazu werden wieder sämtliche, in den Matrixelementen des Produktes zweier Matrizen $g_x g_{x+1}$ enthaltenen Multipletts benötigt, um über die Definition der Projektionsoperatoren auf die nicht enthaltenen Zustände alle möglichen Hamiltonoperatoren konstruieren zu können, bei denen der Ansatz (1.39) den Energieeigenwert Null besitzt. Die in $g_x g_{x+1}$ enthaltenen Multipletts sind bereits in Abschnitt 1.3 bestimmt worden: Es gibt zwei $SO(5)$ -Singulets ($|\tilde{\Psi}_{0,0}^{(13)}\rangle, |\tilde{\Psi}_{0,0}^{(14)}\rangle$), zwei

Quartetts ($|\tilde{\Psi}_{4,\mu}^{(15)}\rangle, |\tilde{\Psi}_{4,\mu}^{(16)}\rangle$), ein Quintett ($|\tilde{\Psi}_{5,\mu}^{(10)}\rangle$) und ein Dekuplett ($|\tilde{\Psi}_{10,\mu}^{(5)}\rangle$). Die Zustände innerhalb dieser Multipletts sind komplexe Linearkombinationen der Tensorprodukte der Basiszustände einzelner Sprossen und zusammen mit den Zuständen der restlichen 44 Multipletts bilden sie eine Basis des Hilbertraums auf zwei Sprossen (in Analogie zu der Basis in (3.9) – (3.14) bei den $SU(2)$ -symmetrischen elektronischen Ketten). Der allgemeinste Operator, der die Wellenfunktion (1.39) vernichtet, besteht folglich aus einer Summe von Projektionsoperatoren auf diese 44 Multipletts. Er lautet

$$\begin{aligned} h_{x,x+1} = & \sum_{k,l=1}^4 \tilde{\lambda}_{16}^{(k,l)} \sum_{\mu=1}^{16} \hat{P}_{16,\mu}^{k,l} + \sum_{\mu=1}^{14} \tilde{\lambda}_{14} \hat{P}_{14,\mu} + \sum_{k,l=1}^4 \tilde{\lambda}_{10}^{(k,l)} \sum_{\mu=1}^{10} \hat{P}_{10,\mu}^{k,l} \\ & + \sum_{k,l=1}^9 \tilde{\lambda}_5^{(k,l)} \sum_{\mu=1}^5 \hat{P}_{5,\mu}^{k,l} + \sum_{k,l=1}^{14} \tilde{\lambda}_4^{(k,l)} \sum_{\mu=1}^4 \hat{P}_{4,\mu}^{k,l} + \sum_{k,l=1}^{12} \tilde{\lambda}_0^{(k,l)} \hat{P}_{0,0}^{k,l}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

mit $\hat{P}_{d,\mu}^{k,l} = |\tilde{\Psi}_{d,\mu}^{(k)}\rangle\langle\tilde{\Psi}_{d,\mu}^{(l)}|$ und den an die Basis angepaßten Kopplungskonstanten $\tilde{\lambda}_d^{(k,l)}$. Diese Projektionsoperatoren besitzen eine sehr komplizierte Struktur, die nur in einigen Ausnahmefällen zu einfachen Termen führt, z.B. ist ein Projektionsoperator auf ein nicht enthaltenes $SO(5)$ -Singulett

$$\begin{aligned} & \left[-c_{\uparrow}^{\dagger}(x)c_{\uparrow}^{\dagger}(y)c_{\downarrow}^{\dagger}(x)c_{\downarrow}^{\dagger}(y)d_{\uparrow}(x)d_{\uparrow}(y)d_{\downarrow}(x)d_{\downarrow}(y) + H.c. \right. \\ & \left. + (n_{d\uparrow}(x)n_{d\uparrow}(y)n_{d\downarrow}(x)n_{d\downarrow}(y)N_c(x)N_c(y) + (c \leftrightarrow d)) \right] \end{aligned} \quad (3.24)$$

mit

$$N_{\alpha}(x) = 1 - n_{\alpha\uparrow}(x) - n_{\alpha\downarrow}(x) + n_{\alpha\uparrow}(x)n_{\alpha\downarrow}(x), \quad \alpha \in \{c, d\}, \quad (3.25)$$

dargestellt in Elektronerzeugungs- und Vernichtungsoperatoren.

Die in (3.23) enthaltenen Projektionsoperatoren \hat{P} vernichten alle in $g_x g_{x+1}$ vorhandenen Zustände (entspricht dem Energieeigenwert Null). Damit nun die übrigen Zustände eine höhere Energie als die Wellenfunktion (1.39) besitzen, d.h. positive Energieeigenwerte haben, müssen die Matrizen mit den Kopplungskonstanten positiv definit gewählt werden. Insgesamt gibt es im Hamiltonoperator (3.23) 249 Parameter $\tilde{\lambda}_d^{(k,l)}$, die nur durch die positive Definitheit eingeschränkt werden und zusätzlich sechs freie Parameter p_i , die die Gewichte der einzelnen Multipletts auf einer Sprosse festlegen und die in den Zuständen $|\tilde{\Psi}_{d,\mu}^{(k)}\rangle$ vorkommen (analog zu den Zuständen (3.9) – (3.14)). Eine Restriktion der Parameter p_i wie in Abschnitt 3.1.2 führt hier aufgrund der sehr großen Menge an freien Kopplungskonstanten nicht zu einfachen, physikalischen Systemen. Die Wahlmöglichkeiten sind noch zu groß, um konstruktiv vorgehen zu können. Auch die Einschränkung im Ansatz auf einen einzigen Parameter $p_i \neq 0$ und die Wahl von reinen Diagonalmatrizen mit positiven Eigenwerten für die Kopplungskonstanten liefert Hamiltonoperatoren mit einer sehr großen Anzahl an Termen, die sich physikalisch schwer motivieren lassen.

Aus diesem Grund wird im nächsten Abschnitt ein etwas anderer Zugang verwendet, bei dem die benachbarten Sprossen nur durch den Hüpfterm (1.21) gekoppelt sind und die Kopplungen auf einer Sprosse frei wählbar sind. Dadurch wird der Parameterraum stark eingeschränkt und auch der Matrixproduktansatz (1.39) wird nicht unbedingt der Grundzustand sein, aber es können gezielt Systeme mit exakten Grundzuständen konstruiert werden.

3.2.2 Einschränkung der Kopplungen

Im folgenden wird zur Konstruktion von Systemen mit exakten Grundzuständen die Anzahl der freien Parameter in (3.23) sehr stark reduziert, und zwar wird von allen möglichen Kopplungen zwischen zwei Sprossen nur das Hüpfen (1.21) einzelner Elektronen zwischen benachbarten Plätzen einer jeden Kette betrachtet. Es zeigt sich, daß es bei Diagonalisierung dieser Kopplung (analog zur exakten Lösung in Abschnitt 2.4) zwei mögliche Zustände bei den 14 $SO(5)$ -Singulets auf zwei Sprossen gibt, die als einfaches Produkt von Zuständen einer Sprosse geschrieben werden können. Diese beiden Zustände sind

$$|\Psi_{\pm}\rangle \sim \prod_{x=1}^2 \left(-c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} + c_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} \pm d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} \pm c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\downarrow}^{\dagger} \right) (x) |0\rangle. \quad (3.26)$$

Sie sind auch Eigenzustände des SZH-Modells auf einer Linie $V = -2U$ im Phasendiagramm in Abbildung 2.3, wobei, wie bereits in Abschnitt 2.4 gezeigt wurde, der Zustand mit $|\Psi_{-}\rangle$ dort sogar der Grundzustand des Systems für allgemeine Systemgrößen L ist (siehe Gleichung (2.31)). Außerdem entsprechen sie der Wahl $p_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}, p_2 = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}$ und $p_{i \geq 3} \equiv 0$ im Matrixproduktansatz (1.39). Es ist nicht ganz ausgeschlossen, daß es noch weitere Zustände gibt, die faktorisieren. Bei diesen Wellenfunktionen müßten aber die Multipletts einer jeden Sprosse in anderen Strukturen als den hier betrachteten Matrizen g_x angeordnet sein, um im Produkt eine der restlichen, relativ komplizierten zwölf Singulets zu bilden⁸. Die beiden Zustände (3.26) werden nun im folgenden der Ausgangspunkt zur Konstruktion von Modellen mit exakten Grundzuständen sein.

Jeder Hamiltonoperator, bei dem die Sprossen nur durch den Hüpfterm (1.21) gekoppelt sind, besitzt – wie soeben bewiesen – bei geeigneter Wahl der Kopplungen auf den einzelnen Sprossen höchstens zwei Eigenzustände, die sich als einfaches Tensorprodukt von Wellenfunktionen der Sprossen schreiben lassen (die Zustände (3.26)). Er hat die allgemeine Form

$$H_{\text{Exakt}} = \sum_{x=1}^L H_{x,x+1}, \quad H_{x,x+1} = \frac{h_x}{2} + h_{x,x+1} + \frac{h_{x+1}}{2} \quad (3.27)$$

bei periodischen Randbedingungen (siehe Gleichung (2.25)), wobei $h_{x,x+1}$ der Hüpfterm (1.21) ist und in h_x sämtliche $SO(5)$ -invarianten Kopplungen auf einer Sprosse enthalten sind. Diese Kopplungen sind

$$h_x = \lambda_5 \sum_{\mu=1}^5 |\Psi_{5,\mu}^{(1)}\rangle \langle \Psi_{5,\mu}^{(1)}| + \sum_{k,l=1}^2 \lambda_4^{(k,l)} \sum_{\mu=1}^4 |\Psi_{4,\mu}^{(k)}\rangle \langle \Psi_{4,\mu}^{(l)}| + \sum_{k,l=1}^3 \lambda_0^{(k,l)} |\Psi_{0,0}^{(k)}\rangle \langle \Psi_{0,0}^{(l)}| \quad (3.28)$$

mit den Projektionsoperatoren auf die verschiedenen lokalen Multipletts $|\Psi_{d,\mu}^{(k)}\rangle(x)$ und den Kopplungskonstanten $\lambda_d^{(k,l)}$ (siehe Gleichung (1.11) in Abschnitt 1.1 für nähere Details). Damit einer der beiden Zustände (3.26) der Grundzustand des Systems (3.27) werden kann, müssen die Kopplungskonstanten λ_0, λ_4 und λ_5 entsprechend bestimmt werden. Werden z.B. nur die Kopplungen im Singulett-Bereich betrachtet (d.h. $\lambda_4, \lambda_5 \equiv 0$), so werden drei der sechs freien

⁸Die Zustände in den anderen Multipletts mit $C > 0$ auf zwei Sprossen sind noch komplizierter und können in bezug auf eine mögliche Faktorisierung vernachlässigt werden.

Parameter in der Matrix λ_0 (hermitesch!) durch die Forderung festgelegt, daß eine der beiden Wellenfunktionen (3.26) ein Eigenzustand des Systems ist. Die restlichen drei Parameter bestimmen dann die Energien der verschiedenen Multipletts und werden so angepaßt, daß mindestens ein Zustand in (3.26) die niedrigste Energie besitzt. Ein relativ einfaches System mit einem exakten Grundzustand ergibt sich aus der Wahl

$$l_0 = \delta \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \lambda_4 \equiv \lambda_5 \equiv 0 \quad (3.29)$$

für die verschiedenen Kopplungskonstanten. Sie führt auf das Modell

$$H_{\text{Exakt}} = \sum_{x=1}^L \delta \left\{ \left(\frac{1}{6} \vec{S}_c \vec{S}_d - \frac{2}{3} (\vec{S}_c \vec{S}_d)^2 \right) + \frac{1}{2} (c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow} + H.c.) \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \left[(n_{c\downarrow} - n_{d\downarrow})^2 (c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + H.c.) + \uparrow \leftrightarrow \downarrow \right] \right\} \\ - 2 \sum_{\langle x,y \rangle} [c_{\sigma}^{\dagger}(x) c_{\sigma}(y) + d_{\sigma}^{\dagger}(x) d_{\sigma}(y) + H.c.] \quad (3.30)$$

mit $t_{\parallel} = 1$, das für $\delta \geq 6$ den Grundzustand $|\Psi_{-}\rangle$ mit $E/L = -3\delta$ besitzt (genau wie das SZH-Modell bei $V = -2U, U < 0$, nur mit einer anderen Energie). Die anderen Multipletts haben lokal auf zwei Sprossen eine höhere Energie und aufgrund der Additivität ist die Wellenfunktion $|\Psi_{-}\rangle$ somit der energetisch niedrigste Zustand⁹. Für andere Werte der Kopplung δ ist es nicht eindeutig, welcher Zustand zumindest auf zwei Sprossen der Grundzustand ist. Allerdings besitzt die Wellenfunktion $|\Psi_{+}\rangle$ stets eine höhere Energie ($E = +\delta$), so daß sie als Grundzustand ausgeschlossen werden kann.

Dieses Modell (3.31) besitzt viele interessante Wechselwirkungen auf einer Sprosse: Neben der bekannten Spinaustauschwechselwirkung mit dem biquadratischen Zusatzterm gibt es noch das Paarhüpfen und das Hüpfen einzelner Elektronen in Anwesenheit eines anderen Elektrons mit entgegengesetzten Spin. Dabei sind die Wechselwirkungen des SZH-Modells auf einer Sprosse überhaupt nicht berücksichtigt worden, obwohl die beiden Systeme den gleichen Grundzustand besitzen (bei $V = -2U, U < 0$ und $\delta \geq 6$). Bisher wurden auch zur Konstruktion nur die Singulett-Wechselwirkungen verwendet und nicht die Quartett- und Quintett-Kopplungen auf einer Sprosse betrachtet, um weitere Systeme mit exakten Grundzuständen zu konstruieren (z.B. indem einfach die Kopplungen des SZH-Modells addiert werden). Folglich gibt es noch sehr viele Möglichkeiten, um das Modell (3.30) mit zusätzlichen Kopplungen zu ergänzen oder neue Systeme zu konstruieren. Sie würden aber durch die vorgegebene Kopplung zwischen den Sprossen nur unwesentliche Modifikationen von (3.30) darstellen, so daß hier auf eine weitere Untersuchung verzichtet wird.

Insgesamt hat sich die in diesem Abschnitt verwendete Methode als geeignet erwiesen, um translationsinvariante, $SO(5)$ -symmetrische elektronische Leitermodelle mit exakten Grundzuständen zu konstruieren. Dabei wurde ein neues, interessantes $SO(5)$ -invariantes Modell

⁹Bei der Verallgemeinerung von zwei auf L Sprossen gelten auch hier die gleichen Argumente wie in Abschnitt 2.4.1 zum Beweis, das dieser Produktzustand auch global der Grundzustand ist.

vorge stellt. Es zeigte sich, daß die Kopplung zwischen den Sprossen hauptsächlich dafür verantwortlich ist, ob es Zustände in Matrixproduktform in einem Modell geben kann oder nicht. Ziel weiterer Untersuchungen sollte die Betrachtung anderer $SO(5)$ -invarianter Kopplungen zwischen den Sprossen sein, die vielleicht dann auch zu anderen endlich korrelierten Grundzuständen führt. Schließlich könnte die gesamte Untersuchung auch noch auf dimerisierte Modelle erweitert werden, um eventuelle Übergänge von translationsinvarianten Phasen zu dimerisierten Phasen zu finden (analog zu den Resultaten in [27]).

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde ein Verfahren vorgestellt, allgemeine $SO(5)$ -invariante elektronische Leitermodelle mit zwei Holmen und Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen zu konstruieren. Dabei wurden sämtliche Kopplungen auf einer Sprosse klassifiziert und einige, physikalisch interessante Kopplungen zwischen benachbarten Sprossen wie beispielsweise ein Diagonalhüpfterm präsentiert. In diesem Rahmen konnte dann geklärt werden, inwiefern diese $SO(5)$ -symmetrischen Modelle zur Beschreibung realer Systeme geeignet sind. Dabei wurde kurz diskutiert, unter welchen Bedingungen Spinleitersysteme eine $SO(5)$ -Invarianz aufweisen können. Anschließend wurde eine hochkorrelierte Matrixproduktwellenfunktion mit einer $SO(5)$ -Symmetrie vorgestellt, die im Gegensatz zu bisherigen endlich korrelierten Wellenfunktionen die Spinorfreiheitsgrade der einzelnen Elektronen vollständig berücksichtigte und im folgenden zu Variationsuntersuchungen dieser Leitersysteme verwendet wurde.

Im zweiten Teil der vorliegenden Arbeit konnte das komplette Grundzustandsphasendiagramm des von Scalapino et al. eingeführten $SO(5)$ -invarianten Leitermodells bei der Kopplung $t_{\perp} \geq 2t_{\parallel}$ mittels eines Variationsansatzes bestimmt werden. Bei mittleren Kopplungen tritt im Bereich der Superspinphase eine neuartige Quartettphase mit einem metallischen Charakter auf, die vermutlich eine mehrkomponentige Luttinger-Flüssigkeitsphase ist. Bei Verallgemeinerung des Ansatzes wurde auch eine Phase mit spontaner Dimerisierung identifiziert. Weiterhin konnte der exakte Grundzustand auf der ganzen Linie $V = -2U$ mit $U \leq 0$ im Phasendiagramm konstruiert werden, wobei versucht wurde, dort exakte Anregungen zu bestimmen. Allerdings zeigte sich, daß es aufgrund der Struktur des Hüpfers im Gegensatz zu den Spinmodellen nicht möglich ist, einfache „Magnon“-Anregungen im Bereich mittlerer bzw. schwacher Kopplungen zu erzeugen. Die Berechnung sämtlicher Grundzustandskorrelationsfunktionen erlaubte, zusammen mit der exakten Diagonalisierung des Systems auf zwei Sprossen für $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$ und $t_{\perp} = t_{\parallel}$, eine genauere Identifizierung der einzelnen Phasen (insbesondere der Quartett-Phase). Insgesamt wurde die hervorragende Eignung der Variationswellenfunktion zur Untersuchung des Systems in weiten Teilen des Phasendiagramms bestätigt.

Weiterhin wurden sämtliche Symmetrien dieses Leitermodells auch für $J \neq 4(U + V)$ klassifiziert. Dabei sind keine weiteren höheren Invarianzen bei der Kopplung $J = 4(U + V)$ aufgetreten, und die explizite Brechung der $SO(5)$ führte nur zu einer $SU(2)$ -Invarianz zusammen mit einigen $U(1)$ -Symmetrien.

Ein weiterer Punkt der Untersuchungen waren $SO(5)$ -symmetrische Erweiterungen des Leitermodells mit Kopplungen auf einer Sprosse und zwischen benachbarten Sprossen. Für diese Modelle sind die Phasendiagramme und Grundzustandskorrelationsfunktionen mittels des Variationsansatzes berechnet worden. Im Vergleich mit dem Phasendiagramm des Ausgangsmodells zeigte sich, daß je nach betrachteter zusätzlicher Kopplung verschiedene Modifikationen auftreten. In diesem Rahmen wurde auch ein $SO(5)$ -invarianter Diagonalhüpfterm vorgestellt und das wechselwirkungsfreie System exakt diagonalisiert.

Im letzten Teil der Arbeit wurden verschiedene Modelle mit exakten Grundzuständen präsentiert. Zunächst ist ein Matrixproduktansatz für $SU(2)$ -symmetrische, elektronische Ketten vor-

gestellt worden. Anschließend konnten mittels Projektionsoperatoren verschiedene elektronische Ketten mit exakten Grundzuständen explizit konstruiert werden, und die Einschränkung einiger freier Parameter erlaubte dann den Vergleich dieser Systeme mit bereits bekannten Modellen. Mittels eines ähnlichen Verfahrens wurde versucht, $SO(5)$ -invariante Leitersysteme mit exakten Grundzuständen zu konstruieren. In diesem Fall mußte die Anzahl der freien Parameter des Modells sehr stark reduziert werden, um zu physikalisch interessanten Systemen zu gelangen. Dabei wurde ein neues $SO(5)$ -invariantes Modell mit einem exakten Grundzustand vorgestellt, in dem die benachbarten Sprossen nur durch einen Hüpfterm gekoppelt sind.

Gegenstand weiterer Untersuchungen müßte eine genauere Bestimmung des Grundzustandes in der Quartett-Phase sein, um die Theorie von einer Luttinger-Flüssigkeitsphase explizit zu verifizieren. In der Dimer-Phase sind auch noch einige Fragen offen, wobei sich hier eine exakte Diagonalisierung auf vier Sprossen anbieten würde (numerisch!). Die Bestimmung exakter Anregungen mittels allgemeiner Operatoren ist ebenfalls sehr interessant und sollte eingehender untersucht werden.

Weiterhin läßt sich das Verfahren zur Konstruktion von $SO(5)$ -invarianten Leitermodellen mit exakten Grundzuständen weiter anwenden, um Grundzustandswellenfunktion auch für andere Kopplungen zwischen benachbarten Sprossen außer dem Hüpfterm zu bestimmen.

Teile dieser Arbeit wurden in [10] veröffentlicht.

ANHANG A

Die $SO(5)$ -Symmetrie in einer elektronischen Leiter

A.1 Darstellungstheorie der $SO(5)$

Die $SO(5)$ -Algebra und einige ihrer Darstellungen sind in vielen Lehrbüchern zur Gruppentheorie ausführlich beschrieben worden, so daß im folgenden nur eine kurze Einführung in die hier verwendeten Darstellungen der Algebra gegeben wird (siehe die Abschnitte A.1.1 und A.1.2).

A.1.1 Matrixdarstellung der Algebra

Eine mögliche Darstellung der $SO(5)$ -Algebra ist die Matrixdarstellung in einem (4×4) -dimensionalen Raum. Dabei werden zur Konstruktion der zehn Generatoren der $SO(5)$ fünf Matrizen verwendet, die die Clifford-Algebra $\{\Gamma^a, \Gamma^b\} = 2\delta^{ab}$ erfüllen. Sie besitzen die folgende Form¹

$$\Gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_y \\ i\sigma_y & 0 \end{pmatrix}, \Gamma^{2,3,4} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma}^t \end{pmatrix}, \Gamma^5 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.1})$$

wobei $\vec{\sigma}$ die drei Pauli-Matrizen sind. Es lassen sich nun unter Verwendung dieser fünf Matrizen mittels des Kommutators $\Gamma^{ab} \equiv -\frac{i}{2}[\Gamma^a, \Gamma^b]$ weitere zehn Matrizen Γ^{ab} konstruieren, die ihrerseits eine $SO(5)$ -Algebra generieren:

$$[\Gamma^{ab}, \Gamma^{cd}] = 2i (\delta_{ac}\Gamma^{bd} + \delta_{bd}\Gamma^{ac} - \delta_{ad}\Gamma^{bc} - \delta_{bc}\Gamma^{ad}). \quad (\text{A.2})$$

Diese zehn Matrizen sind somit die Generatoren einer $SO(5)$ -Algebra in einem (4×4) -dimensionalen Matrixraum, wobei die fünf Matrizen Γ^a eine Vektordarstellung der Algebra bilden

$$[\Gamma^{ab}, \Gamma^c] = 2i (\delta_{ac}\Gamma^b - \delta_{bc}\Gamma^a). \quad (\text{A.3})$$

Dabei spannen die Matrizen Γ^a und Γ^{ab} zusammen mit der Einheitsmatrix $\mathbf{1}$ sogar den 16-dimensionalen Raum der hermiteschen (4×4) -Matrizen auf.

Diese Matrixdarstellung der $SO(5)$ -Algebra läßt sich nun zur Konstruktion einer Operatordarstellung der $SO(5)$ und auch zur Definition weiterer $SO(5)$ -invarianter Größen benutzen (siehe Abschnitt A.1.2).

Der Vollständigkeit halber wird nun noch die Matrix R angegeben, die eine ähnliche Rolle wie $\epsilon_{\alpha\beta}$ bei der $SO(3)$ spielt

$$R \equiv \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.4})$$

und die zum Beispiel zur Definition der Singulettts auf einer Sprosse (1.6) benötigt wird.

¹Hier wird die Darstellung nach Ref. [4] verwendet.

A.1.2 Darstellung der $SO(5)$ durch Operatoren

Die $SO(5)$ -Symmetrie kann natürlich auch in einem Hilbertraum realisiert werden, in dem die Generatoren der Algebra jetzt Operatoren sind. Ausgangspunkt für die Konstruktion dieser Operator Darstellung der $SO(5)$ ist der Spinor in Gleichung (1.1) (bzw. auf ungeraden Sprossen x entsprechend die Definition (1.2)). Er ergibt sich aus der allgemeinen Definition eines $SO(5)$ -Spinors in zwei Dimensionen [8]

$$\Psi_p = \left\{ c_{p\uparrow}, c_{p\downarrow}, \phi_\pi(p) c_{p+Q,\uparrow}^\dagger, \phi_\pi(p) c_{-p+Q,\downarrow}^\dagger \right\}, \quad (\text{A.5})$$

mit $\phi_\pi(p) = \text{sgn}(\cos(p_x) - \cos(p_y)) = \pm 1$ und $Q = (\pi, \pi)$, wobei zuerst die Randbedingungen festgelegt werden (ein zweibeiniges Leitermodell!) und anschließend eine Transformation in den Ortsraum stattfindet.

Die Operator Darstellung der $SO(5)$ auf einer Sprosse kann nun unter Verwendung der im vorherigen Abschnitt diskutierten (4×4) -Matrixdarstellung (A.2) und den Spinoren in (1.1) bzw. (1.2) wie folgt definiert werden (siehe auch Gleichung (1.4))

$$L_{ab}(x) = -\frac{1}{2} \Psi_\alpha^\dagger(x) \Gamma_{\alpha\beta}^{ab} \Psi_\beta(x), \quad a, b = 1, \dots, 5. \quad (\text{A.6})$$

Diese zehn Operatoren erfüllen die Kommutatorrelationen der $SO(5)$

$$[L_{ab}, L_{cd}] = -i (\delta_{ac} L_{bd} + \delta_{bd} L_{ac} - \delta_{ad} L_{bc} - \delta_{bc} L_{ad}) \quad (\text{A.7})$$

und sind somit die Generatoren der Algebra. Wird nun ein Spinor mit der (4×4) -dimensionalen Vektordarstellung (A.3) kombiniert, so folgt die entsprechende Vektordarstellung der $SO(5)$ durch Operatoren

$$n_a(x) \equiv \frac{1}{2} \Psi_\alpha^\dagger(x) \Gamma_{\alpha\beta}^a \Psi_\beta(x), \quad a = 1, \dots, 5 \quad (\text{A.8})$$

mit den Kommutatorrelationen

$$[L_{ab}, n_c] = -i (\delta_{ac} n_b - \delta_{bc} n_a). \quad (\text{A.9})$$

Diese Vektordarstellung ist der bekannte Superspinvektor (1.9).

Die $SO(5)$ -Algebra besitzt den Rank zwei, d.h. es können zwei Operatoren definiert werden, die mit sämtlichen Generatoren vertauschen: Die Casimiroperatoren $C_1(x) = \sum_{a < b} L_{ab}^2(x)$ (siehe (1.5)) und $C_2(x)$, wobei letzterer aus einer Linearkombination von quartischen Termen ($\sim L^4$) in den Generatoren $L_{ab}(x)$ besteht². Der Casimiroperator $C_1(x)$ wird nun zur Einteilung der Zustände auf einer Sprosse x in verschiedene Multipletts unterschiedlicher Casimir-Ladung verwendet (siehe Abschnitt 1.1).

Zusätzlich zu diesem Casimiroperator $C_1(x)$ werden die beiden Operatoren $Q(x)$ und $S^z(x)$ der Cartan-Subalgebra der $SO(5)$ verwendet, um die Zustände innerhalb der Multipletts weiter bezüglich ihrer Quantenzahlen Q und S^z zu unterteilen³. Die beiden Operatoren lauten

$$Q(x) = \frac{1}{2} (c^\dagger(x)c(x) + d^\dagger(x)d(x) - 2) \quad (\text{A.10})$$

$$\text{und } S^z(x) = \frac{1}{2} (c^\dagger(x)\sigma^z c(x) + d^\dagger(x)\sigma^z d(x)). \quad (\text{A.11})$$

²Für die genaue Definition von $C_2(x)$ siehe z.B. [72].

³Die beiden Operatoren $Q(x)$ und $S^z(x)$ sind die Generatoren der Cartan-Subalgebra, und sie können simultan diagonalisiert werden.

Die Verallgemeinerung der Operatoren der $SO(5)$ auf zwei oder mehr Sprossen geschieht einfach durch Addition der entsprechenden Größen, z.B. sind die Generatoren der $SO(5)$ auf N Sprossen durch $\mathcal{L}_{ab} = \sum_{x=1}^N L_{ab}(x)$ gegeben⁴ und der globale Casimiroperator ist folglich $C_1 = \sum_{ab} \mathcal{L}_{ab}^2$. Die Zustände des Hilbertraums auf N Sprossen werden ganz analog durch Tensorproduktbildung der Zustände der einzelnen Sprossen berechnet und dann in die verschiedenen Multipletts gemäß ihrer Casimir-Ladungen unterteilt (siehe z.B. Abschnitt 1.2 für das System auf zwei Sprossen).

A.2 $SO(5)$ -symmetrische Zustände in einer Leiter

Die genaue Definition der drei Singulett-Zustände (1.6) und des Quintetts (1.7) inklusive Normierung wurde bereits in Abschnitt 1.1 gegeben. Zur Berechnung der Produktzustände auf zwei Sprossen wird nun auch die genaue Struktur der beiden Quartetts (1.8) benötigt. Das erste Quartett ist $|\Psi_{4,\alpha}^{(1)}\rangle = \sqrt{2} \Psi_\alpha |\Omega\rangle$, während beim zweiten Quartett eine Umordnung der Komponenten vorgenommen wird: $|\Psi_{4,1}^{(2)}\rangle = \sqrt{2} \Psi_3^\dagger |\Omega\rangle$, $|\Psi_{4,2}^{(2)}\rangle = \sqrt{2} \Psi_4^\dagger |\Omega\rangle$, $|\Psi_{4,3}^{(2)}\rangle = -\sqrt{2} \Psi_1^\dagger |\Omega\rangle$ und $|\Psi_{4,4}^{(2)}\rangle = -\sqrt{2} \Psi_2^\dagger |\Omega\rangle$. Durch diese Umordnung wird die $SO(5)$ -Invarianz der aus den Quartetts erzeugten Projektionsoperatoren gewährleistet.

Die 14 $SO(5)$ -Singulettts auf zwei Sprossen besitzen nun unter Berücksichtigung dieser Definitionen folgende Struktur:

$$\begin{aligned}
|\Psi_{0,0}^{(1)}(x,y)\rangle &= |\Psi_{0,0}^{(1)}(x)\rangle |\Psi_{0,0}^{(1)}(y)\rangle =: |1_0\rangle |1_0\rangle \\
|\Psi_{0,0}^{(2)}(x,y)\rangle &= |\Psi_{0,0}^{(1)}(x)\rangle |\Psi_{0,0}^{(2)}(y)\rangle =: |1_0\rangle |2_0\rangle, \\
|\Psi_{0,0}^{(3)}(x,y)\rangle &= |1_0\rangle |3_0\rangle, \quad |\Psi_{0,0}^{(4)}(x,y)\rangle = |2_0\rangle |1_0\rangle, \quad |\Psi_{0,0}^{(5)}(x,y)\rangle = |3_0\rangle |1_0\rangle, \\
|\Psi_{0,0}^{(6)}(x,y)\rangle &= |2_0\rangle |2_0\rangle, \quad |\Psi_{0,0}^{(7)}(x,y)\rangle = |2_0\rangle |3_0\rangle, \quad |\Psi_{0,0}^{(8)}(x,y)\rangle = |3_0\rangle |2_0\rangle, \\
|\Psi_{0,0}^{(9)}(x,y)\rangle &= |3_0\rangle |3_0\rangle, \\
|\Psi_{0,0}^{(10)}(x,y)\rangle &= \frac{1}{2} \left(-|\Psi_{4,1}^{(1)}\rangle |\Psi_{4,3}^{(2)}\rangle - |\Psi_{4,2}^{(1)}\rangle |\Psi_{4,4}^{(2)}\rangle + |\Psi_{4,3}^{(1)}\rangle |\Psi_{4,1}^{(2)}\rangle + |\Psi_{4,4}^{(1)}\rangle |\Psi_{4,2}^{(2)}\rangle \right), \\
|\Psi_{0,0}^{(11)}(x,y)\rangle &= \frac{1}{2} \left(|\Psi_{4,1}^{(1)}\rangle |\Psi_{4,3}^{(1)}\rangle + |\Psi_{4,2}^{(1)}\rangle |\Psi_{4,4}^{(1)}\rangle - |\Psi_{4,3}^{(1)}\rangle |\Psi_{4,1}^{(1)}\rangle - |\Psi_{4,4}^{(1)}\rangle |\Psi_{4,2}^{(1)}\rangle \right), \\
|\Psi_{0,0}^{(12)}(x,y)\rangle &= \frac{1}{2} \left(|\Psi_{4,1}^{(2)}\rangle |\Psi_{4,3}^{(2)}\rangle + |\Psi_{4,2}^{(2)}\rangle |\Psi_{4,4}^{(2)}\rangle - |\Psi_{4,3}^{(2)}\rangle |\Psi_{4,1}^{(2)}\rangle - |\Psi_{4,4}^{(2)}\rangle |\Psi_{4,2}^{(2)}\rangle \right), \\
|\Psi_{0,0}^{(13)}(x,y)\rangle &= \frac{1}{2} \left(|\Psi_{4,1}^{(2)}\rangle |\Psi_{4,3}^{(1)}\rangle + |\Psi_{4,2}^{(2)}\rangle |\Psi_{4,4}^{(1)}\rangle - |\Psi_{4,3}^{(2)}\rangle |\Psi_{4,1}^{(1)}\rangle - |\Psi_{4,4}^{(2)}\rangle |\Psi_{4,2}^{(1)}\rangle \right)
\end{aligned}$$

und schließlich noch das aus den beiden Quintetts gebildete Singulett:

$$|\Psi_{0,0}^{(14)}(x,y)\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} (|\Psi_{5,1}\rangle |\Psi_{5,2}\rangle + |\Psi_{5,2}\rangle |\Psi_{5,1}\rangle + |\Psi_{5,3}\rangle |\Psi_{5,4}\rangle + |\Psi_{5,4}\rangle |\Psi_{5,3}\rangle + |\Psi_{5,5}\rangle |\Psi_{5,5}\rangle).$$

Die anderen 36 Multipletts auf zwei Sprossen ergeben sich aus ähnlichen Linearkombinationen der Tensorprodukte der Zustände auf einer Sprosse.

⁴Die alternierende Definition der Spinoren auf geraden und ungeraden Sprossen verursacht dabei nur ein Vorzeichenwechsel in den Generatoren.

A.3 $SO(5)$ -symmetrische Operatoren

In den beiden folgenden Abschnitten werden nun die Projektionsoperatoren auf die Zustände auf einer bzw. auf zwei Sprossen durch Elektronerzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausgedrückt. Außerdem werden $SO(5)$ -invariante Wechselwirkungen auf einer und zwischen zwei Sprossen vorgestellt, die durch Linearkombinationen dieser Projektionsoperatoren erzeugt werden können.

A.3.1 Wechselwirkungen auf einer Sprosse

Sämtliche $SO(5)$ -invariante Operatoren auf einer Sprosse können durch Linearkombinationen der Projektionsoperatoren auf die sechs Multipletts (1.6)–(1.8) erzeugt werden. Werden nun diese Projektionsoperatoren durch Elektronerzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausgedrückt, so können die meisten dabei entstehenden Terme bereits durch das SZH-Modell (1.15) ohne den Hüpfterm auf einer Sprosse bei entsprechender Wahl der Kopplungskonstanten U , V und J und einer zusätzlichen biquadratischen Wechselwirkung mit zugehöriger Kopplung α beschrieben werden. Zur Vereinfachung der Schreibweise wird nun folgende Abkürzung definiert:

$$[U, V, J, \alpha] \equiv U \left((n_{c\uparrow}(x) - \frac{1}{2})(n_{c\downarrow}(x) - \frac{1}{2}) + (c \rightarrow d) \right) + V (n_c(x) - 1)(n_d(x) - 1) + J \vec{S}_c(x) \vec{S}_d(x) + \alpha (\vec{S}_c(x) \vec{S}_d(x))^2, \quad (\text{A.12})$$

d.h. die Angabe $P = [0, 0, 1, 0]$ bedeutet nichts anderes als $P = \vec{S}_c(x) \vec{S}_d(x)$. Zusätzlich zu diesen Wechselwirkungen gibt es noch viele Einelektron- und Paarhüpfterme zusammen mit „bond-charge“-Wechselwirkungen, die zur einfachen Angabe der Projektionsoperatoren in Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren dienen können.

In dieser Darstellung sind die Projektionsoperatoren auf die Singulett

$$\hat{P}_{0,0}^{1,1} = |\Psi_{0,0}^{(1)}\rangle \langle \Psi_{0,0}^{(1)}| = \left[0, 0, -\frac{1}{3}, \frac{4}{3} \right], \quad (\text{A.13})$$

$$\hat{P}_{0,0}^{2,2} = \left[\frac{1}{2}, -\frac{1}{4}, \frac{2}{3}, \frac{4}{3} \right] + \frac{1}{2} [n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} (1 - n_c) - c \leftrightarrow d], \quad (\text{A.14})$$

$$\hat{P}_{0,0}^{3,3} = \left[\frac{1}{2}, -\frac{1}{4}, \frac{2}{3}, \frac{4}{3} \right] - \frac{1}{2} [n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} (1 - n_c) - c \leftrightarrow d], \quad (\text{A.15})$$

$$\hat{P}_{0,0}^{1,2} + \hat{P}_{0,0}^{2,1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + H.c.) n_{d\downarrow} (n_{c\downarrow} - 1) + \uparrow \leftrightarrow \downarrow \right], \quad (\text{A.16})$$

$$\hat{P}_{0,0}^{1,3} + \hat{P}_{0,0}^{3,1} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left[(c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + H.c.) n_{c\downarrow} (n_{d\downarrow} - 1) + \uparrow \leftrightarrow \downarrow \right], \quad (\text{A.17})$$

$$\hat{P}_{0,0}^{2,3} + \hat{P}_{0,0}^{3,2} = d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} c_{\uparrow} c_{\downarrow} + H.c.. \quad (\text{A.18})$$

Die Projektionsoperatoren auf die Quartett-Zustände sind

$$\sum_{\mu=1}^4 \hat{P}_{4,\mu}^{1,1} = \left[0, 0, -\frac{8}{3}, -\frac{16}{3} \right] + (1 - n_{c\uparrow}n_{c\downarrow})n_d + n_{d\uparrow}n_{d\downarrow}(n_c - 2), \quad (\text{A.19})$$

$$\sum_{\mu=1}^4 \hat{P}_{4,\mu}^{2,2} = \left[0, 0, -\frac{8}{3}, -\frac{16}{3} \right] + (1 - n_{d\uparrow}n_{d\downarrow})n_c + n_{c\uparrow}n_{c\downarrow}(n_d - 2), \quad (\text{A.20})$$

$$\sum_{\mu=1}^4 \hat{P}_{4,\mu}^{1,2} + \hat{P}_{4,\mu}^{2,1} = \left[(c_{\uparrow}^{\dagger}d_{\uparrow} + H.c.)(1 - (n_{c\downarrow} - n_{d\downarrow})^2) + \uparrow \leftrightarrow \downarrow \right], \quad (\text{A.21})$$

und schließlich ergibt die Projektion auf das Quintett

$$\sum_{\mu=1}^5 \hat{P}_{5,\mu} = \left[1, \frac{1}{2}, \frac{13}{3}, \frac{20}{3} \right]. \quad (\text{A.22})$$

A.3.2 Wechselwirkungen zwischen benachbarten Sprossen

In Analogie zu Abschnitt (A.3.1) können die $SO(5)$ -symmetrischen Terme auf zwei Sprossen klassifiziert werden. Dabei ist die Wahl der Basis des Zwei-Sprossen-Systems sehr wichtig für die Struktur der $SO(5)$ -invarianten Terme. In der einfachsten Basis liefert z.B. das Produkt eines Singulets auf einer Sprosse x und eines beliebigen Multipletts auf der benachbarten Sprosse y (z.B. ein Quintett) für den Projektionsoperator

$$\sum_{\mu=1}^5 \hat{P}_{5,\mu}^{1,1}(x, y) = \hat{P}_{0,0}^{1,1}(x) \sum_{\mu=1}^5 \hat{P}_{5,\mu}(y), \quad (\text{A.23})$$

wobei $\hat{P}_{d,\mu}^{k,l}$ in Gleichung (1.12) definiert wurde. Die Zahlen k und l in $\hat{P}_{d,\mu}^{k,l}$ hängen dabei von der Numerierung der verschiedenen Multipletts auf den Sprossen ab.

Ein anderes Beispiel ist ein Projektionsoperator auf ein Singulett auf jeder der beiden Sprossen

$$\hat{P}_{0,0}^{2,2}(x, y) = |\Psi_{0,0}^{(2)}(x, y)\rangle \langle \Psi_{0,0}^{(2)}(x, y)| = \hat{P}_{0,0}^{1,1}(x) \hat{P}_{0,0}^{2,2}(y). \quad (\text{A.24})$$

(siehe Gleichung (1.6) für die Definition der Wellenfunktionen). Insgesamt ergibt sich, daß alle Projektionsoperatoren auf Zustände, die wenigstens ein Singulett auf einer der Sprossen besitzen (87 Zustände, siehe Kapitel 1.2), auf die gleiche Art in Produkte von Projektionsoperatoren auf Zustände einer Sprosse zerlegt werden können. Für einige dieser Projektionsoperatoren sind auch kompakte Darstellungen in Termen von Elektronoperatoren möglich, z.B. für diejenigen, die aus direkten Produkten zweier Singulets auf den Sprossen erzeugt werden. Die dabei entstehenden $SO(5)$ -invarianten Terme sind von der Form

$$\begin{aligned} & N_d(y)n_{c\uparrow}(y)n_{c\downarrow}(y) \left[d_{\uparrow}^{\dagger}(x)d_{\downarrow}^{\dagger}(x)c_{\uparrow}(x)c_{\downarrow}(x) + H.c. \right], \quad (\text{A.25}) \\ \text{oder} & N_c(x)n_{d\uparrow}(x)n_{d\downarrow}(x) \left[c_{\uparrow}^{\dagger}(y)c_{\downarrow}^{\dagger}(y)d_{\uparrow}(y)d_{\downarrow}(y) + H.c. \right], \end{aligned}$$

wobei $N_\alpha(y)$ durch

$$N_\alpha(y) = (1 - n_{\alpha\uparrow}(y) - n_{\alpha\downarrow}(y) + n_{\alpha\uparrow}(y)n_{\alpha\downarrow}(y)), \quad \alpha \in \{c, d\} \quad (\text{A.26})$$

gegeben ist (x analog). Es gibt aber auch einfache Operatoren, die aus dem direkten Produkt eines Singulettts auf einer Sprosse und eines Quartetts auf der anderen Sprosse entstehen:

$$\begin{aligned} & \left[((n_{c\uparrow}(x) - n_{d\uparrow}(x))^2 - 1) c_\uparrow^\dagger(y) c_\downarrow^\dagger(x) c_\downarrow^\dagger(y) d_\uparrow(y) d_\downarrow(x) d_\downarrow(y) \right. \\ & + \left. ((n_{c\downarrow}(x) - n_{d\downarrow}(x))^2 - 1) c_\uparrow^\dagger(x) c_\uparrow^\dagger(y) c_\downarrow^\dagger(y) d_\uparrow(x) d_\uparrow(y) d_\downarrow(y) \right] + H.c. \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

Auf diese Weise können noch viele weitere Operatoren konstruiert werden, aber die meisten sind erheblich komplizierter und besitzen eine größere Anzahl von Termen.

Die Projektionsoperatoren auf die restlichen 169 Zustände können nicht so einfach zerlegt werden. Sie sind komplexer und ihre Darstellung in Elektronenerzeugungs- und Vernichtungsoperatoren produziert komplizierte „bond-charge“-Wechselwirkungen. Allerdings führen geeignete Linearkombinationen dieser Operatoren auf einfachere, $SO(5)$ -symmetrische Terme auf zwei Sprossen, wie z.B. den Hüpfterm in Gleichung (1.21), das Diagonalhüpfen in (1.25) und die Wechselwirkung in Gleichung (1.28). Weitere interessante Terme sind

$$\left[- \left(c_\uparrow^\dagger(y) c_\downarrow^\dagger(y) (d_\uparrow(y) d_\downarrow(x) + d_\uparrow(x) d_\downarrow(y)) \right) + (c \leftrightarrow d) \right] + H.c. \quad (\text{A.28})$$

(beliebige Variationen dieser Struktur sind auch invariant) oder Wechselwirkungen der Form

$$c_\uparrow^\dagger(y) c_\downarrow^\dagger(y) d_\uparrow(y) d_\downarrow(y) \left(d_\downarrow^\dagger(x) c_\downarrow(x) + d_\uparrow^\dagger(x) c_\uparrow(x) \right) + H.c. \quad (\text{A.29})$$

Es gibt noch viele weitere Wechselwirkungsterme, aber die meisten sind viel komplizierter und physikalisch nicht sehr interessant.

A.4 Exakte Diagonalisierung der „tight-binding“-Modelle

Das in Abschnitt 2.3.2.3 vorgestellte „tight-binding“-Modell (2.20) kann exakt diagonalisiert werden. Dazu wird zunächst eine diskrete Fouriertransformation des Systems durchgeführt

$$c_\sigma(k) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_x e^{-ikx} c_\sigma(x), \quad c_\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikx} c_\sigma(k), \quad (\text{A.30})$$

bzw.

$$c_\sigma^\dagger(k) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_x e^{ikx} c_\sigma^\dagger(x), \quad c_\sigma^\dagger(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{-ikx} c_\sigma^\dagger(k). \quad (\text{A.31})$$

Das so erhaltene Modell

$$H = \sum_{\sigma,k} (c_\sigma^\dagger(k), d_\sigma^\dagger(k)) \begin{pmatrix} -4t_\parallel \cos(k) & -2t_\perp - 2it_D \sin(k) \\ -2t_\perp + 2it_D \sin(k) & -4t_\parallel \cos(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_\sigma(k) \\ d_\sigma(k) \end{pmatrix} \quad (\text{A.32})$$

kann mittels einer entsprechenden unitären Transformation U diagonalisiert werden. Es ergibt sich

$$H' = U H U^\dagger = \sum_{\sigma, k} \left(\tilde{c}_\sigma^\dagger(k), \tilde{d}_\sigma^\dagger(k) \right) \begin{pmatrix} \epsilon_+(k) & 0 \\ 0 & \epsilon_-(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_\sigma(k) \\ \tilde{d}_\sigma(k) \end{pmatrix} \quad (\text{A.33})$$

mit der Dispersionsrelation

$$\epsilon_\pm(k) = -4t_\parallel \cos(k) \pm 2\sqrt{t_\perp^2 + t_D^2 \sin^2(k)} \quad (\text{A.34})$$

und

$$\left(\tilde{c}_\sigma^\dagger(k), \tilde{d}_\sigma^\dagger(k) \right) = U \left(c_\sigma^\dagger(k), d_\sigma^\dagger(k) \right) U^\dagger. \quad (\text{A.35})$$

Die zugehörige Energie ist nach Summation über die Spinfreiheitsgrade $\sigma = \uparrow, \downarrow$

$$E = \sum_k [\epsilon_+(k)n_+(k) + \epsilon_-(k)n_-(k)] \quad (\text{A.36})$$

($n_\pm(k)$ ist die Anzahl der Quasiteilchen mit Energie $\epsilon_\pm(k)$). Die Grundzustandsenergie bei Halbfüllung ($k_+ + k_- = \pi$) kann nun durch die Besetzung beider Bänder bis zur Fermienergie $\epsilon_F = \epsilon_+(k_+) = \epsilon_-(k_-)$ berechnet werden. Im Fall $t_D = 0$ ist die Grundzustandsenergie

$$\frac{E}{L} = \frac{4}{\pi} (t_\perp(2k_+ - \pi) - 4t_\perp \sin(k_+)) \quad (\text{A.37})$$

mit $k_+ = \arccos(t_\perp/(2t_\parallel))$ und $k_- = \pi - k_+$. Für $t_\perp \geq 2t_\parallel$ ist somit $k_+ = 0$ und $k_- = \pi$, d.h. das untere Band ist komplett gefüllt und durch eine Energielücke vom oberen getrennt. Die zugehörige Grundzustandsenergie ist $E/L = -4t_\perp$. Für $t_\perp < 2t_\parallel$ sind beide Bänder teilweise gefüllt und die Grundzustandsenergie ist nach (A.37) allein durch k_+ bestimmt.

Wird nun die Diagonalkopplung ($t_D \neq 0$) eingeschaltet, so ändert sich das Bild. Aufgrund der Ausbildung von mehreren Minima in den Energiebändern in Abhängigkeit von der Kopplungsstärke t_D wird dabei zur Vereinfachung der Diskussion nur der relevante Fall $t_\perp \geq 2t_\parallel$ betrachtet. Beide Energiebänder sind durch eine Lücke getrennt, und bei Halbfüllung ist das untere Band komplett gefüllt und das obere leer ($k_+ = 0$ und $k_- = \pi$). Die Grundzustandsenergie ist nun

$$\frac{E}{L} = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \epsilon_-(k) = -\frac{4}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \sqrt{1 + \left(\frac{t_D}{2}\right)^2 \sin^2(k)} = -\frac{16}{\pi} \mathcal{E} \left(\sqrt{-\frac{t_D^2}{4}} \right) \quad (\text{A.38})$$

mit dem vollständig elliptischen Integral

$$\mathcal{E}(t) = \int_0^1 dx \frac{\sqrt{1-t^2x^2}}{\sqrt{1-x^2}}. \quad (\text{A.39})$$

ANHANG B

Ergänzungen zum Matrixproduktansatz

B.1 Singulett-Struktur des Matrixprodukt-Ansatzes

In den meisten Fällen kann exakt bewiesen werden, daß ein Matrixproduktansatz bei Spurbildung im Matrixraum ein globales Singulett bezüglich der betrachteten Symmetrie bildet. Im folgenden wird die Singulett-Struktur des Ansatzes (1.39) und der Wellenfunktion (3.7) (siehe Abschnitt B.1.1) gezeigt.

Damit eine Wellenfunktion ein Singulett bezüglich einer Symmetrie darstellt, muß sie unter jeder globalen Symmetrietransformation invariant bleiben. Im Fall der $SO(5)$ bedeutet dies, daß die Wellenfunktion (1.39) unter jeder globalen $SO(5)$ -Transformation invariant sein muß.

Beweis der Singulett-Struktur:

Definiere nun eine allgemeine globale, unitäre Transformation

$$U = \prod_{x=1}^L U(x), \quad U(x) = \exp \left(i \sum_{a<b} \alpha_{ab} L_{ab}(x) \right) \quad (\text{B.1})$$

mit den zehn Generatoren $L_{ab}(x)$ der $SO(5)$ -Algebra auf der Sprosse x (siehe (1.4)) und beliebigen Koeffizienten α_{ab} . Aufgrund der Gruppenstruktur kann nun jede dieser Transformationen zerlegt werden in ein Produkt von Transformationen

$$U(x) = \prod_{a<b} U_{ab}(x) = \prod_{a<b} \exp(i\tilde{\alpha}_{ab} L_{ab}(x)), \quad (\text{B.2})$$

die die Anteile der einzelnen Generatoren explizit mit den Koeffizienten $\tilde{\alpha}_{ab}$ berücksichtigt. Es reicht aus zu zeigen, daß die Wellenfunktion unter jeder einzelnen dieser zehn Transformationen invariant ist. Dazu muß jeweils eine Matrix V_{ab} konstruiert werden (unabhängig von $x!$), die die Wirkung von $U_{ab}(x)$ rückgängig macht, z.B.

$$\begin{aligned} \prod_x U_{12}(x) |\Psi_0\rangle &= \text{Spur} \left(\prod_x U_{12}(x) g_x \right) = \text{Spur} \left(\prod_x V_{12}^\dagger U_{12}(x) g_x V_{12} \right) \\ &= \text{Spur} \left(\prod_x g_x \right) = |\Psi_0\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

mit $V_{ab}^\dagger V_{ab} = V_{ab} V_{ab}^\dagger = \mathbf{1}$. Das ist für alle zehn Generatoren möglich: die Matrizen V_{ab} sind dabei Drehmatrizen in einem fünfdimensionalen Raum, z.B. ist die Matrix

$$V_{12} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\tilde{\alpha}_{12}}{2}\right) & 0 & \sin\left(\frac{\tilde{\alpha}_{12}}{2}\right) & 0 & 0 \\ 0 & \cos\left(\frac{\tilde{\alpha}_{12}}{2}\right) & 0 & -\sin\left(\frac{\tilde{\alpha}_{12}}{2}\right) & 0 \\ -\sin\left(\frac{\tilde{\alpha}_{12}}{2}\right) & 0 & \cos\left(\frac{\tilde{\alpha}_{12}}{2}\right) & 0 & 0 \\ 0 & \sin\left(\frac{\tilde{\alpha}_{12}}{2}\right) & 0 & \cos\left(\frac{\tilde{\alpha}_{12}}{2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.4})$$

Die anderen neun Matrizen besitzen eine ähnliche Struktur bzw. sogar eine Diagonalform, falls sämtliche Zustände in g_x Eigenzustände von $L_{ab}(x)$ sind. Folglich ist die Wellenfunktion (1.39) ein globales Singulett bezüglich der $SO(5)$.

B.1.1 Globales $SU(2)$ -Singulett

Der Beweis der Singulett-Struktur des Ansatzes (3.7) für die $SU(2)$ -Algebra kann analog zum Beweis für die $SO(5)$ -invariante Wellenfunktion (1.39) geführt werden. Nach Definition der Generatoren der $SU(2)$ -Algebra S^1, S^2, S^3 (1, 2, 3 entsprechen x, y, z) und einer allgemeinen globalen, unitären Transformation (wie in Definition (B.1)) können Drehmatrizen V_1, V_2, V_3 berechnet werden, die diese Transformation umkehren, z.B.

$$\begin{aligned} \prod_x U_1(x) |\Psi_0\rangle &= \text{Spur} \left(\prod_x U_1(x) g_x \right) = \text{Spur} \left(\prod_x V_1^\dagger U_1(x) g_x V_1 \right) \\ &= \text{Spur} \left(\prod_x g_x \right) = |\Psi_0\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

mit der Matrix

$$V_1 = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\tilde{\alpha}_x}{2}\right) & i \sin\left(\frac{\tilde{\alpha}_x}{2}\right) & 0 \\ i \sin\left(\frac{\tilde{\alpha}_x}{2}\right) & \cos\left(\frac{\tilde{\alpha}_x}{2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.6})$$

Die Matrix V_2 hat eine ähnliche Struktur wie V_1 , während V_3 eine Diagonalmatrix ist.

B.2 Transfermatrix-Methode

Die Berechnung von Erwartungswerten für endlich korrelierte Wellenfunktionen wird unter Verwendung einer Transfermatrixmethode durchgeführt (siehe z.B. [36]). Nach einer kurzen Einführung in das Verfahren werden im Abschnitt B.2.1 die Korrelationsfunktionen des SZH-Modells für den Ansatz (1.39) bestimmt. Im Abschnitt B.2.2 wird die Methode dann auf den Ansatz (3.7) angewendet.

Ausgangspunkt ist eine translationsinvariante Wellenfunktion der Form

$$|\Psi\rangle = \text{Spur} \left(\prod_{x=1}^L g_x \right), \quad (\text{B.7})$$

wobei g_x eine $(n \times n)$ -Matrix mit lokalen Zuständen in den Matrixelementen ist. Auf jedem Platz x bzw. jeder Sprosse wird nun eine $(n^2 \times n^2)$ -Transfermatrix G definiert:

$$G_{\alpha_1, \alpha_2}(x) \sim G_{(i_1, j_1), (i_2, j_2)}(x) \equiv g_{(i_1, i_2)}^\dagger(x) g_{(j_1, j_2)}(x) \quad (\text{B.8})$$

mit den Indizes

$$\alpha_i = 1, \dots, n^2 \leftrightarrow (11), \dots, (1n), (21), \dots, (2n), \dots, (n1), \dots, (nn).$$

Die Norm des Grundzustandes läßt sich nun sehr einfach unter der Verwendung der Transfermatrizen G (identisch für alle x) berechnen

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \text{Spur } G^L = \sum_{i=1}^{n^2} \lambda_i^L, \quad (\text{B.9})$$

wobei λ_i die n^2 Eigenwerte der Matrix G sind. Im thermodynamischen Limes ($L \rightarrow \infty$) dominiert der größte Eigenwert λ_1 und die Norm vereinfacht sich zu $\langle \Psi | \Psi \rangle \sim \lambda_1^L$.

Auf eine ähnliche Weise können nun die Ein- und Mehrpunktfunktionen berechnet werden. Die Einpunktfunktion des Operators O ist

$$\langle O \rangle = \frac{1}{\lambda_1} \langle e_1 | Z(O) | e_1 \rangle \quad (\text{B.10})$$

und die Zweipunktfunktion ist

$$\langle O_1^\dagger O_r \rangle = \sum_{i=1}^{n^2} \frac{1}{\lambda_i^2} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^r \langle e_1 | Z(O_1) | e_i \rangle \langle e_i | Z(O_r) | e_1 \rangle. \quad (\text{B.11})$$

Hier sind $|e_i\rangle$ die Eigenvektoren von G mit Eigenwerten λ_i , und $Z(O_x) \sim g^\dagger O_x g$ ist die zum Operator O_x gehörende Transfermatrix. Analog lassen sich sämtliche Mehrpunktfunktionen berechnen.

In den beiden folgenden Abschnitten werden nun verschiedene Korrelationsfunktionen für die Ansätze (1.39) und (3.7) berechnet.

B.2.1 SO(5)

Ausgehend vom Ansatz (1.39) mit der zugehörigen (5×5) -Matrix (1.35) ergibt sich eine (25×25) -Transfermatrix G . Der größte Eigenwert ist $\lambda_1 = (h_1 + w) / 2$ mit $h_1 = 5p_6^2 + p_1^2 + p_2^2 + p_3^2$, $h_2 = p_4^2 + p_5^2$ und $w = \sqrt{h_1^2 + 16h_2^2}$. Sämtliche Ein- und Zweipunktfunktionen können nun unter Verwendung von (B.10) und (B.11) im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ berechnet werden. Für die lokalen magnetischen Momente z.B. gilt

$$\langle \vec{S} \rangle = 0, \quad \langle (S^i)^2 \rangle = \frac{w - h_1 + 8p_6^2}{4w} \quad (\text{B.12})$$

und für die elektronischen Erwartungswerte

$$\langle c_g^\dagger(x)c_g(x) \rangle = \frac{1}{w} \left[\frac{w-h_1}{h_2}(p_5^2 + 3p_4^2) + 2h_1 - 4p_1p_2 \right], \quad (\text{B.13})$$

$$\langle c_u^\dagger(x)c_u(x) \rangle = \frac{1}{w} \left[\frac{w-h_1}{h_2}(3p_5^2 + p_4^2) + 2h_1 + 4p_1p_2 \right], \quad (\text{B.14})$$

$$\langle c_g^\dagger(x)c_u(x) \rangle = \langle c_u^\dagger(x)c_g(x) \rangle = \frac{1}{w} \left[\frac{w-h_1}{h_2}(2p_4p_5) - 4p_2p_3 \right], \quad (\text{B.15})$$

mit der Definition $c_{g,u}(x) = (c_\uparrow(x) + c_\downarrow(x)) \pm (d_\uparrow(x) + d_\downarrow(x))$.

Die Zweipunktfunktionen zerfallen wie erwartet alle exponentiell, z.B. ist die Korrelationsfunktion für den Spinoperator auf zwei Sprossen

$$\langle \vec{S}_1 \vec{S}_r \rangle = -\frac{3}{4w(h_1+w)} \left(\frac{h_1-4p_6^2}{\lambda_1} \right)^r \left(\frac{w-h_1+8p_6^2}{h_1-4p_6^2} \right)^2. \quad (\text{B.16})$$

Weitere interessante Korrelationen sind die Spin-Spin-Korrelationen zwischen einzelnen Plätzen auf einer Sprosse, getrennt durch eine Distanz r :

$$\langle \vec{S}_\alpha(r) \vec{S}_\beta(0) \rangle = A_{\alpha\beta}(\{p_i\}) \left(\frac{h_1-4p_6^2}{\lambda_1} \right)^r + B_{\alpha\beta}(\{p_i\}) \left(\frac{h_1-8p_6^2}{\lambda_1} \right)^r. \quad (\text{B.17})$$

Dabei sind die Amplituden $A_{\alpha\beta}(\{p_i\})$ und $B_{\alpha\beta}(\{p_i\})$ abhängig von der Wahl von α und β ($\alpha, \beta \in \{c, d\}$), d.h. ob Korrelatoren von Spins auf dem gleichen oder unterschiedlichem Holm der Leiter betrachtet werden. Zusätzlich gilt

$$\langle \vec{S}_c(r) \vec{S}_d(0) \rangle = \langle \vec{S}_d(r) \vec{S}_c(0) \rangle, \quad \langle \vec{S}_c(r) \vec{S}_c(0) \rangle = \langle \vec{S}_d(r) \vec{S}_d(0) \rangle. \quad (\text{B.18})$$

Analog können aber auch elektronische Korrelationen studiert werden, wie z.B.

$$\begin{aligned} \langle c_g^\dagger(r)c_u^\dagger(r)c_g(0)c_u(0) \rangle &= -\frac{8}{3} \langle \vec{S}_1 \vec{S}_r \rangle, \\ \langle c_{g,u}^\dagger(r)c_{g,u}(0) \rangle &= C_{g,u}(\{p_i\}) \left(\frac{h_2}{\lambda_1} \right)^r + D_{g,u}(\{p_i\}) \left(-\frac{h_2}{\lambda_1} \right)^r, \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

mit den Amplituden $C_{g,u}$ und $D_{g,u}$. Dabei ist

$$\langle c_g^\dagger(r)c_g(0) \rangle = -\langle c_u^\dagger(r)c_u(0) \rangle \quad \text{und} \quad \langle c_g^\dagger(r)c_u(0) \rangle = \langle c_u^\dagger(r)c_g(0) \rangle. \quad (\text{B.20})$$

B.2.2 SU(2)

Die Transfermatrix für die in Kapitel 3.1.1 betrachtete Wellenfunktion (3.7) ist eine (9×9) -Matrix mit dem größten Eigenwert $l_{max} = \frac{1}{2}(h_1 + \sqrt{h_1^2 + h_2^2})$ ($h_1 = p_1^2 + p_2^2$ und $h_2 = 2\sqrt{2}p_3^2$). Im folgenden sind einige Beispiele für Korrelationen aufgeführt, die im thermodynamischen Limes berechnet worden sind:

- Einpunktfunktionen (mit $w = \sqrt{h_1^2 + h_2^2}$)

$$\begin{aligned}\langle S^\alpha \rangle &\equiv 0, \quad (\alpha = x, y, z) & \langle \vec{S}^2 \rangle &= \frac{3(w - h_1)}{4w} \\ \langle n_\uparrow \rangle &= \langle n_\downarrow \rangle = \frac{2p_2^2 + w - h_1}{2w} & \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle &= \frac{p_2^2}{w} \\ &\dots\end{aligned}$$

- Zweipunktfunktionen

$$\langle \vec{S}(r) \vec{S}(0) \rangle = -\frac{3(h_1 - w)^2 p_3^4}{2w(h_1 + w)(8p_3^4 + (h_1 - w)^2)} \left(\frac{p_1^2 + p_2^2}{l_{max}} \right)^{r-2}, \dots$$

B.3 Variationsenergie bei Dimerisierung

Bei der Berechnung der Variationsenergie mit dem dimerisierten Ansatz (2.32) ergibt sich

$$\frac{E}{L} = \frac{1}{2l_{max}} \left(\frac{E_{p\tilde{p}}}{4 + b_{p\tilde{p}}^2} + \frac{E_{\tilde{p}p}}{4 + b_{\tilde{p}p}^2} \right), \quad (\text{B.21})$$

mit den Definitionen

$$\begin{aligned}h_{11} &:= (5p_6^2 + p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) (5\tilde{p}_6^2 + \tilde{p}_1^2 + \tilde{p}_2^2 + \tilde{p}_3^2), \\ h_{22} &:= (p_4^2 + p_5^2) (\tilde{p}_4^2 + \tilde{p}_5^2), \\ l_{max} &:= \frac{h_{11}}{2} + 4h_{22} + \frac{1}{2}w, \quad w := \sqrt{h_{11}^2 + 16h_{11}h_{22}}, \\ b_{p\tilde{p}} &:= \frac{8}{h_{11} + w} (p_4^2 + p_5^2) (5\tilde{p}_6^2 + \tilde{p}_1^2 + \tilde{p}_2^2 + \tilde{p}_3^2), \\ b_{\tilde{p}p} &:= \frac{8}{h_{11} + w} (\tilde{p}_4^2 + \tilde{p}_5^2) (5p_6^2 + p_1^2 + p_2^2 + p_3^2).\end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Die Energie $E_{p\tilde{p}}$ auf zwei Sprossen ist

$$\begin{aligned}E_{p\tilde{p}} = & V \left\{ b_{p\tilde{p}} \left[2(5p_6^2 - 3p_1^2 - p_2^2 - p_3^2) (\tilde{p}_4^2 + \tilde{p}_5^2) + p \leftrightarrow \tilde{p} \right] \right. \\ & \left. + 4 \left[(5\tilde{p}_6^2 - \tilde{p}_1^2) (5p_6^2 - p_1^2) - (2p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) (2\tilde{p}_1^2 + \tilde{p}_2^2 + \tilde{p}_3^2) \right] \right\} \\ + & U \left\{ b_{p\tilde{p}} \left[2(5p_6^2 - 7p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) (\tilde{p}_4^2 + \tilde{p}_5^2) + p \leftrightarrow \tilde{p} \right] \right. \\ & \left. + 2(5\tilde{p}_6^2 - 3\tilde{p}_1^2 + \tilde{p}_2^2 + \tilde{p}_3^2) (5p_6^2 - 3p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) - 32p_1^2 \tilde{p}_1^2 \right\} \\ + & t_\perp \left\{ 8b_{p\tilde{p}}^2 (p_5^2 \tilde{p}_5^2 - p_4^2 \tilde{p}_4^2) \right. \\ & \left. + 4b_{p\tilde{p}} \left[(5p_6^2 + p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) (\tilde{p}_5^2 - \tilde{p}_4^2) + 4p_1 p_2 (\tilde{p}_4^2 + \tilde{p}_5^2) + p \leftrightarrow \tilde{p} \right] \right. \\ & \left. + 32(p_5^2 \tilde{p}_5^2 - p_4^2 \tilde{p}_4^2) + [16p_1 p_2 (5\tilde{p}_6^2 + \tilde{p}_1^2 + \tilde{p}_2^2 + \tilde{p}_3^2) + p \leftrightarrow \tilde{p}] \right\} \\ + & 8t_\parallel \left\{ (p_4 \tilde{p}_5 + p_5 \tilde{p}_4) (25p_6 \tilde{p}_6 + p_1 \tilde{p}_1 - p_2 \tilde{p}_2 - p_3 \tilde{p}_3) \right. \\ & \left. + (p_5 \tilde{p}_4 - p_4 \tilde{p}_5) (5p_6 \tilde{p}_3 - 5p_3 \tilde{p}_6 + p_2 \tilde{p}_1 - p_1 \tilde{p}_2) \right. \\ & \left. + (p_5 \tilde{p}_5 - p_4 \tilde{p}_4) (-5p_6 \tilde{p}_2 - 5p_2 \tilde{p}_6 + p_3 \tilde{p}_1 + p_1 \tilde{p}_3) \right. \\ & \left. + (p_5 \tilde{p}_5 + p_4 \tilde{p}_4) (-5p_6 \tilde{p}_1 - 5p_1 \tilde{p}_6 + p_2 \tilde{p}_3 + p_3 \tilde{p}_2) \right\},\end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

und die Energie $E_{\tilde{p}p}$ ergibt sich aus (B.23) durch die Ersetzung $b_{p\tilde{p}} \rightarrow b_{\tilde{p}p}$.

B.4 SU(2)-symmetrischer Hamiltonoperator mit einem exakten Grundzustand

In Abschnitt (3.1.2) wurde gezeigt, wie Hamiltonoperatoren mit exakten Grundzustanden fur elektronische Ketten konstruiert werden konnen. Ein einfaches Beispiel ohne Einschrankung an die Gewichte p_i der Zustande im Ansatz (3.7) resultiert aus der Wahl

$$\lambda_0 = \begin{pmatrix} 2c & 0 & 0 \\ 0 & 2c & 0 \\ 0 & 0 & 2c \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \lambda_2 = \begin{pmatrix} c & 0 \\ 0 & c \end{pmatrix} \quad (\text{B.24})$$

fur die Koeffizientenmatrizen in (3.15) mit $c > 0$. Der zugehorige Hamiltonoperator lautet

$$\begin{aligned} H = & 2c [n_{c\uparrow}(x)n_{c\downarrow}(x) + n_{c\uparrow}(y)n_{c\downarrow}(y) + n_{c\uparrow}(x)n_{c\downarrow}(x)n_{c\uparrow}(y)n_{c\downarrow}(y)] \\ & + \frac{2cp_1^2p_2^2}{(p_1^2 + p_2^2)^2} \left[(c_{\uparrow}^{\dagger}(y)c_{\downarrow}^{\dagger}(y)c_{\uparrow}(x)c_{\downarrow}(x) + H.c.) + (c_{\uparrow}(x)c_{\uparrow}(y)c_{\downarrow}(x)c_{\downarrow}(y) + H.c.) \right. \\ & \quad \left. + (n_{c\uparrow}(x) + n_{c\downarrow}(x))(n_{c\uparrow}(y) + n_{c\downarrow}(y)) \right] \\ & - c [n_{c\uparrow}(y)n_{c\downarrow}(y)(n_{c\uparrow}(x) + n_{c\downarrow}(x)) + n_{c\uparrow}(x)n_{c\downarrow}(x)(n_{c\uparrow}(y) + n_{c\downarrow}(y))] \\ & + 2c \frac{p_2^2(p_1^2 + p_2^2)}{(p_1^2 + p_2^2)^2} - c \frac{p_2^2(3p_1^2 + p_2^2)}{(p_1^2 + p_2^2)^2} [n_{c\uparrow}(x) + n_{c\downarrow}(x) + n_{c\uparrow}(y) + n_{c\downarrow}(y)] \\ & - 2c \frac{p_1^3p_2}{(p_1^2 + p_2^2)^2} [c_{\uparrow}^{\dagger}(x)c_{\downarrow}^{\dagger}(x) + c_{\uparrow}^{\dagger}(y)c_{\downarrow}^{\dagger}(y) + H.c.] \\ & + c \frac{p_1p_2(p_1^2 - p_2^2)}{(p_1^2 + p_2^2)^2} [(n_{c\uparrow}(x) + n_{c\downarrow}(x))(c_{\uparrow}^{\dagger}(y)c_{\downarrow}^{\dagger}(y) + H.c.) + x \leftrightarrow y] \end{aligned}$$

mit dem Grundzustand (3.7).

Literaturverzeichnis

- [1] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [2] A. Huebsch, C. Waidacher und K. W. Becker, cond-mat/0106213 .
- [3] S. Zhang, Science **275**, 1089 (1997).
- [4] D. Scalapino, S. Zhang und W. Hanke, Phys. Rev. B **58**, 443 (1998).
- [5] H. Lin, L. Balents und M. Fisher, Phys. Rev. B **58**, 1794 (1998).
- [6] D. Shelton und D. Sénéchal, Phys. Rev. B **58**, 6818 (1998).
- [7] E. Dagotto und T. Rice, Science **271**, 618 (1996).
- [8] S. Rabello, H. Kohno, E. Demler und S. Zhang, Phys. Rev. Lett. **80**, 3586 (1998).
- [9] C. Henley, Phys. Rev. Lett. **80**, 3590 (1998).
- [10] H. Frahm und M. Stahlsmeier, Phys. Rev. B **63**, 125109 (2001).
- [11] I. Affleck, T. Kennedy, E. Lieb und H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **59**, 799 (1987).
- [12] I. Affleck, T. Kennedy, E. Lieb und H. Tasaki, Commun. Math. Phys. **115**, 477 (1988).
- [13] H. Babujian, Physics Letters **90A**, 479 (1982).
- [14] L. Takhtajan, Physics Letters **87A**, 479 (1982).
- [15] B. Sutherland, Phys. Rev. B **12**, 3795 (1975).
- [16] R. Micnas, J. Ranninger und S. Robaszkiewicz, Rev. Mod. Phys. **62**, 113 (1990).
- [17] E. Caixeiro und E. de Mello, cond-mat/0106382 .
- [18] G. Angilella, R. Pucci und F. Siringo, Phys. Rev. B **54**, 15471 (1996).
- [19] E. de Mello, Physica C **259**, 109 (1996).
- [20] E. Caixeiro und E. de Mello, Physica C **353/1-2**, 103 (2001).
- [21] E. de Mello und C. Acha, Phys. Rev. B **56**, 466 (1997).
- [22] E. de Mello und C. Acha, Physica C **282-287**, 1819 (1997).
- [23] T. Maitra, H. Beck und A. Taraphder, Eur. Phys. J. B **21**, 527 (2001).
- [24] C. van Duin und J. Zaanen, Phys. Rev. B **61**, 3676 (2000).
- [25] R. Eder *et al.*, Phys. Rev. B **59**, 561 (1999).
- [26] D. Duffy, S. Haas und E. Kim, Phys. Rev. B **58**, R5932 (1998).
- [27] A. Kolezhuk und H.-J. Mikeska, Int. J. Mod. Phys. B **12**, 2325 (1998).
- [28] M. Fannes, B. Nachtergaele und R. Werner, Europhys. Lett. **10**, 633 (1989).
- [29] A. Klümper, A. Schadschneider und J. Zittartz, Europhys. Lett. **24**, 293 (1993).
- [30] D. Dmitriev, V. Krivnov und A. Ovchinnikov, Eur.Phys.J. B **14**, 91 (2000).
- [31] A. Kolezhuk und H.-J. Mikeska, Phys. Rev. Lett. **80**, 2709 (1998).

- [32] S. Brehmer, H.-J. Mikeska und U. Neugebauer, *J. Phys. Condens. Matter* **8**, 7161 (1996).
- [33] H. Niggemann und J. Zittartz, *Z. Phys. B* **101(2)**, 289 (1996).
- [34] A. Kolezhuk und H.-J. Mikeska, *Eur. Phys. J. B* **5**, 543 (1998).
- [35] J. Roman, G. Sierra, J. Dukelsky und M. Martin-Delgado, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, 9729 (1998).
- [36] A. Klümper, A. Schadschneider und J. Zittartz, *Z. Phys.* **87**, 281 (1992).
- [37] C. Majumdar und D. Ghosh, *J. Math. Phys.* **10**, 1388 and 1399 (1969).
- [38] B. Shastry und B. Sutherland, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 964 (1981).
- [39] B. Shastry und B. Sutherland, *Physica* **108B**, 1069 (1981).
- [40] S. Brehmer, A. Kolezhuk, H.-J. Mikeska und U. Neugebauer, *J. Phys: Condens. Matter* **10**, 1103 (1998).
- [41] D. Dmitriev, V. Krivnov und A. Ovchinnikov, *Phys.Rev. B* **61**, 14592 (2000).
- [42] M. Nakamura, *Phys. Rev. B* **61**, 16377 (2000).
- [43] M. Nakamura, K. Itoh und N. Muramoto, cond-mat/0003419 .
- [44] G. Su, cond-mat/9606012 (1996).
- [45] H. Niggemann und J. Zittartz, *Z. Phys. B* **104**, 103 (1997).
- [46] D. Dmitriev, V. Krivnov und A. Ovchinnikov, *JETP* **88**, 138 (1999).
- [47] M. Martin-Delgado, M. Roncaglia und G. Sierra, *Phys. Rev. B* **64**, 075117 (2001).
- [48] A. Kolezhuk, H.-J. Mikeska und S. Yamamoto, *Phys. Rev. B* **55**, R3336 (1997).
- [49] V. Emery, S. Kivelson und O. Zachar, *Phys. Rev. B* **59**, 15641 (1999).
- [50] M. den Nijs und K. Rommelse, *Phys. Rev. B* **40**, 4709 (1989).
- [51] H. Tasaki, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 798 (1991).
- [52] T. Kennedy und H. Tasaki, *Phys. Rev. B* **45**, 304 (1992).
- [53] T. Kennedy und H. Tasaki, *Comm. Math. Phys.* **147**, 431 (1992).
- [54] K. Totsuka und M. Suzuki, *J.Phys.: Condens. Matter* **7**, 1639 (1995).
- [55] S. White, *Phys. Rev. B* **53**, 52 (1996).
- [56] E. Kim, G. Sierra und D. Duffy, *Phys. Rev. B* **60**, 5169 (1999).
- [57] C. Yang and C. Yang, *J. Math. Phys.* **10**, 1115 (1969).
- [58] M. Takahashi, *Progr. Theor. Phys.* **46**, 401 (1971).
- [59] G. Bedürftig und H. Frahm, *J. Phys. A* **28**, 4453 (1995).
- [60] G. Jüttner und A. Klümper, *Europhys. Lett.* **37**, 335 (1997).
- [61] H. Frahm und C. Rödenbeck, *Eur. Phys. J. B* **10**, 409 (1999).
- [62] H. Frahm, *Nucl. Phys. B* **559 [FS]**, 613 (1999).
- [63] U. Neugebauer und H.-J. Mikeska, *Z. Phys. B* **99**, 151 (1996).
- [64] M. Hagiwara *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 3181 (1990).
- [65] E. Polizzi, F. Mila und E. Sørensen, *Phys. Rev. B* **58**, 2407 .
- [66] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. (London) A* **276**, 238 (1963).

- [67] E. Lieb und F. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
- [68] C. Lai, J. Math. Phys. **15**, 1675 (1974).
- [69] P. Schlottmann, Phys. Rev. B **36**, 5177 (1987).
- [70] P. Bares und G. Blatter, Phys. Rev. Lett. **64**, 2567 (1990).
- [71] H.-Q. Zhou, X.-Y. Ge, J. Links, and M. Gould, Phys. Rev. B **62**, 4906 (2000).
- [72] J. Cornwell, in *Group theory in physics*, Vol. II of *Techniques of Physics*, edited by N. March (Academic Press, ADDRESS, 1984).

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. H. Frahm für die Vergabe des Themas, die sehr gute Betreuung und den großen Freiraum bei der Erstellung der Arbeit bedanken. Weiterhin möchte ich ihm auch für die Ermöglichung der Teilnahme an einigen Sommerschulen und Workshops danken.

Ich danke auch Jakob Nielsen, Alexei Kolezhuk und Martin Müller für die stetige Diskussionsbereitschaft und besonders Constantin Sobiella für die angenehme Atmosphäre im Büro und die vielen Anregungen und Kommentare.

Lebenslauf

Geburtsdatum/-ort 16.04.1972 in Hannover

Schulausbildung

1978-1982 Grundschule Albert-Schweitzer-Schule in Wunstorf
1982-1984 Orientierungstufe Süd Wunstorf
1984-1991 Hölty-Gymnasium Wunstorf
mit Schulabschluß Abitur

Grundwehrdienst

07/1991-09/1991 Grundausbildung in Frankenberg
10/1991-06/1992 Fernmeldekompanie 720 in Hannover/Bothfeld

Hochschulausbildung

10/1992 Beginn des Physikstudiums an der Universität Hannover
10/1994 Diplomvorprüfung
11/1996-10/1997 Diplomarbeit am Institut für Theoretische Physik
der Universität Hannover bei Prof. Dr. H. Frahm
Thema: „Statistik von Anregungen im Spin- S Heisenberg-Modell“
02/1998 Diplomhauptprüfung
seit 03/1998 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut
für Theoretische Physik
seit 03/1998 Mitglied des Graduiertenkollegs
„Quantenfeldtheoretische Methoden in der Teilchenphysik,
Gravitation und Statistischen Physik“

Veröffentlichungen

H. Frahm und M. Stahlsmeier
„Spinon statistics in integrable spin- S Heisenberg chains“
Phys. Lett. A **250**, S. 293-299 (1998)

H. Frahm und M. Stahlsmeier
„Electronic ladders with $SO(5)$ symmetry: Phase diagrams
and correlations at half filling“,
Phys. Rev. B **63**, S. 125109 (2001)

