Thermodynamik und Anregungen von integrablen Quantenketten

Diplomarbeit
von
Christian Scheeren

Institut für Theoretische Physik
der
Universität zu Köln

März 1998

Inhaltsverzeichnis

1. Einführung

1.1. Zur Motivation

Seit der Entdeckung der supraleitenden Kupferoxide [32] sind viele Anstregungen unternommen worden, den Mechanismus der Supraleitung zu verstehen. Die Behandlung von Systemen mit Coulomb-Wechselwirkung auf einem Quadratgitter, die allgemein als das richtige Modell für die Kupfer-Oxide angenommen werden, bereitet immer noch sehr große Probleme. In dieser Arbeit wird, zumindest im ersten Teil, das sog. tJ-Modell [17] behandelt, das in zwei Dimensionen als ein mögliches System zur Beschreibung der Supraleitung angesehen wird. Das Modell erlaubt das Hüpfen von Elektronen auf nächste freie Gitterplätze, verbietet aber die Doppelbesetzung eines Platzes. Im Rahmen der Festkörperphysik leitet man es vom Hubbard-Modell ab, das im Unterschied zum tJ-Modell die Doppelbesetzung eines Platzes zuläßt. Bei Dotierung der Kupfer-Oxid-Ebenen paart sich ein Kupfer-Loch-Spin mit einem delokalisierten Loch-Spin der umgebenenen Sauerstoffatome zu einem sog. Zhang-Rice-Singulett [18]. Diese Sauerstoffatome sind zu berücksichtigende Freiheitsgrade des Systems, die zu einer voneinander unabhängigen Einstellung der Systemparameter t und J führen. Desweiteren macht das Verbot der Doppelbesetzung in diesem Kontext Sinn. Man kann also schließen, daß das tJ-Modell seine eigenständige Bedeutung in der Festkörperphysik hat. Leider ist das tJ-Modell nur in einer Dimension bei $J = 2t$ exakt lösbar, das Auftreten von Supraleitung im Modell wird aber bei einem Kopplungsverhältnis von etwa $t = 4J$ erwartet. Trotzdem ist es interessant, das Modell auch in einer Dimension zu betrachten, da Argumentationen zur Erklärung von Supraleitung existieren, die nicht zuletzt Eigenschaften eindimensionaler Systeme, wie die Trennung von Spin und Ladung, als Grundlage ihrer Hypothesen benutzen [17]. Desweiteren bieten exakt lösbare Systeme immer eine gute Möglichkeit die Zulässigkeit bestimmter Nährungsverfahren zu überprüfen. Außerdem ist es immer interessant, *exakte* Aussagen über ein wechselwirkendes Vielteilchensystem zu erhalten, insbesondere im thermodynamischen Limes, wie es hier für das eindimensionale supersymmetrische tJ-Modell möglich ist. Systeme in höheren Dimensionen sind nur mithilfe von geeigneten Näherungsverfahren analysierbar, bei denen manchmal zweifelhaft ist, ob die gewählte Näherung die Phänomenologie des betrachteten physikalischen Modells noch richtig erfaßt. Es ist daher immer sinnvoll sich dem Modellierungsproblem von allen möglichen Seiten zu nähern, eben auch mit eindimensionalen, aber dafür exakt lösbaren Modellen.

Offensichtlich ist hingegen die Bedeutung eindimensionaler exakt lösbarer Systeme für reale Systeme, die sich quasi-eindimensional verhalten. Als Beispiel seien hier das Kupfer-Germanat genannt, für das die theoretischen Aussagen der exakt lösbaren Spin-$\frac{1}{2}$-Heisenbergkette relevant sind, und das so interessante Eigenschaften wie den Spin-Peierls-Übergang zeigen. Im Rahmen des Studiums solcher Phänomene sind thermodynamische Daten für lokalisierte Spinketten (Heisenbergmodell) und teilgefüllte Ketten (tJ-Modell, Hubbard-Modell) relevant.

1.2. Exakt lösbare Modelle

1925 gelang Ising die Lösung des sog. Ising-Modells [3] in einer Dimension, das den Magnetismus von Isolatoren beschreibt. Es handelt sich hierbei um ein klassisches Modell, da in diesem Modell die dynamischen Freiheitsgrade kommutieren. Die eigentliche Historie der exakt lösbaren Modell begann aber 1944, als Onsager das Ising-Modell in zwei Dimensionen [4] mithilfe der Transfermatrix-Methode löste. Die quantenmechanische Verallgemeinerung des Modells ist das Heisenberg-Modell [2]. In diesem Modell wird die Austausch-Wechselwirkung durch quantenmechanische Observable beschrieben. Die Lösung für die isotrope Spin-$\frac{1}{2}$-Heisenbergkette gelang Bethe 1931 [1]. Die exakte Lösung der anisotropen Heisenberg-Kette, auch XYZ-Kette genannt, da die Kopplungskonstanten in jeder Richtung verschieden sind, gelang Baxter [13] erst Jahrzehnte später, indem er die Verwandschaft des Modells zu einem klassischen zweidimensionalen 8-Vertexmodell erkannte.
Die hier relevante Methode zur Lösung der Modelle ist der Bethe-Ansatz. Ein entscheidender Schritt war die Lösung eines eindimensionalen Fermi-Gases mit Kontakt-Wechselwirkung 1967 [37] durch einen modifizierten, "nested" Bethe-Ansatz, der die Behandlung von Teilchen mit inneren Freiheitsgraden erlaubte. So wurden mit der Zeit andere interessante Modelle in einer Dimension, wie das tJ-Modell, gelöst [20]. Die Interpretation dieser Lösung stützte sich meist auf die sog. String-Hypothese [39], die Vorausannahmen über die Verteilung der Bethe-Ansatz-Zahlen manifestiert. In diesem Kontext wurden die Eigenschaften der Systeme im Grundzustand bei $T = 0$ in befriedigender Weise erklärt. Es ist daher natürlich, daß als nächster Entwicklungsschritt die Frage nach dem Verhalten eines Systems bei *endlichen* Temperaturen aufkam. Die ersten Versuche wurden mithilfe des thermodynamischen Bethe-Ansatzes unternommen, der jedoch auf unendlich viele Integralgleichungen führte. Die Anwendung der Quanten-Transfermatrix [11] hingegegen, ermöglichte im Rahmen der Bethe-Ansatz-Konzeption die thermodynamische Analyse. Aus solchen Betrachtungen erhält man dann die zugehörigen Bethe-Ansatz-Gleichungen, die *im Prinzip* alle thermodynamischen Informationen über das System enthalten. Es stellte trotzdem ein großes Problem dar, im thermodynamischen Limes *exakte* Aussagen über das System zu machen. In dieser Arbeit wird eine Methode von A. Klümper verwendet, die im Rahmen der Berechnung von Finite-Size-Korrekturen [38] entwickelt wurde und diese Problematik beseitigt. Die Bethe-Ansatz-Gleichungen wer-

den in *wenige* Integralgleichungen transformiert, die die Thermodynamik des Systems schon in sehr suggestiver Weise enthalten.

1.3. Aufbau der Arbeit

In Kapitel 2 werden einige Grundlagen der exakt lösbaren Modelle erläutert. Entscheidend für den hier vorgestellten Zugang ist die Entsprechung von eindimensionalen quantenmechanischen Modellen und zweidimensionalen klassischen. Es wird erläutert werden, wie die Integrabilität von zweidimensionalen klassischen mit den eindimensionalen quantenmechanischen Modellen zusammenhängt. Die in diesem Kapitel erläuterten Methoden sind notwendig, um die nicht-linearen Integralgleichungen für das tJ-Modell zu gewinnen, die eine Möglichkeit zur Analyse der Thermodynamik des Systems bei *beliebigen* Temperaturen bieten. In Kapitel 3 wird das tJ-Modell in seinen Grundzügen vorgestellt. Für die Interpretation der Thermodynamik des Systems ist eine qualitative Vorstellung über den Grundzustand und die Elementaranregungen des Systems notwendig. Desweiteren wird die Herleitung der Integralgleichungen nachvollzogen, um abschließend zu erläutern, wie man diese *exakten* Integralgleichungen numerisch auswertet. Die Ergebnisse dieser Berechnungen werden in Kapitel 4 diskutiert. Hier steht vor allem das Verhalten einiger thermodynamischer Größen des Modells im Vordergrund. Das erstellte Programm ermöglicht die Analyse des Systems bei endlichem Magnetfeld im Gegensatz zu den vorhergehenden Berechnungen in [5]. Demzufolge ist die erste Berechnung der magnetischen Suszeptibiltät des supersymmetrischen tJ-Modells bei beliebigen Temperaturen durchgeführt worden. Das letzte Kapitel der Arbeit ist einigen analytischen Rechnungen zum Heisenberg-Modell gewidmet. Nach der Vorstellung des Modells und der Erläuterung, wie bei diesem Modell die Methode der nicht-linearen Integralgleichungen angewendet wird, folgt die Berechnung von Korrelationslängen in der Tieftemperaturasymptotik. Der hier vorgestellte Zugang, der direkt von den nicht-linearen Integralgleichungen ausgeht, ist neuartig und wurde daher für einen Spezialfall des tJ-Modells, dem isotropen Spin-$\frac{1}{2}$-Heisenbergmodell durchgeführt.

2. Grundlagen der exakt lösbaren Modelle

2.1. Zweidimensionale klassische Vertexmodelle

Die Ermittlung der thermodynamischen Eigenschaften einer integrablen Quantenkette mithilfe der Quanten-Transfermatrix macht die Erläuterung der Transfermatrix-Methode für zweidimensionale Vertexmodelle notwendig. Auf den Bonds eines Gitters sind Variablen plaziert, die die Werte $1, 2, ..., q$ annehmen können. Jeder Konfi-

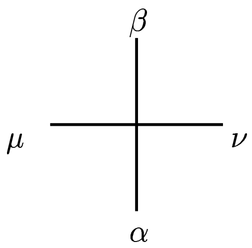

Abbildung 2.1.: Variablen an einem Vertex

guration der Variablen an einem Vertex wird eine Energie ϵ , und damit verbunden das Boltzmann-Gewicht $\exp\{-\epsilon/T\}$, zugeordnet. Dieses Gewicht bezeichne man mit $S^{\mu\nu}_{\alpha\beta}$, wobei dieses offensichtlich q^4 verschiedene, i.a. komplexe Zahlen $S^{\mu\nu}_{\alpha\beta}$ ergibt. Für unsere Zwecke ist es sinnvoll, diese Zahlen mit einem Operator S zu verbinden, der auf das Tensorprodukt eines q-dimensionalen Hilbert-Raumes h mit einem q-dimensionalen Hilfsraum V wirkt

$$\begin{aligned} S \ : \ & h \otimes V \to h \otimes V \\ & |\alpha\rangle\,|\mu\rangle \mapsto S^{\mu\nu}_{\alpha\beta}\,|\beta\rangle\,|\nu\rangle\,. \end{aligned} \tag{2.1}$$

Für zwei solcher S-Operatoren definiert man zwei verschiedene Verknüpfungen:

1. **direktes Produkt**: hier werden die beiden S-Operatoren bzgl. des Quantenraumes h verknüpft, so daß dieser Operator auf $h \otimes V \otimes \bar{V}$ wirkt

$$\left(S \otimes \bar{S}\right)^{(\mu\bar{\mu})(\nu\bar{\nu})}_{\alpha\beta} = S^{\mu\nu}_{\alpha\gamma}\bar{S}^{\bar{\mu}\bar{\nu}}_{\gamma\beta}. \tag{2.2}$$

2. **Multiplikation**: hier geschieht die Verknüpfung im Hilfsraum, so daß der resultierende Operator auf $h \otimes \bar{h} \otimes V$ wirkt

$$\left(S \cdot \bar{S}\right)^{\mu\nu}_{(\alpha\bar{\alpha})(\beta\bar{\beta})} = S^{\mu\lambda}_{\alpha\beta}\bar{S}^{\lambda\nu}_{\bar{\alpha}\bar{\beta}}. \tag{2.3}$$

Mit diesen Definitionen kann man ein Quadratgitter aus den einzelnen Vertizes aufbauen. Für eine Reihe von Vertizes hat der zugehörige Operator die folgende Gestalt und heißt *Monodromie-Matrix*:

$$\mathcal{T} = S_1 \cdot \ldots \cdot S_L : (h_1 \otimes \ldots \otimes h_L) \otimes V \to (h_1 \otimes \ldots \otimes h_L) \otimes V \tag{2.4}$$

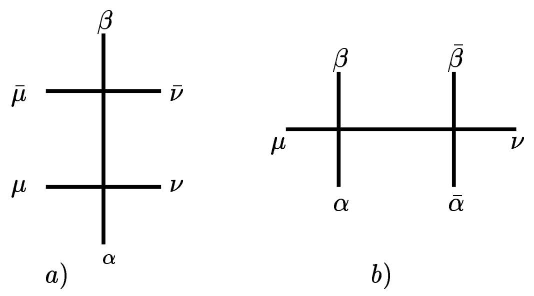

Abbildung 2.2.: a) direktes Produkt, b) Multiplikation

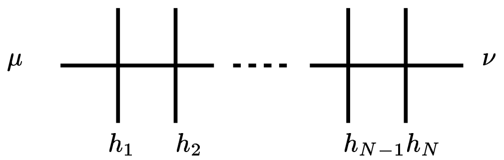

Abbildung 2.3.: graphische Darstellung der Monodromie-Matrix

Hier wird $\mathcal{T}$ als Matrix über den Hilfsindex aufgefaßt. Die graphische Darstellung macht klar, daß dieses offenen Randbedingungen in horizontaler Richtung entspricht. Jeder Eintrag $\mathcal{T}_{\mu\nu}$ ist ein Operator, der auf $\mathcal{H} = \bigotimes_{i=1}^{L} h_i$ wirkt. In den meisten Fällen sind die Hilberträume h_i für alle Gitterplätze i identisch. Wenn zusätzlich auch alle S-Operatoren an den verschiedenen Plätzen identisch sind, d.h. es gilt für alle i $S_i \equiv S$, so nennt man das Modell *homogen* und es folgt $\mathcal{T} = S^L$. Bei periodischen Randbedingungen muß $\mu = \nu$ gelten. Das entspricht gerade der Spurbildung über die Monodromie-Matrix. Man gelangt so zur *Reihen-Transfermatrix*

$$T = \mathrm{S}pur_V \mathcal{T} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}. \tag{2.5}$$

Die einzelnen Elemente $T_{\alpha\beta}$ der Transfermatrix mit $\alpha = (\alpha_1, \ldots, \alpha_L)$ ergeben dann den Beitrag der jeweiligen Reihe zur Zustandssumme, wenn α und β fest sind.[1] Um die Zustandssumme durch die Transfermatrix auszudrücken, berechnet man das Produkt der einzelnen Reihen-Transfermatrizen in $\mathcal{H}$, d.h. $T_1 \cdot \ldots \cdot T_M$. Dieses Produkt entspricht einer Summe aus Boltzmann-Gewichten auf einem Quadratgitter mit M Reihen und L Spalten und offenen Randbedingungen in der vertikalen Richtung. Sind die Reihen des Gitters alle von demselben Typus, so vereinfacht sich das Produkt auf T^M. Setzt man periodische Randbedingungen auch in vertikaler Richtung voraus, ergibt sich für die Zustandssumme

$$Z = \mathrm{Spur}_{\mathcal{H}} T^M. \tag{2.6}$$

Diese Gleichung ist von zentraler Bedeutung, da alle thermodynamischen Größen aus der Zustandssumme gewonnen werden können. Hat man die Transfermatrix

[1] Im Falle von zweidimensionalen Quantenräumen $h_i = h$ ist T eine $2^N \times 2^N$-Matrix.

diagonalisiert, gilt mit ihren Eigenwerten[2]

$$Z = \sum_{i=1}^{|\mathcal{H}|} \Lambda_i^M. \tag{2.7}$$

Im Limes $M \to \infty$ dominiert der größte Eigenwert der Transfermatrix $\Lambda_{\max}$ in der Zustandsumme, so daß für die freie Energie

$$-\beta f = \lim_{M,L\to\infty} \frac{1}{ML} \log Z = \lim_{M\to\infty} F/M = \ln \Lambda_{\max} \tag{2.8}$$

folgt.

2.2. Die Beziehung von Quantenketten und zweidimensionalen klassischen Modellen

In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, wie gewisse eindimensionale Hamilton-Operatoren in eine Familie von Transfer-Matrizen eines klassischen zweidimensionalen Vertexmodells eingebettet sind. Dazu ist es notwendig, einige weitere Eigenschaften zweidimensionaler Systeme zu beleuchten. Bei der Definition eines statistischen Modells betrachtet man i.a. nicht einen speziellen Satz von Boltzmann-Gewichten, sondern eine parametrisierte Familie von Gewichten, die von einem sog. *Spektralparameter* $v \in \mathbb{C}$ abhängt. Nehmen wir also an, der oben eingeführte Gewichtsoperator S sei abhängig von diesem Spektralparameter v, d.h. $S = S(v)$. Desweiteren sei vorausgesetzt, daß ein spezieller Wert $v = \lambda$ des Spektralparameters existiert, an dem die Vertizes entkoppeln, womit

$$S_{\alpha\beta}^{\mu\nu} = \delta_\alpha^\nu \delta_\beta^\mu \tag{2.9}$$

gemeint ist. Dieser Ausdruck ist nur wohldefiniert, wenn man im Modell Quanten -und Hilfsraum identifizieren kann, also

$$h \equiv V \tag{2.10}$$

gilt. Wie aus Abbildung 2.4 ersichtlich, bewirkt die Entkopplung eine Verschiebung um einen Gitterplatz nach rechts, so daß die Transfermatrix am Entkopplungspunkt dem geeigneten Verschiebungsoperator T_R entspricht

$$T(\lambda) = T_R \qquad \text{mit} \qquad (T_R)_{\alpha\beta} = \prod_i \delta_{\alpha_i \beta_{i+1}}. \tag{2.11}$$

Man entwickelt jetzt die Transfermatrix am Entkopplungspunkt und ist daher an der Ableitung der Transfermatrix nach dem Spektralparameter am Entkopplungspunkt

[2] $|\cdot|$ bezeichnet die Dimension des Raumes.

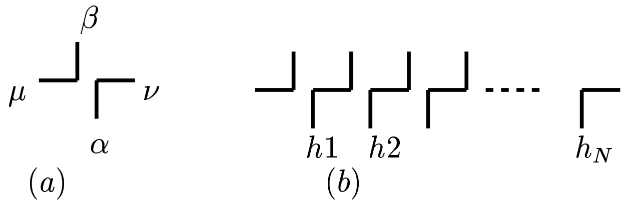

Abbildung 2.4.: Entkopplung (a) am einzelnen Vertex, (b) der Transfer-Matrix

interessiert. Aufgrund der Struktur der Transfermatrix als Spur im Hilfsraum über das Produkt der S-Operatoren ergibt sich nach Produktregel

$$\begin{aligned}\left(\frac{d}{dv}T(v)\Big|_{v=\lambda}\right)_{\alpha\beta} &= \left(\mathrm{Spur}_V\left\{\sum_{i=1}^{L}\left(\prod_{j=1}^{i-1}S_j(\lambda)\cdot S_i'(\lambda)\cdot\prod_{j=i+1}^{L}S_j(\lambda)\right)\right\}\right)_{\alpha\beta} \qquad (2.12)\\ &= \delta_{\mu\beta_1}\delta_{\alpha_1\beta_2}\cdots\delta_{\alpha_{i-2}\beta_{i-1}}\left(S^{\alpha_{i-1}\beta_{i+1}}_{\alpha_i\beta i}\right)'(\lambda)\delta_{\alpha_{i+1}\beta_{i+2}}\cdots\delta_{\alpha_L\mu}.\end{aligned}$$

Um wieder zum alten Gitterplatz zurückzugelangen, multipliziert man mit T^{-1}

$$\left(T^{-1}(\lambda)\cdot T'(\lambda)\right)_{\alpha\beta} = \sum_i\left\{\prod_{j\neq i,i+1}\delta_{\alpha_j\beta_j}\right\}\left(S^{\alpha_{i+1}\beta_i}_{\alpha_i\beta_{i+1}}\right)'(\lambda). \qquad (2.13)$$

Es ist sehr wichtig zu bemerken, daß auf der rechten Seite eine Summe *lokaler* Operatoren $h_{i,i+1}$ steht, die nur nicht-trivial in $h_i\otimes h_{i+1}$ wirken. Die linke Seite hingegen kann formal als Ableitung des Logarithmus der Transfermatrix geschrieben werden

$$(\ln T)'(\lambda) = \sum_i h_{i,i+1}\equiv H. \qquad (2.14)$$

Die Gleichung (2.14) stellt die entscheidende Beziehung zwischen klassischen zweidimensionalen Vertexmodellen und eindimensionalen quantenmechanischen Modellen dar. Die logarithmische Ableitung der Transfermatrix am Entkopplungspunkt liefert einen Hamilton-Operator H mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung im Hilbertraum $\mathcal{H}$. Nehmen wir an, die Transfermatrix T sei schon diagonalisiert mit den Eigenwerten $\{\Lambda_k\}$, so ist über $(\ln\Lambda_k)'(\lambda) = E_k$ auch das gesamte Spektrum von H bekannt. Im Rahmen dieser Arbeit sind wir jedoch an physikalischen Größen des quantenmechanischen Systems bei endlicher Temperatur interessiert, die sich genauso wie beim klassischen Modell in (2.8) aus der Zustandssumme gewinnen lassen. Wie ist also der Zusammenhang zwischen Transfermatrix und quantenmechanischer Zustandssumme? Mit den obigen Relationen wird die Transfermatrix T am Entkopplungspunkt $v=\lambda$ in eine Taylorreihe entwickelt. Da für das Perk-Schultz-Modell, dem klassischen Analogon des tJ-Modells, o.B.d.A. $\lambda = 0$ gilt, wird im folgenden dieser Fall betrachtet

$$T(v) = T_R\cdot e^{vH+\mathcal{O}(v^2)}. \qquad (2.15)$$

Man nimmt an, eine zweite Familie von Transfer-Matrizen $\bar{T}(v)$ mit dem entsprechenden Entkopplungspunkt $\bar{\lambda}$ existiere, die die oben geforderten Eigenschaften[3]

$$\bar{T}(0) = T_R^{-1}, \qquad \left(\ln \bar{T}\right)' = \pm H \tag{2.16}$$

erfüllt. Dies erscheint auf den ersten Blick als sehr starke Anforderung an das jeweilige Modell, aber es zeigt sich im Perk-Schultz-Modell, daß die zu denen um 90° gedrehten Vertizes gehörende Transfermatrix auch die Yang-Baxter-Gleichungen (2.33) erfüllt. Und diese Gleichungen sind die hinreichende Bedingung für die Integrabilität des klassischen Modells (siehe Abb. 2.5). Obige Entwicklung kann natürlich auch für

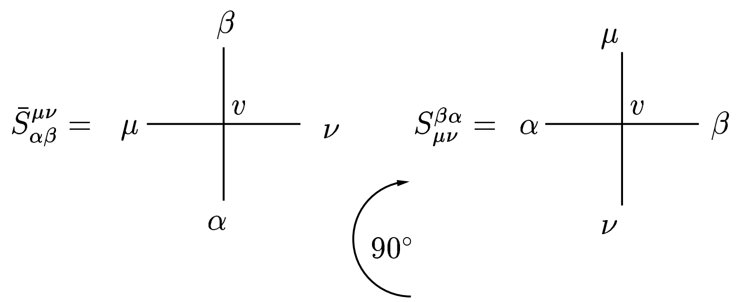

Abbildung 2.5.: gedrehter Vertex

$\bar{T}$ durchgeführt werden

$$\bar{T}(v) = T_R^{-1} \cdot e^{vH + \mathcal{O}(v^2)}. \tag{2.17}$$

Entwickelt man also die Exponentialfunktion bis zur ersten Ordung und beachtet, daß H translationsinvariant ist, so folgt

$$T(v)\bar{T}(v) = e^{2vH + \mathcal{O}(v^2)}. \tag{2.18}$$

Einführen der Trotter-Zahl M über $v = -\frac{\beta}{M}$ und Potenzieren von (2.18) mit $\frac{M}{2}$ liefert gerade die für die quantenmechanische Zustandssumme gewünschten Summanden und damit die Zustandssumme selbst

$$\begin{aligned} \left(T(v)\bar{T}(v)\right)^{\frac{M}{2}} &= e^{-\beta H + \mathcal{O}(1/M)} \\ Z &= \lim_{M\to\infty} \operatorname{Spur}\left(T(v)\bar{T}(v)\right)^{\frac{M}{2}}. \end{aligned} \tag{2.19}$$

Dieser Ausdruck beschreibt die Trotter-Suzuki-Abbildung eines eindimensionalen quantenmechanischen Systems auf ein zweidimensionales klassisches [11]. Desweiteren beschreibt er offensichtlich ein inhomogenes zweidimensionales Modell mit alternierenden Reihen. Man kann die hier interessierenden Größen mit der Zustandssumme des klassischen Systems wie oben beschrieben in Verbindung bringen. Der Ausdruck (2.19) stellt nur ein Zwischenergebnis dar, da $T \cdot \bar{T}$ keine Lücke zwischen dem

[3] Es gilt $\overline{\lambda} = 0$.

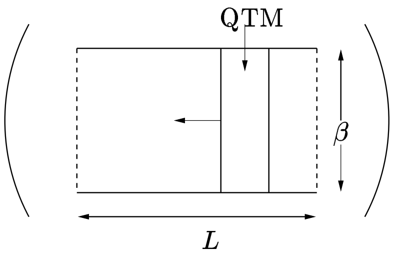

Abbildung 2.6.: Quanten-Transfermatrix

größten und dem zweitgrößten Eigenwert aufweist. Abhilfe schafft hier der Übergang zur Spalten-Transfermatrix. Drehen der Gewichte um 90° liefert eine Spalten-Transfermatrix, die eine Lücke zwischen dem größten und dem nächstgrößten Eigenwert besitzt.[4] Dieses Objekt bezeichnet man als *Quanten-Transfermatrix* (QTM) und seine Wirkung auf dem Gitter ist in Abbildung 2.6 graphisch dargestellt

$$T^{\mathrm{QTM}}(v,v) = \mathrm{Spur}_V \left(S(v) \cdot \bar{S}(v)\right)^{M/2}. \tag{2.20}$$

Damit ergibt sich ür die Zustandssumme dieses inhomogenen Modells

$$Z = \lim_{M\to\infty} \mathrm{Spur}\left(T^{\mathrm{QTM}}(v,v)\right)^M. \tag{2.21}$$

Das Verfahren wird am expliziten Modell in Abschnitt 3.4 nochmals erläutert. Es ist zu bemerken, daß $T^{\mathrm{QTM}}(v,v)$ nicht von L abhängt und die Limites von L und M gegen Unendlich nach [11] und [12] vertauschbar sind. Daher liefert der Reihenlimes L einfach den dominanten Eigenwert Λ_{max} der Quanten-Transfermatrix, so daß sich für die freie Energie

$$f = -\frac{1}{\beta} \lim_{M\to\infty} \ln \Lambda_{max} \tag{2.22}$$

mit $\beta = 1/T$ ergibt. Das ist der Ausgangspunkt zur Berechnung der Thermodynamik eines eindimensionalen Quantensystems, dessen Integrabilität bei der Abbildung auf ein zweidimensionales klassisches Modell erhalten bleibt. Es ist dabei wesentlich, daß die gesamte Thermodynamik des Systems aus der Kenntnis des größten Eigenwertes der Quanten-Transfermatrix Λ_{max} gewonnen werden kann. Im nächsten Abschnitt soll die Rolle der nächstgrößten Eigenwerte der Quantentransfermatrix untersucht werden. Es wird ihr Zusammenhang mit Korrelationslängen und Erwartungswerten des Systems klar werden.

2.3. Korrelationslängen im Transfermatrix-Zugang

In diesem Abschnitt soll das Auftreten von Korrelationslängen im Transfermatrix-Zugang erläutert werden. Das eindimensionale Ising Modell im äußeren Magnetfeld h

[4]Solche Rotationseigenschaften der Vertizes sind auch für einige andere integrable Modelle erfüllt.

ist eines der einfachsten Modelle, das mithilfe der Transfermatrix-Methode diagonalisiert werden kann und ist daher geeignet, das Grundprinzip zu erklären. Man stellt sich eine Kette der Länge L von klassischen Spins mit zwei Einstellmöglichkeiten $\sigma_i = \pm 1$ am Platz i vor. Die Zustandssumme des Systems ist dann durch

$$\mathcal{Z}_L = \sum_{\sigma_1,\sigma_2,\dots,\sigma_L} e^{K \sum\limits_{\langle i,j\rangle} \sigma_i\sigma_j + h\sum\limits_i \sigma_i} \tag{2.23}$$

mit periodischen Randbedingungen $\sigma_{L+1} = \sigma_1$ gegeben. In diesem einfachen Fall gilt wie in 2 Dimensionen $\mathcal{Z} = \mathrm{Spur} T^L$ mit der 2×2-Transfermatrix

$$T = \begin{pmatrix} e^{K+h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-h} \end{pmatrix}, \tag{2.24}$$

die in einer Dimension nicht von L abhängt und endlich ist, da das Modell klassisch ist. Betrachtet man einen lokalen Operator Θ_i am Gitterplatz i, d.h. einen Operator der von σ_i abhängt, so ist man zum Beispiel an

$$\langle \Theta_1 \Theta_{r+1} \rangle = \frac{\sum\limits_{\sigma_1,\sigma_2,\dots,\sigma_L} \Theta(\sigma_1)\Theta(\sigma_{r+1}) e^{K \sum\limits_{\langle i,j\rangle} \sigma_i\sigma_j + h\sum\limits_i \sigma_i}}{e^{K \sum\limits_{\langle i,j\rangle} \sigma_i\sigma_j + h\sum\limits_i \sigma_i}} \tag{2.25}$$

interessiert. Oder durch die Transfermatrix ausgedrückt

$$\begin{aligned} \langle \Theta_1 \Theta_{r+1} \rangle &= \frac{\sum\limits_{\sigma_1,\sigma_2,\dots,\sigma_L} \left[\Theta(\sigma_1) T_{\sigma_1\sigma_2} T_{\sigma_2\sigma_3} \cdot \ldots \cdot T_{\sigma_r\sigma_{r+1}} \Theta(\sigma_{r+1}) T_{\sigma_{r+1}\sigma_{r+2}} \cdot \ldots \right]}{\mathrm{Spur}\boldsymbol{T}^L} \\ &= \frac{\mathrm{Spur}\left(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{T}^r\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{T}^{N-r}\right)}{\mathrm{Spur}\boldsymbol{T}^L}. \end{aligned} \tag{2.26}$$

$\boldsymbol{\sigma}$ sind diagonale Matrizen mit den Einträgen $\boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} = \Theta(\sigma)\cdot\delta(\sigma\sigma')$. Um den Ausdruck weiter auszuwerten, schiebt man zweimal einen vollständigen Satz der Eigenvektoren der Transfermatrix $\mathbb{1} = \sum_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i|$ ein

$$\begin{aligned} \langle \Theta_1 \Theta_{r+1} \rangle &= \frac{\sum\limits_{ij} \langle\psi_i|\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{T}^r|\psi_j\rangle \langle\psi_j|\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{T}^{L-r}|\psi_i\rangle}{\sum\limits_i \langle\psi_i|\boldsymbol{T}^L|\psi_i\rangle} \\ &= \frac{\sum\limits_{ij} |\langle\psi_i|\boldsymbol{\sigma}|\psi_j\rangle|^2 \Lambda_j^r \Lambda_i^{N-r}}{\sum\limits_i \Lambda_i^N} \\ &= \sum_j |\langle\psi_1|\boldsymbol{\sigma}|\psi_j\rangle|^2 \cdot \left(\frac{\Lambda_j}{\Lambda_1}\right)^r \\ &= |\langle\psi_1|\boldsymbol{\sigma}|\psi_1\rangle|^2 + |\langle\psi_1|\boldsymbol{\sigma}|\psi_2\rangle|^2 \cdot \left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1}\right)^r + \ldots . \end{aligned} \tag{2.27}$$

$\{\Lambda_i\}$ sind hier die Eigenwerte der Transfermatrix, Λ_1 ihr größter. Bei der Rechnung wird vorausgesetzt, daß eine Lücke zwischen dem größten und dem nächstgrößten Eigenwert existiert, d.h. $\Lambda_1 > \Lambda_2$. Daher dominiert im Limes $L \to \infty$ der größte Eigenwert wie in (2.27) ersichtlich. Nimmt man typisches Ornstein-Zernicke-Verhalten

$$g(x) \sim x^{-\tau} e^{-x/\xi}, \quad x \to \infty, \tag{2.28}$$

beim Zerfall der Korrelationen an und vergleicht diesen Ausdruck mit der letzten Zeile in (2.27), so kann man die Korrelationslänge mit

$$\xi^{-1} = -\ln\left(\Lambda_2/\Lambda_1\right) \tag{2.29}$$

identifizieren[5]. Im zweiten Teil der Arbeit wird ein analytischer Ausdruck für die Korrelationslänge des isotropen Heisenbergmodells hergeleitet, der durch (2.29) gewonnen wird.

[5]In dieser Betrachtung gilt $x \approx r$.

2.4. Die Yang-Baxter-Gleichung

Da wir uns im Rahmen dieser Arbeit mit der Abbildung einer Quantenkette auf ein *integrables* klassisches Modell beschäftigen, spielt die Frage nach einem Kriterium für die Integrabilität eines klassischen Modells eine entscheidende Rolle. Es zeigt sich, daß die Yang-Baxter-Gleichungen [13] ein hinreichendes Kriterium für diese Integrabilität bilden. Sie sind eng mit der Konzeption der kommutierenden Transfer-Matrizen verknüpft, womit gemeint ist, daß – eine geeignete Parametrisierung der Boltzmann-Gewichte vorausgesetzt – die Transfermatrizen für beliebige Werte des Spektralparameters miteinander kommutieren, d.h.

$$[T(u), T(v)] = 0 \qquad \text{für alle } u \text{ und } v. \tag{2.30}$$

Es folgt natürlich, daß diese Familie von Transfer-Matrizen simultan diagonalisiert werden kann mit Eigenvektoren, die unabhängig vom Spektralparameter sind. Daher stellt sich die Frage, wie bei einem gegebenen Satz von Boltzmann-Gewichten die zugehörige Transfermatrix in eine Familie kommutierender Transfermatrizen eingebettet werden kann.
Im folgenden sollen zwei unterschiedliche Sätze von Gewichtsoperatoren S und $\bar{S}$ mit den zugehörigen Transfermatrizen T und $\bar{T}$ betrachtet werden. Man sucht jetzt nach einer Bedingung für die Gewichtsoperatoren, so daß

$$\left[T, \bar{T}\right] = 0 \tag{2.31}$$

folgt. (2.31) ist offensichtlich erfüllt, wenn eine nicht-singuläre Matrix R existiert, so daß

$$R\left[\mathcal{T} \otimes \bar{\mathcal{T}}\right] = \left[\bar{\mathcal{T}} \otimes \mathcal{T}\right] R \tag{2.32}$$

gilt. Denn es folgt (2.31) durch Multiplikation mit R^{-1} und Spurbildung über dem Hilfsraum. Will man (2.32) aus einer *lokalen* Bedingung folgern, kann man

$$R\left[S_i \otimes \bar{S}_i\right] = \left[\bar{S}_i \otimes S_i\right] R \tag{2.33}$$

fordern. Das sind genau die Yang-Baxter-Gleichungen, auf deren formale Ableitung wir hier verzichten wollen und stattdessen den graphischen "Beweis" angeben (Abb. 2.7). In denen zum tJ-Modell und Heisenbergmodell zugehörigen Vertexmodellen sind die Boltzmann-Gewichte in parametrisierter Form gegeben und S und $\bar{S}$ gehören zu verschiedenen Werten des Spektralparameters, z.B u und v. Folglich gilt dann auch für die R-Matrix $R = R(u, v)$. In vielen Fällen liegt jedoch die R-Matrix mit Differenzabhängigkeit vor, also $R = R(u - v)$. Dies gestattet die Betrachtung inhomogener Modelle mithilfe der Yang-Baxter-Gleichungen (2.33). Im inhomogenen Fall gilt $S(u_i)$ und $\bar{S}_i = S(v_i)$. Setzt man $u_i = u + \lambda_i, v_i = v + \lambda_i$, so hängt die Differenz nicht mehr von i ab und, wie für die Yang-Baxter-Gleichungen notwendig, hat R dann ebenfalls keine lokale Abhängigkeit mehr, so daß man (2.32) und (2.33) folgern

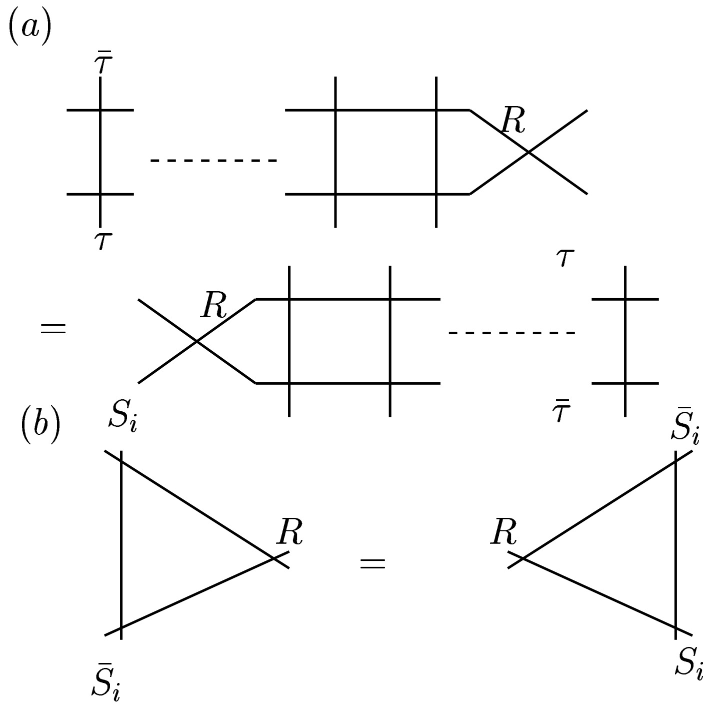

Abbildung 2.7.: (a) Verknüpfungsbeziehung der Monodromie-Matrizen und (b) Yang-Baxter-Gleichung

kann. Es ist also möglich, die inhomogene Transfermatrix in eine kommutierende Familie einzubetten, was die entscheidende Bedingung für die exakte Lösbarkeit war. Im oft vorkommenden Fall $|V| = |H|$ kann die R-Matrix aus dem Gewichtsoperator S selbst konstruiert werden, in dem man S auf $V \otimes V$ anstelle von $h \otimes V$ wirken läßt und mit dem Permutationsoperator $P^{\mu\nu}_{\alpha\beta} = \delta^{\nu}_{\alpha} \cdot \delta^{\mu}_{\beta}$ multipliziert. Wenn dann (2.33) mit $R = P \cdot S$ erfüllt ist, kann man die Yang-Baxter-Gleichungen als

$$PS(u-v)\,[S(u) \otimes S(v)] = [S(v) \otimes S(u)]\,PS(u-v) \tag{2.34}$$

formulieren.
Die hier genannten Eigenschaften spielen bei der Lösung des für das tJ-Modell relevanten Perk-Schultz-Modells eine wichtige Rolle.

2.5. Der algebraische Bethe-Ansatz

Das Ziel des algebraischen Bethe-Ansatzes ist die Diagonalisierung der Transfermatrix durch explizite Konstruktion ihrer Eigenzustände. Die Vorgehensweise zur Diagonalisierung kann man wie folgt beschreiben:

- Man sucht zuerst einen Vakuum-Zustand. Das ist ein einfacher Eigenzustand der Transfermatrix T, der von den meisten der operatorwertigen Einträge der Monodromie-Matrix $\mathcal{T}$ vernichtet wird. Diese Operatoren heißen dann Vernichter.

- Nun wendet man Einträge der Monodromie-Matrix, die den Vakuum-Zustand nicht vernichten, auf eben diesen Zustand an (Erzeuger).

- Aus den Yang-Baxter-Gleichungen liest man die Kommutatoreigenschaften der Operator-Einträge von $\mathcal{T}$ ab und man findet unter bestimmten Bedingungen, den sog. Bethe-Ansatz-Gleichungen, die Eigenzustände von T.

Zur Erläuterung der Methode soll hier der einfachste nicht-triviale Fall besprochen werden. In Abschnitt 2.1 wurde gezeigt, daß die Monodromie-Matrix auf dem direkten Produkt des globalen Hilbertraums $\mathcal{H}$ und des Hilfsraums V definiert ist und als Matrix über dem Hilfsraum V notiert wird, die auf $\mathcal{H}$ operierende Einträge hat. Im einfachsten Fall $|V| = 2$ gilt

$$\mathcal{T}(v) = \begin{pmatrix} A(v) & B(v) \\ C(v) & D(v) \end{pmatrix}. \tag{2.35}$$

Wir nehmen jetzt die folgende Form der R-Matrix an

$$R(v) = \begin{pmatrix} a(v) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(v) & c(v) & 0 \\ 0 & c(v) & b(v) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a(v) \end{pmatrix}. \tag{2.36}$$

Die R-Matrix des 6-Vertex-Modells ist genau von dieser Struktur [13]. Mit diesen beiden Beziehungen kann man jetzt explizit (2.32) auswerten und gelangt zu 16 Gleichungen.[6] So erhält man eine Operator-Algebra für die Matrix-Einträge von $\mathcal{T}$. Für die weitere Betrachtung sind drei dieser Beziehungen relevant

$$\begin{aligned} B(v)B(w) &= B(w)B(v) \\ A(v)B(w) &= \frac{a(w-v)}{c(w-v)}B(w)A(v) - \frac{b(w-v)}{c(w-v)}B(v)A(w) \\ D(v)B(w) &= \frac{a(v-w)}{c(v-w)}B(w)D(v) - \frac{b(v-w)}{c(v-w)}B(v)D(w). \end{aligned} \tag{2.37}$$

[6]In diesem Kapitel wird angenommen, die R-Matrix habe die Differenzabhängigkeit $R(u-v)$.

Wie oben angedeutet, benötigt man jetzt einen Referenzzustand $|\Omega\rangle \in H$, der der Bedingung

$$\mathcal{T}\,|\Omega\rangle = \begin{pmatrix} \alpha(v)\,|\Omega\rangle & * \\ 0 & \delta(v)\,|\Omega\rangle \end{pmatrix} \tag{2.38}$$

genügt, damit sichergestellt ist, daß $|\Omega\rangle$ über

$$T(v)\,|\Omega\rangle = (\alpha(v) + \delta(v))\,|\Omega\rangle \tag{2.39}$$

ein Eigenzustand der Transfer-Matrix T ist. Diese Eigenschaft des Vakuum-Zustandes ist keinesfalls selbstverständlich und muß von Modell zu Modell neu ermittelt werden.

Man versucht jetzt, mit dem Erzeugungsoperator $B(v_1)$ einen weiteren Eigenzustand von $T(v) = A(v) + D(v)$ gemäß

$$|\Phi(v_1)\rangle = b(v_1)\,|\Omega\rangle \tag{2.40}$$

zu konstruieren. Dazu sind A und D mit den Vertauschungsregeln (2.37) an B vorbeizuziehen, da die Wirkung dieser beiden Operatoren auf $|\Omega\rangle$ nach (2.39) bekannt ist,

$$\begin{aligned} T(v)\,|\Phi(v_1)\rangle &= \left(\alpha(v)\frac{a(v_1-v)}{c(v_1-v)} + \delta(v)\frac{a(v-v_1)}{c(v-v_1)}\right)|\Phi(v_1)\rangle \\ &- \left(\alpha(v_1)\frac{b(v_1-v)}{c(v_1-v)} + \delta(v_1)\frac{b(v-v_1)}{c(v-v_1)}\right)B(v)\,|\Omega\rangle\,. \end{aligned} \tag{2.41}$$

Also ist $|\Phi(v_1)\rangle$ ein Eigenzustand von $T(v)$ mit dem Eigenwert

$$\Lambda(v, v_1) = \alpha(v)\frac{a(v_1-v)}{c(v_1-v)} + \delta(v)\frac{a(v-v_1)}{c(v-v_1)}, \tag{2.42}$$

wenn nur die Bedingung

$$\frac{\alpha(v_1)}{\delta(v_1)} = \frac{c(v_1-v)}{b(v_1-v)}\frac{b(v-v_1)}{c(v-v_1)} \tag{2.43}$$

erfüllt ist. Eine Verallgemeinerung dieser Überlegung für einen n-Teilchenzustand ergibt, daß für den Zustand

$$|\Phi(\{v_i\})\rangle = \prod_{i=1}^{n} B(v_i)\,|\Omega\rangle \tag{2.44}$$

n ungleiche Zahlen $v_1, \ldots, v_n$ existieren, so daß dieser Zustand ein Eigenzustand von $T(v)$ mit dem Eigenwert

$$\Lambda(v, \{v_i\}) = \alpha(v)\prod_{i=1}^{n}\frac{a(v_i-v)}{c(v_i-v)} + \delta(v)\prod_{i=1}^{n}\frac{a(v-v_i)}{c(v-v_i)} \tag{2.45}$$

ist, wenn

$$\frac{\alpha(v_i)}{\delta(v_i)} = -\frac{b(v-v_i)}{b(v_i-v)}\frac{c(v_i-v)}{c(v-v_i)}\prod_{j\neq i}\frac{a(v_i-v_j)}{a(v_j-v_i)}\frac{c(v_j-v_i)}{c(v_i-v_j)} \tag{2.46}$$

erfüllt ist. Diese Nebenbedingungen ergeben gerade die Bethe-Ansatz-Gleichungen. Es ist noch zu bemerken, daß sich diese Gleichung auch durch die Forderung nach Analytizität des Eigenwertes $\Lambda(v)$ (2.45) in der gesamten komplexen Ebene ergibt.

$$\mathrm{Res}\ \Lambda(v=v_i) = 0 \qquad i = 1, \dots, n. \tag{2.47}$$

Anders ausgedrückt gewährleisten die Bethe-Ansatz-Gleichungen, daß im Eigenwert Λ die Nenner-Nullstellen durch die Zähler-Nullstellen kompensiert werden.

3. Das tJ-Modell

3.1. Beschreibung des Modells

Aufgrund seiner Relevanz für die Hochtemperatur-Supraleitung ([17],[18]) hat das tJ-Modell auf vielfältige Weise wissenschaftliches Interesse geweckt. Das Modell beschreibt das Hüpfen von Elektronen auf nächst-benachbarte *freie* Plätze und die Austauschwechselwirkung der Spins zweier Elektronen auf Nachbarplätzen. Die Dynamik des Modells wird durch einen Hamiltonoperator der Gestalt

$$\mathcal{H} = -t \sum_{j,\sigma} \mathcal{P}(c^{\dagger}_{j,\sigma} c_{j+1,\sigma} + c^{\dagger}_{j+1,\sigma} c_{j,\sigma})\mathcal{P} + J \sum_{j} (S_j S_{j+1} - n_j n_{j+1}/4), \tag{3.1}$$

mit dem Projektor $\mathcal{P} = \prod_j (1 - n_{j\uparrow} n_{j\downarrow})$ beschrieben. Dieser Projektor verhindert Doppelbesetzung der Gitterplätze durch Elektronen. Das entspricht einer unendlich großen Coulomb-Abstoßung auf dem Gitterplatz. In einem externen Feld h und bei Berücksichtigung eines chemischen Potentials μ muß man dem obigen Hamilton-Operator den Term

$$\Delta\mathcal{H} = \sum_{j=1}^{L} \left(-\mu n_j - \frac{h}{2}(n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow}) \right) \tag{3.2}$$

hinzufügen. Im zugehörigen klassischen Perk-Schultz-Modell [15] muß man dazu in einer Richtung die Randbedingungen fixieren, was aber ohne Probleme möglich ist (zur Methode siehe [7]). Wie in der Einleitung erwähnt, ist das tJ-Modell mit dem Hubbard-Modell verwandt, das die Doppelbesetzung aller Gitterplätze zuläßt. Man kann das repulsive Hubbard-Modell mit großer Coulomb-Wechselwirkung U auf ein tJ-Modell mit $t \gg J$ abbilden [19]. Trotzdem hat das tJ-Modell mit freier Wahl der Parameter t und J eine eigenständige Bedeutung zur Beschreibung stark korrelierter Fermionensysteme. Exakt lösbar ist dieses Modell allerdings nur für $t = \pm 2J$ in einer Dimension, da nur hier die Zweiteilchen-Streumatrix den Yang-Baxter-Gleichungen (2.33) genügt [20]. Auch im Rahmen dieser Arbeit wird nur dieser "supersymmetrische" [21] Fall behandelt. Obwohl das hier verwendete Verfahren der Quanten-Transfermatrix gerade die Berechnung thermodynamischer Größen bei endlicher Temperatur erlaubt, soll im folgenden Abschnitt zunächst die Vorgehensweise beim traditionellen Bethe-Ansatz für den Grundzustand des tJ-Modells erläutert werden, da das dort gewonnenene Bild der Elementaranregungen wesentlich in die Diskussion der Thermodynamik eingeht.

3.2. Grundzustand des tJ-Modells

3.2.1. Der geschachtelte Bethe Ansatz

Der 1931 von Bethe [1] entwickelte Koordinaten-Ansatz ist neben der Transfermatrix-Methode eines der wenigen Verfahren zur Bestimmung der exakten Eigenfunktionen

von eindimensionalen quantenmechanischen Modellen. Im Gegensatz zur mehr formalen Erläuterung des algebraischen Bethe-Ansatzes in Abschnitt 2.5 soll hier diese Methode explizit am tJ-Hamiltonian in Ortsdarstellung erläutert werden.
Man betrachtet ein Vielteilchensystem, das aus N Elektronen (Spin $\frac{1}{2}$) auf $L \geq N$ Gitterplätzen besteht. $N_{\uparrow,\downarrow}$ Elektronen haben den Spin $\pm\frac{1}{2}$. Die Elektronen sollen so angeordnet sein, daß für ihre Ortskoordinaten

$$x_{Q_1} \leq x_{Q_2} \leq \ldots \leq x_{Q_N} \tag{3.3}$$

gilt. Q ist eine geeignete Permutation von $\{1, \ldots, N\}$. Der Bereich, in dem (3.3) erfüllt ist, werde mit X_Q bezeichnet. Zur Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung

$$\mathcal{H} \left|\Psi\right\rangle = E \left|\Psi\right\rangle \tag{3.4}$$

macht man nun den Ansatz[1]

$$\left|\Psi\right\rangle \equiv \Psi(x_1\sigma_1, \ldots, x_N\sigma_N) = \sum_{P \in S^N} (-1)^P A_{\sigma_1,\ldots,\sigma_N}(Q|P) \exp\left\{ i \sum_{j=1}^{N} k_{P_j} x_j \right\}. \tag{3.5}$$

Der Ansatz überlagert ebene Wellen mit den komplexen Amplituden $A_{\sigma_1,\ldots,\sigma_N}(Q|P)$, die über

$$A_{\sigma_1,\ldots,\sigma_N}(Q|P) = A_{\sigma_1,\ldots,\sigma_N}(PQ) \tag{3.6}$$

definiert sind. Die Notation bedeutet, daß die Ausgangspermutation Q durch X_Q festgelegt ist und auf diese eine Permutation $P \in S^N$ angewendet wird. Die Wechselwirkung wird also durch den Austausch von Teilchenimpulsen k_i und k_j beschrieben. Die so angesetze Wellenfunktion ist antisymmetrisch und man nimmt für Ψ die üblichen periodischen Randbedingungen an

$$\Psi(x_1, \sigma_1, \ldots, x_j + N, \sigma_j, \ldots, x_N, \sigma_N) = \Psi(x_1, \sigma_1, \ldots, x_j, \sigma_j, \ldots, x_N, \sigma_N). \tag{3.7}$$

Zur Bestimmung der Amplituden A und der Quasi-Impulse k betrachtet man einen Zweiteilchen-Streuprozeß, womit eine Transposition der Teilchen i und j gemeint ist. Daraus resultiert dann ein neuer Koordinatenbereich $X_{\tilde{Q}}$. Die neue Amplitude hängt linear von den Amplituden in den benachbarten Bereichen ab

$$A_{\ldots\sigma_i,\ldots,\sigma_j\ldots}\left(\tilde{Q}|P\right) = \sum_{\sigma_i',\sigma_j'} S_{\sigma_j,\sigma_j'}^{\sigma_i,\sigma_i'}(k_i, k_j) A_{\ldots\sigma_i',\ldots,\sigma_j'\ldots}(Q|P). \tag{3.8}$$

Berücksichtigt man auch die $N-2$ nicht-streuenden Teilchen ergibt sich

$$\{S_{ij}\}_{\sigma_1'\ldots\sigma_N'}^{\sigma_1\ldots\sigma_N} = S_{\sigma_j\sigma_j'}^{\sigma_i\sigma_i'} \prod_{l \neq i,j} \delta_{\sigma_l\sigma_l'} \tag{3.9}$$

[1] S^N bezeichnet die Menge aller Permutationen P von $\{1, 2, \ldots, N\}$.

als spezielle N-Teilchen-Streumatrix. Betrachtet man Drei-Teilchenstreuprozesse, also eine Permutation von 3 Teilchen, fällt auf, daß man das Permutationsergebnis durch drei sukzessive Transpositionen erhalten kann, die *nicht* eindeutig sind, d.h. explizit

$$\begin{aligned} \{1,2,3\} &\rightarrow \{1,3,2\} \rightarrow \{3,1,2\} \rightarrow \{3,2,1\} \\ \{1,2,3\} &\rightarrow \{2,1,3\} \rightarrow \{2,3,1\} \rightarrow \{3,2,1\}. \end{aligned} \tag{3.10}$$

Man hat also zwei verschiedene Möglichkeiten die End-Permutation zu erreichen. Fordert man die Unabhängigkeit der Streuprozesse von der Reihenfolge (3.10) , so erhält man die Yang-Baxter-Gleichungen (2.33) aus Abschnitt 2.4

$$\begin{aligned} &\sum_{\sigma_1'\sigma_2'\sigma_3'} S^{\sigma_1\sigma_1'}_{\sigma_2\sigma_2'}(k_1,k_2) S^{\sigma_1',\sigma_1''}_{\sigma_3\sigma_3'}(k_1,k_3) S^{\sigma_2',\sigma_2''}_{\sigma_3'\sigma_3''}(k_2,k_3) \\ &= \sum_{\sigma_1'\sigma_2'\sigma_3'} S^{\sigma_2,\sigma_2'}_{\sigma_3\sigma_3'}(k_2,k_3) S^{\sigma_1\sigma_1'}_{\sigma_3\sigma_3''}(k_1,k_3) S^{\sigma_1',\sigma_1''}_{\sigma_2'\sigma_2''}(k_1,k_2). \end{aligned} \tag{3.11}$$

Wie in Abschnitt 2.4 erläutert sind die Yang-Baxter-Gleichungen ein Kriterium für die exakte Lösbarkeit eines Modells. Daß sie bei vielen eindimensionalen Problemen erfüllt sind, liegt nicht zuletzt an der einfachen Struktur dieser Streuung, die nur Reflexion und Transmission zuläßt, d.h. die Menge der Impulse $\{k_j\}$ ist "erhalten". Das Problem wird nicht direkt, sondern durch die Diagonalisierung der zugehörigen Transfermatrix gelöst, die gemäß (2.4) und (2.5) aus der Zweiteilchen-Streumatrix aufgebaut ist

$$T_j := S_{j,j+1} \dots S_{j,N} S_{j,N+1} \dots S_{j,j-1}. \tag{3.12}$$

Die $S_{j,j'}$ sind die Zweiteilchen-Streumatrizen aus (3.9). Bei Annahme periodischer Randbedingungen erhält man als Eigenwertgleichung für die Transfermatrix[2]

$$T_j A\,(I|I) = e^{iLk_j} A\,(I|I) \qquad j = 1, \dots, N. \tag{3.13}$$

Die Diagonalisierung der Transfermatrix liefert also gleichzeitig die Amplituden in (3.5) und daher die Diagonalisierung der stationären Schrödinger-Gleichung (3.4). Die rechte Seite von (3.13) legt nahe, daß das j-te Elektron einmal die gesamte Kette durchläuft, da rechts der Generator der Gittertranslation auftaucht. Bei dieser Translation wird das herausgegriffene j-te Elektron an den $N-1$ anderen Elektronen gestreut, wobei jeder dieser Zweiteilchen-Streuprozesse durch eine Streumatrix $S_{jj'}$ innerhalb der Transfermatrix T_j zum Ausdruck gebracht wird. Beim tJ-Modell kann die Streumatrix in der Form

$$S^{\sigma_i,\sigma_i'}_{\sigma_j\sigma_j'}(k_i,k_j) = r(k_i,k_j)\delta_{\sigma_i\sigma_i'}\delta_{\sigma_j\sigma_j'} + t(k_i,k_j)\delta_{\sigma_i\sigma_j'}\delta_{\sigma_j\sigma_i'} \tag{3.14}$$

[2] I ist die Identität der Permutation von $\{1,\dots,N\}$.

mithilfe der komplexen Reflexions und- Transmissionsanteile r und t ausgedrückt werden. Stellt man die Streumatrix in einem Hilbertraum mit den Basiszuständen $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$ dar, findet man die Matrixstruktur für die Boltzmann-Gewichte des 6-Vertexmodells

$$\begin{pmatrix} a(k_i,k_j) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c(k_i,k_j) & b(k_i,k_j) & 0 \\ 0 & b(k_i,k_j) & c(k_i,k_j) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a(k_i,k_j) \end{pmatrix}, \tag{3.15}$$

mit den Matrixelementen

$$\begin{aligned} a(k_i,k_j) &= r(k_i,k_j) + t(k_i,k_j) \\ b(k_i,k_j) &= t(k_i,k_j) \\ c(k_i,k_j) &= r(k_i,k_j) \end{aligned} \tag{3.16}$$

$$\tag{3.17}$$

wieder. Das entspricht genau der Struktur der R-Matrix (2.36) für die Boltzmann-Gewichte desjenigen Vertexmodells, an dem der algebraische Bethe-Ansatz erläutert wurde. Man erhält also mit dem algebraischen Bethe-Ansatz aus Abschnitt 2.5 die Bethe-Ansatz-Gleichungen. Eine ausführliche Herleitung dieser Gleichungen für den Fall $2t = J$ findet sich in [26]. Es soll im folgenden die Darstellung von Lai [27] benutzt werden, die als Vakuumzustand das leere Gitter annimmt. Als Alternative existiert die Darstellung von Sutherland [28], bei der Spin-Down-Elektronen und Löcher die dynamischen Objekte sind, die sich vor einem Hintergrund aus Spin-Up-Elektronen bewegen.
Aus der Anwendung des Bethe-Ansatzes (3.5) auf den tJ-Hamiltonian (3.1) erhält man als expliziten Ausdruck für die Streumatrix des tJ-Modells mit $t = 1$

$$S^{\sigma_j\sigma_j'}_{\sigma_l\sigma_l'}(k_j,k_l) = \frac{v_j - v_l}{v_j - v_l + i}\delta_{\sigma_j\sigma_j'}\delta_{\sigma_l\sigma_l'} + \frac{i}{v_j - v_l + i}\delta_{\sigma_j\sigma_l'}\delta_{\sigma_l\sigma_j'}. \tag{3.18}$$

Man sieht also, daß bei der gewählten Parametrisierung $v = 1/2\cot(k/2)$ die Streumatrix nur von der Differenz $\theta = v_j - v_l$ abhängt, so daß die Matrixelemente der Streumatrix (3.15) durch θ parametrisiert werden können:

$$\begin{aligned} a(\theta) &= 1, \\ b(\theta) &= \frac{i}{\theta + i} \\ \text{und} \quad c(\theta) &= \frac{\theta}{\theta + i}. \end{aligned} \tag{3.19}$$

Die weiteren Details sind hier nicht wesentlich. Entscheidend ist, daß man die Streumatrix S des Problems mit der R-Matrix eines klassischen zweidimensionalen 6-Vertexmodells durch

$$R = P \cdot S \tag{3.20}$$

identifizieren kann.[3] . Mit dem algebraischen Bethe-Ansatz (Abschn. 2.5) kann man jetzt den Eigenwert der zugehörigen Transfermatrix bestimmen und erhält die Bethe-Ansatz-Gleichungen für das tJ-Modell im Grundzustand

$$e^{ik_j L} = \prod_{\beta=1}^{N_\downarrow} \frac{v_j - \lambda_\beta + i/2}{v_j - \lambda_\beta - i/2}, \quad j = 1, \dots N, \tag{3.21}$$

$$\prod_{j=1}^{N} \frac{v_j - \lambda_\alpha + i/2}{v_j - \lambda_\alpha - i/2} = - \prod_{\beta=1}^{N_\downarrow} \frac{\lambda_\beta - \lambda_\alpha + i}{\lambda_\beta - \lambda_\alpha - i}, \quad \alpha = 1, \dots, N_\downarrow. \tag{3.22}$$

Der rechte Teil der Gleichung (3.21) ist der Eigenwert der Transfermatrix, die linke Seite ist Ausdruck der periodischen Randbedingungen. Die Bethe-Ansatz-Zahlen $\{\lambda_\beta\}$ repräsentieren die Spin-Freiheitsgrade und parametrisieren die Spin-Down-Elektronen. Mit den so bestimmten System-Parametern ergibt sich für den Impuls und die Energie des Zustandes

$$\begin{aligned} E &= -2t \sum_{j=1}^{N} \cos k_j - \mu N - \frac{h}{2} \left(N_\uparrow - N_\downarrow \right), \\ \text{und} \quad P &= \sum_{j=1}^{N} k_j. \end{aligned} \tag{3.23}$$

So wird die Lösung des ursprünglichen Eigenwertproblems auf die Lösung gekoppelter algebraischer Gleichungen zurückgeführt. Im thermodynamischen Limes, bzw. für große N, ist die Lösung eines solchen vielkomponentigen Gleichungssystems problematisch. Will man den Grundzustand des Systems untersuchen, muß man gewisse Vorüberlegungen über die Verteilung der Bethe-Ansatz-Zahlen k_j und λ_α anstellen. In der Lai-Darstellung entsprechen reelle Lösungen für diese Parameter hochangeregten Zuständen. Man sucht demzufolge nach komplexen Verteilungen, die gebundenen Zuständen entsprechen und die die Energie (3.23) minimieren. Wenn das System keinem äußeren Magnetfeld ausgesetzt ist, ordnen sich die Spins, gerades N vorausgesetzt, zu Singulettpaaren an. Für die Parameter der Bethe-Ansatz-Gleichungen macht man für den Grundzustand einen sog. 2-String-Ansatz. Die $N_\downarrow$ Spinrapiditäten $\{\lambda_\alpha\}$ sind reelle Zahlen während sich die $N = 2N_\downarrow$ Ladungsparameter $\{v_j\}$ zu komplex konjugierten Paaren in der Ebene anordnen, deren Realteil durch die Spinrapiditäten gegeben ist (Abb. 3.1). Konkret heißt das

$$v_\alpha^\pm = \lambda_\alpha \pm \frac{i}{2} + \mathcal{O}(e^{-aL}), \text{ für } \alpha = 1, \dots, \frac{N}{2}, \ (a > 0). \tag{3.24}$$

Die Finite-Size-Korrekturen zu diesem Ansatz verschwinden also exponentiell. Trotzdem ist zu betonen, daß man ihm Rahmen des in dieser Arbeit vorgestellten Zugangs zur Thermodynamik des Systems über nicht-lineare Integralgleichungen auf

[3] P ist ein geeigneter Permutationsoperator.

diese sog. String-Hypothese verzichten kann, da für die Herleitung der Integralgleichungen die genaue Positionierung der Bethe-Ansatz-Wurzeln -und Löcher nicht maßgebend ist [5]. Der Abstand zweier zum Stringpaar gebundenen Momente $v_\alpha^\pm$ ist ein Maß für die Kopplungsstärke $J/2t$. Es gilt hier im Fall $J = 2t$

$$\left|v_\alpha^+ - v_\alpha^-\right| = \frac{J}{2t} = 1. \tag{3.25}$$

Definiert man die Bindungslänge eines Singuletts η als den inversen Imaginärteil

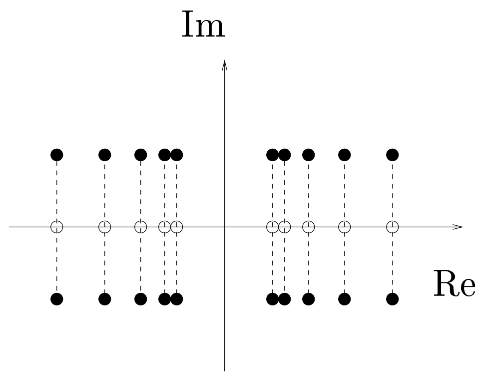

Abbildung 3.1.: Strings im Grundzustand

der komplexen k_α-Werte, also

$$\eta = \frac{1}{|\mathrm{Im} k_\alpha|} = \frac{2}{\left|k_j^+ - k_j^-\right|} = \left(\frac{1}{2}\log\left[1 + \frac{1}{\lambda_\alpha^2}\right]\right)^{-1}, \tag{3.26}$$

dann folgt für $\lambda_\alpha \to \infty$ und damit $\xi \to \infty$, daß es Spinpaare mit beliebig großem Abstand gibt, die auch dementsprechend beliebig schwach gebunden sind. Eine mögliche Anregung des Systems ist das Aufbrechen eines solchen Paares, das demzufolge beliebig wenig Energie kostet. Also ist diese Spinanregung des Systems lückenlos. Die Abbildung 3.1 zeigt zusätzlich zur Stringannahme, daß bei endlicher Dichte, d.h. $\mu > 0$, ein endlicher Bereich um den Ursprung unbesetzt bleibt. Die Zustände werden von außen nach innen besetzt.

3.2.2. Separation von Spin und Ladung

In [30] wurde gezeigt, daß sich die niedrigliegenden Anregungen in Spin -und Ladungsanregungen trennen lassen. Ausgehend vom obigen Bild des Grundzustands gebundener 2-Strings besteht eine Elementaranregung im Anheben zweier konjugierter Ladungsmomente über die sog. Pseudo-Fermi-Grenze, welche im Grundzustand im (v, λ)-Raum die unbesetzten von den besetzten Zuständen trennt. Das dabei entstehende Loch nennt man “Holon” und die Neubesetzung “Anti-Holon”. Die Analogie zu Teilchen-Loch-Anregungen aus dem Fermi-See ist offensichtlich. Die andere Anregung ist das Aufbrechen eines Singuletts. Das heißt ein 2-String wird entfernt und durch zwei reelle Momente v_{s_1}, v_{s_2} ersetzt. Dadurch wird auch die entsprechende Spinrapidität λ_α entfernt, so daß eine Veränderung der Magnetisierung resultiert. Diese Trennung von Spin und Ladung ist ein Charakteristikum für sog. Luttinger-Flüssigkeiten, da eine solche Separation mit dem herkömmlichen Quasi-Teilchen-Bild bei Fermi-Flüssigkeiten nicht verträglich ist. Die Eigenschaften von Luttinger-Flüssigkeiten sollen im folgenden Abschnitt kurz skizziert werden.

3.3. Tomonaga-Luttinger-Flüssigkeiten

Besonders in einer Dimension bewirken die starken Quantenfluktuationen ein charakteristisches Vehalten des Systems, das stark vom gewöhnlichen Fermiflüssigkeitsverhalten abweicht. Es war Haldane [22], der die Konzeption der Luttinger-Flüssigkeiten populär machte, die eine große Klasse eindimensionaler Quantenflüssigkeiten in ihren gemeinsamen Aspekten zusammenfaßt. Die starken Korrelationen in einer Dimension lassen darauf schließen, daß die Anregungen des Systems einen kollektiven Charakter haben. Tatsächlich lassen sich niedrigliegende kollektive Anregungen in guter Näherung durch bosonische Operatoren beschreiben. Die wirklichen Anregungen des Systems sind aber weder bosonisch noch fermionisch. Luttinger-Flüssig-

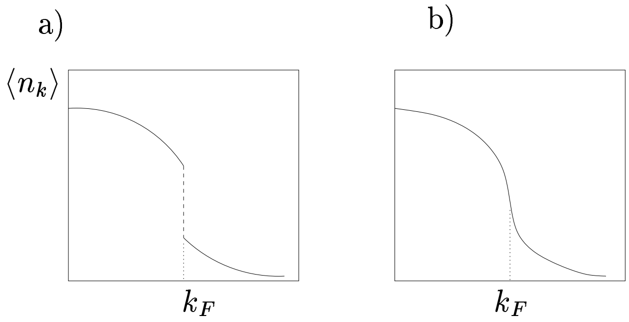

Abbildung 3.2.: a) Fermi-Flüssigkeit, b) Luttinger-Flüssigkeit

keiten zeigen eine algebraische Singularität

$$\langle n_k \rangle = \langle n_{k_F} \rangle - \mathrm{const}\, |k - k_F|^{\theta} \cdot \mathrm{sgn}(k - k_F) \tag{3.27}$$

an der Fermikante $k = k_F$. Sie zeigen also im Gegensatz zu Fermi-Flüssigkeiten keine Sprung-Singularität, sondern eine stetige Abhängigkeit an der Fermi-Kante. Die Korrelationen dieser Elementaranregungen zeigen ein im Vergleich zu Fermi-Flüssigkeiten anomales Verhalten, was zu *wechselwirkungsabhängigen* Potenzgesetzen in vielen physikalischen Größen führt. In diesem Sinne sind auch die kritischen Exponenten solcher Systeme nicht universell.

3.4. Das Perk-Schultz-Modell

In den nächsten Abschnitten soll das Augenmerk auf das Verhalten des tJ-Modells bei endlichen Temperaturen gelegt werden. Wie in Abschnitt 2.2 beschrieben erfordert das Konzept der Abbildung eines eindimensionalen quantenmechanischen Systems auf ein zweidimensionales klassisches Modell das Auffinden des klassischen Analogons für das tJ-Modell. Es hat sich gezeigt, daß das Perk-Schultz-Modell [15, 16] – eine mehrkomponentige Verallgemeinerung des 6-Vertex-Modells – in seinem Hamiltonschen Limes (siehe Abschn. 2.2) auf eine Familie von integrablen eindimensionalen Systemen führt [14], die auch eine anisotrope Verallgemeinerung des supersymmetrischen tJ-Modells enthält.

3.4.1. Das klassische Modell und sein Hamiltonscher Limes

Man betrachtet ein Quadratgitter mit periodischen Randbedingungen. Jeder Bond auf dem Gitter ist mit einer Variable belegt, die die Werte $1, \ldots, q$ annehmen kann. Die einzig erlaubten Pfeilkonfigurationen sind die, bei denen die Bonds (rechts) ν und (oben) β gleich den Bonds μ und α (links und unten) sind. Daher sind $2q^2 - q$

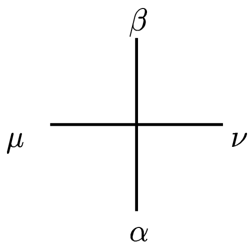

Abbildung 3.3.: Variablen an einem Vertex

der möglichen q^4 Boltzmann-Gewichte nicht Null und können in folgender Weise parametrisiert werden

$$\begin{aligned} S^{\alpha\alpha}_{\alpha\alpha}(v) &= \sinh(\eta + \varepsilon_\alpha v)/\sinh\eta, \\ S^{\mu\mu}_{\alpha\alpha}(v) &= \varepsilon_{\alpha\mu}\sinh(v)/\sinh\eta \\ \text{und}\quad S^{\mu\alpha}_{\alpha\mu}(v) &= \exp(\mathrm{sign}(\alpha-\mu)\cdot v) \end{aligned} \tag{3.28}$$

$$\text{mit } \varepsilon_\alpha = \pm 1 \;\; \varepsilon_{\alpha\mu} = \varepsilon_{\mu\alpha} = \varepsilon_\alpha\varepsilon_\mu, \quad \alpha, \mu = 1, \ldots, q. \tag{3.29}$$

Diese Gewichte erfüllen die Yang-Baxter-Gleichungen, so daß die Reihen-Transfermatrizen

$$T^{\boldsymbol{\beta}}_{\boldsymbol{\alpha}}(v) = \sum_{\mu}\prod_{i=1}^{L} S^{\mu_i\mu_{i+1}}_{\alpha_i\beta_i}(v) \tag{3.30}$$

eine kommutierende Familie bilden.[4] Am Punkt $v = 0$ reduziert sich T offensichtlich auf den Verschiebungsoperator nach rechts. Nach Abschn. 2.2 kann hier der Hamiltonsche Limes ausgeführt werden:

$$(\ln T)'(\lambda) = \sum_{i=1}^{L} h_i. \tag{3.31}$$

Die Matrixelemente der lokalen Hamilton-Operatoren h_i ergeben sich dann zu

$$(h_i)^{\alpha\alpha}_{\alpha\alpha} = \varepsilon_\alpha \coth \eta, \quad (h_i)^{\alpha\mu}_{\mu\alpha} = \varepsilon_{\alpha\mu}/\sinh \eta, \quad (h_i)^{\mu\alpha}_{\mu\alpha} = \mathrm{sign}(\alpha - \mu). \tag{3.32}$$

Für die spezielle Wahl $q = 3$ und $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1, \varepsilon_3 = -1$ findet man im isotropen Grenzfall ($\eta \to 0$) das uns hier interessierende supersymmetrische tJ-Modell [14].

3.4.2. Herleitung der Quanten-Transfer-Matrix

Der entscheidende Schritt zur Behandlung der Thermodynamik des Hamiltonians ist die Abbildung der Zustandssumme bei endlicher Temperatur auf die Zustandssumme eines klassischen inhomogenen Gittermodells, wie in Kapitel 1 beschrieben. Es soll nun alles dort Gesagte auf das konkrete Modell angewendet werden und die Kernargumentation wiederholt werden. Es hat sich gezeigt, daß man aus den alten Boltzmann-Gewichten einen zweiten Satz von Gewichten

$$\tilde{S}^{\mu\nu}_{\alpha\beta}(v) = S^{\beta\alpha}_{\mu\nu}(v) \tag{3.33}$$

gewinnen kann, der die Yang-Baxter-Gleichungen erfüllt, in dem man die alten Vertizes um 90° im Uhrzeigersinn dreht. (Die Gewichte $\bar{S}$ ergeben sich, wie in Abb. 2.5 beschrieben, durch entgegengesetzte Rotation der Gewichte S um 90° Grad.) Die zugehörigen Transfermatrizen werden dann analog zu (3.30) konstruiert. $\bar{T}(0)$ ergibt den Verschiebungsoperator nach links und die logarithmische Ableitung von $\bar{T}$ an der Stelle $v = 0$ liefert wieder H. Für die quantenmechanische Zustandssumme resultiert daher der Ausdruck (2.19)

$$Z = \lim_{M\to\infty} \mathrm{Spur}\left(T(u)\bar{T}(u)\right)^{\frac{M}{2}}. \tag{3.34}$$

Also ist die Zustandssumme der Quantenkette bei endlicher Temperatur durch die Zustandssumme eines inhomogenen Perk-Schultz-Modells mit alternierenden Reihen gegeben. Die in (3.34) angegebene Reihen-Transfermatrix ist zur Berechnung der Zustandssumme schlecht geeignet, da sie im Trotter-Limes $M \to \infty$ keine Lücke zwischen größtem und nächstgrößtem Eigenwert aufweist [8]. Denn es gilt $u = -\beta/M$, und für $M \to \infty$ folgt $T(u)\bar{T}(u) = T(0)\bar{T}(0) = T_R T_R^{-1} = 1$. Aus diesem Grund geht man zur Spalten-Transfermatrix über, die gemäß

$$T^{\boldsymbol{\beta}\,\mathrm{QTM}}_{\boldsymbol{\alpha}} = \sum_{\mu} \prod_{i=1}^{L/2} S^{\mu_{2i-1}\mu_{2i}}_{\alpha_{2i-1}\beta_{2i-1}}(u)\tilde{S}^{\mu_{2i}\mu_{2i+1}}_{\alpha_{2i}\beta_{2i}}(-u) \tag{3.35}$$

[4] $\boldsymbol{\alpha}$ und $\boldsymbol{\beta}$ sind die in Abschn. 2.1 eingeführten Multiindizes.

mit $\tilde{S}^{\mu\nu}_{\alpha\beta}(v) = S^{\beta\alpha}_{\mu\nu}(-v)$ wieder als Reihen-Transfermatrix dargestellt werden kann. Da $S(u)$ und $\tilde{S}(u)$ die Yang-Baxter-Gleichungen

$$R^{\lambda b}_{\mu c}(v-\bar{v})X^{b\lambda'}_{\alpha a}(v)X^{c\mu'}_{a\alpha'}(\bar{v}) = X^{\mu c}_{\alpha a}(\bar{v})X^{\lambda b}_{a\alpha'}(v)R^{b\lambda'}_{c\mu'}(v-\bar{v}) \tag{3.36}$$

mit *derselben* R-Matrix und $X = S$ oder $X = \tilde{S}$ erfüllen, kann die Quanten-Transfermatrix T^{QTM} in die kommutierende Familie

$$T(v) = \sum_{\mu}\prod_{i=1}^{N/2} S^{\mu_{2i-1}\mu_{2i}}_{\alpha_{2i-1}\beta_{2i-1}}(v+u)\tilde{S}^{\mu_{2i}\mu_{2i+1}}_{\alpha_{2i}\beta_{2i}}(v-u) \tag{3.37}$$

eingebettet werden und offensichtlich gilt $T^{\mathrm{QTM}} = T(0)$. Der größte Eigenwert Λ_{max} liefert dann die freie Energie nach (2.8).

3.4.3. Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix

Hier soll die Vorgehensweise zur Ermittlung der Eigenwerte nur kurz angerissen werden, da das Grundprinzip wie beim 6-Vertex-Modell erhalten bleibt und die Berechnung in [8] ausführlich beschrieben ist. Aus den Yang-Baxter-Gleichungen folgt für die Monodromie-Matrix T

$$R^{\lambda b}_{\mu c}(v-\bar{v})\mathcal{T}^{\lambda'}_{b}(v)\mathcal{T}^{\mu'}_{c}(\bar{v}) = \mathcal{T}^{c}_{\mu}(\bar{v})\mathcal{T}^{b}_{\lambda}(v)R^{b\lambda'}_{c\mu'}(v-\bar{v}). \tag{3.38}$$

Es wird ab jetzt nur der für die hiesigen Zwecke wichtige Fall $q = 3$ betrachtet. Als Vakuum-Zustand ist der "Neel-Zustand" $|12\rangle = |1212\ldots12\rangle$ geeignet[5]. Anwendung der Monodromie-Matrix $\mathcal{T}$ auf diesen Zustand liefert

$$\mathcal{T}(v)\,|12\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1(v)\,|12\rangle & * & * \\ 0 & \alpha_2(v)\,|12\rangle & 0 \\ 0 & * & \alpha_3(v)\,|12\rangle \end{pmatrix}. \tag{3.39}$$

Also ist $|12\rangle$ Eigenzustand mit dem Eigenwert $\sum_i \alpha_i(v)$.[6] Es zeigt sich, daß $\mathcal{T}^3_1(v_i)$ und $\mathcal{T}^2_3(w_j)$ die richtige Wahl für die Erzeuger darstellen. Sukzessive Anwendung dieser Operatoren liefert dann die Eigenwerte und aus den Nebenbedingugen ergeben sich endlich die Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.42), die hier der Ausgangspunkt für die Integralgleichungen (3.44) sind. Die explizite Gestalt des Eigenwerts $\Lambda(v)$ und der Bethe-Ansatz Gleichungen wird bei der Herleitung der Integralgleichungen angegeben.

[5]Die Zustände auf den Bonds werden mit $1, 2, 3$ numeriert.

[6]Die explizite Gestalt der α_i entnehme man [8].

3.5. Die nicht-linearen Integralgleichungen

Nach dem in Abschnitt 3.4 vorgestellten Verfahren erhält man für den größten Eigenwert des inhomogenen Perk-Schultz-Modells

$$\Lambda(v) = \lambda_-(v) + \lambda_+(v) + \lambda_0(v) \tag{3.40}$$

mit

$$\begin{aligned}
\lambda_-(v) &= \prod_j \frac{v - w_j + i\varepsilon_1}{v - w_j} \left[(v - iu - i\varepsilon_1)(v + iu)\right]^{M/2} e^{\beta\mu_1} \\
\lambda_+(v) &= \prod_k \frac{v - v_k - i\varepsilon_2}{v - v_k} \left[(v + iu + i\varepsilon_2)(v - iu)\right]^{M/2} e^{\beta\mu_2} \\
\lambda_0(v) &= \prod_j \frac{v - w_j - i\varepsilon_3}{v - w_j} (v + iu)^{M/2} \prod_k \frac{v - v_k + i\varepsilon_3}{v - v_k} (v - iu)^{M/2} e^{\beta\mu_3}
\end{aligned} \tag{3.41}$$

und die Bethe-Ansatz-Gleichungen der Transfermatrix

$$\begin{aligned}
\left(\frac{v_k + iu + i}{v_k + iu}\right)^{\frac{M}{2}} &= -\prod_j \frac{v_k - w_j + i}{v_k - w_j} e^{\beta(\mu_3 - \mu_2)} \\
\left(\frac{w_j - iu - i}{w_j - iu}\right)^{\frac{M}{2}} &= -\prod_k \frac{w_j - v_k - i}{w_j - v_k} e^{\beta(\mu_3 - \mu_1)},
\end{aligned} \tag{3.42}$$

wobei $\mu_1 = \mu + h/2, \mu_2 = \mu - h/2$ und $\mu_3 = 0$ gilt, wenn man die Signatur $\{\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3\} = \{+, +, -\}$ voraussetzt. μ ist das chemische Potential und h das äußere Magnetfeld. Eine Analyse der Bethe-Ansatz-Gleichungen (BAE) zeigt, daß sich ihre Lösungen, die Bethe-Ansatz-Zahlen v_k und w_j, für den Trotter-Limes $N \to \infty$ am Ursprung mit verschwindendem Real-und Imaginärteil sammeln. Das macht die traditionelle Behandlung auf der Basis von Dichtefunktionen [10] nicht möglich und einen Übergang zu diesem Problem angepaßten Integralgleichungen notwendig.
Dazu führt man die folgenden Hilfsfunktionen ein

$$\begin{aligned}
\mathfrak{b} &:= \tfrac{\lambda_-(v)}{\lambda_+(v) + \lambda_0(v)} & \mathfrak{B} &:= 1 + \mathfrak{b} \\
\overline{\mathfrak{b}} &:= \tfrac{\lambda_+(v)}{\lambda_-(v) + \lambda_0(v)} & \overline{\mathfrak{B}} &:= 1 + \overline{\mathfrak{b}} \\
\mathfrak{c} &:= \tfrac{\lambda_-(v)\lambda_+(v)}{\lambda_0(v)(\lambda_+(v) + \lambda_-(v) + \lambda_0(v))} & \mathfrak{C} &:= 1 + \mathfrak{c}.
\end{aligned} \tag{3.43}$$

Für eine explizite Herleitung der Integralgleichungen sei auf Anhang A verwiesen. Im folgenden soll das Augenmerk auf den Zusammenhang der Integralgleichungen mit der Thermodynamik des Systems gelegt werden. Die nicht-linearen Integralgleichungen lauten

$$
\begin{aligned}
\log \mathfrak{b}(v) &= -2\pi\beta\Psi_{\mathfrak{b}}(v+i\gamma) + \beta(\mu + h/2) \\
&\quad - \Psi_{\mathfrak{b}} * \log(1+\overline{\mathfrak{b}})\big|_{v+2i\gamma} - \Psi_{\mathfrak{b}} * \log(1+\mathfrak{c})\big|_{v+i\gamma} \\
\log \overline{\mathfrak{b}}(v) &= -2\pi\beta\Psi_{\overline{\mathfrak{b}}}(v-i\gamma) + \beta(\mu - h/2) \\
&\quad - \Psi_{\overline{\mathfrak{b}}} * \log(1+\mathfrak{b})\big|_{v-2i\gamma} - \Psi_{\overline{\mathfrak{b}}} * \log(1+\mathfrak{c})\big|_{v-i\gamma} \\
\log \mathfrak{c}(v) &= -2\pi\beta\Psi_{\mathfrak{c}}(v) + 2\beta\mu - \Psi_{\mathfrak{b}} * \log(1+\overline{\mathfrak{b}})\big|_{v+i\gamma} \\
&\quad - \Psi_{\overline{\mathfrak{b}}} * \log(1+\mathfrak{b})\big|_{v-i\gamma} - \Psi_{\mathfrak{c}} * \log(1+\mathfrak{c})\big|_{v}
\end{aligned}
\tag{3.44}
$$

mit der Definition des Faltungsintegrals

$$
f * g\big|_x = \int_{-\infty}^{\infty} f(x-y)g(y)dy. \tag{3.45}
$$

Um den Zusammenhang zur Thermodynamik zu finden, wertet man den Ausdruck für den Eigenwert (3.40) mit der oben angegebener Signatur der ε_i an der Stelle $x = 0$ aus

$$
\begin{aligned}
\lambda_{-}(0) &= \prod_j \frac{-w_j + i}{-w_j} \left[(-iu - i\varepsilon_1)(+iu)\right]^{M/2} e^{\beta\mu_1} \\
\lambda_{+}(0) &= \prod_k \frac{-v_k - i}{v - v_k} \left[(iu + i)(-iu)\right]^{M/2} e^{\beta\mu_2} \\
\lambda_{0}(0) &= \prod_j \frac{-w_j + i}{-w_j} (iu)^{M/2} \prod_k \frac{-v_k - i}{-v_k} (-iu)^{M/2} e^{\beta\mu_3}.
\end{aligned}
\tag{3.46}
$$

Es folgt

$$
\frac{\lambda_{-}(0)\lambda_{+}(0)}{\lambda_0(0)} = \frac{e^{\beta\mu_1} \cdot e^{\beta\mu_2}}{e^{\beta\mu_3}} = \exp\left\{2\beta\mu\right\}. \tag{3.47}
$$

Dann gilt auf Grund der Definition $\mathfrak{c} = \frac{\lambda_{-}\lambda_{+}}{\lambda_0(\lambda_{+}+\lambda_{-}+\lambda_0)}$

$$
\log \mathfrak{c}(0) = \underbrace{\log \frac{\lambda_{-}(0)\lambda_{+}(0)}{\lambda_0(0)}}_{=2\beta\mu} - \underbrace{\log \lambda_{-}(0) + \lambda_{+}(0) + \lambda_0(0)}_{=\log\Lambda(0)}. \tag{3.48}
$$

So daß sich schließlich

$$
\log \Lambda(0) = -\log \mathfrak{c}(0) + 2\beta\mu \tag{3.49}
$$

ergibt. Auf diese Weise erhält man die freie Energie f durch den größten Eigenwert der Transfermatrix gemäß (2.8).

3.6. Numerische Realisierung der Integralgleichungen

Zur numerischen Auswertung der Integralgleichungen (3.44) ist es sinnvoll die Hilfsfunktionen $\log \mathfrak{b} \ldots$ zu reskalieren. Die numerische Analyse ergibt, daß diese Hilfsfunktionen für große Werte des Spektralparameters v selbst sehr groß werden. Es empfiehlt sich daher den asymptotischen Wert $\log \mathfrak{b}_\infty := \log \mathfrak{b}(v = \infty), \ldots$ vom Logarithmus der Hilfsfunktion abzuziehen, um numerisch gut zu verarbeitende Größen zu erhalten

$$\begin{aligned} \log \mathfrak{b}_R(v) &= \log \frac{\mathfrak{b}(v)}{\mathfrak{b}_\infty} \quad , \quad \log \mathfrak{B}_R(v) = \log \frac{\mathfrak{B}(v)}{\mathfrak{B}_\infty} \\ \log \overline{\mathfrak{b}}_R(v) &= \log \frac{\overline{\mathfrak{b}}(v)}{\overline{\mathfrak{b}}_\infty} \quad , \quad \log \overline{\mathfrak{B}}_R(v) = \log \frac{\overline{\mathfrak{B}}(v)}{\overline{\mathfrak{B}}_\infty} \\ \log \mathfrak{c}_R(v) &= \log \frac{\mathfrak{c}(v)}{\mathfrak{c}_\infty} \quad , \quad \log \mathfrak{C}_R(v) = \log \frac{\mathfrak{C}(v)}{\mathfrak{C}_\infty}. \end{aligned} \tag{3.50}$$

Für die erste Ableitung nach dem Magnetfeld h erhält man die folgenden Integralgleichungen im reskalierten Formalismus

$$\begin{aligned} \partial_h \log \mathfrak{b}_R &= \partial_h \Phi_\mathfrak{b} - \Psi_\mathfrak{b} * \partial_h \log \overline{\mathfrak{B}}_R - \Psi_\mathfrak{b} * \partial_h \log \mathfrak{C}_R, \\ \partial_h \log \mathfrak{b}_R &= \partial_h \Phi_\mathfrak{b} - \Psi_\mathfrak{b} * \partial_h \log \overline{\mathfrak{B}}_R - \Psi_\mathfrak{b} * \partial_h \log \mathfrak{C}_R, \\ \partial_h \log \mathfrak{c}_R &= \partial_h \Phi_\mathfrak{c} - \Psi_\mathfrak{b} * \partial_h \log \overline{\mathfrak{B}}_R - \Psi_{\overline{\mathfrak{b}}} * \partial_h \log \mathfrak{B}_R - \Psi_\mathfrak{c} * \partial_h \log \mathfrak{C}_R. \end{aligned} \tag{3.51}$$

Man hatte im vorhergehenden Abschnitt gesehen, daß $\log \mathfrak{c}(0)$ die freie Energie liefert. Also liefert $\partial_h \log \mathfrak{c}(0)$ die Magnetisierung des Systems. Für die zweiten Ableitungen nach h ergeben sich analoge Integralgleichungen für die magnetische Suszeptibilität. Ein großer Vorteil des Zugangs über assoziierte Integralgleichungen liegt in der Vermeidung numerischer Ableitungen. Man muß also die freie Energie nicht numerisch nach z.B. h differenzieren um die Magnetisierung zu erhalten, sondern erhält ein *exaktes* Gleichungssystem für die Magnetisierung, magnetische Suszeptibilität, spezifische Wärme u.s.w. Die Hilfsfunktionen $\mathfrak{b} \ldots$ hängen in nicht-trivialer Weise von ihren Parametern ab, so daß numerische Differentiation zu nicht kontrollierbaren Fehlern führen würde. Die Integralgleichungen werden iterativ gelöst. Für den Fall $h = 0$, für den $\mathfrak{b}$ komplex konjugiert zu $\overline{\mathfrak{b}}$ ist, heißt das [6]

$$\begin{aligned} \mathfrak{b}_R^{(k+1)} &= \exp\left\{\Phi_\mathfrak{b} - \Psi_\mathfrak{b} * \log\left(\overline{\mathfrak{B}_R^{(k)}}\right) - \Psi_\mathfrak{b} * \log\left(\mathfrak{C}_R^{(k)}\right)\right\} \\ \mathfrak{c}_R^{(k+1)} &= \exp\left\{\Phi_\mathfrak{c} - 2\mathrm{Re}(\Psi_\mathfrak{b} * \log\left(\overline{\mathfrak{B}_R^{(k)}}\right))\Psi_\mathfrak{c} * \log\left(\mathfrak{C}_R^{(k)}\right)\right\}. \end{aligned} \tag{3.52}$$

Zur numerischen Behandlung bildet man die Hilfsfunktion gemäß

$$\mathfrak{b}(v) \to (\mathfrak{b}_i)\,, \qquad \mathfrak{c}(v) \to (\mathfrak{b}_i) \tag{3.53}$$

auf Arrays ab. Wenn L die Anzahl der Stützstellen bezeichnet und c einen Abschneidepunkt für die Funktionen, so gilt für die Funktionen f, für den Spektralparameter v und für die Integrationskerne $K(v-w)$

$$v_i = \frac{c}{L} i, \quad f_i = f(v_i), \quad K_{ik} = K(v_i - v_k), \quad i,k = -L, \dots, L \tag{3.54}$$

in ihrer diskretisierten Darstellung. So gehen die Faltungsintegrale in Summen von Arrays über, die effektiv durch die sog. schnelle Fourier-Transformation (FFT) berechnet werden können

$$K * f = \int_{-c}^{c} K(v-w) f(w) dw = \frac{c}{L} \sum_k K_{ik} f_k \text{ für } c \to \infty, \; \frac{c}{L} \to 0. \tag{3.55}$$

Mithilfe dieses Verfahrens kann man thermodynamische Größen, wie zum Beispiel die magnetische Suszeptibilität χ, im Rahmen der vorhandenen Rechnerkapazität mit einer Genauigkeit von etwa 10^{-6} berechnen.

4. Ergebnisse

4.1. Diskussion der Thermodynamik

Für jede thermodynamische Größe, die sich durch Ableitung der freien Energie ergibt, ist es, wie in Abbschnitt 3.6 beschrieben, möglich ein Integralgleichungssystem herzuleiten. Hier sollen die Ergebnisse für die thermodynamischen Größen spezifische Wärme C, Kompressibilität κ und magnetische Suszeptibilität χ definiert als

$$\begin{aligned} C &= -T\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \\ \kappa &= \frac{\partial^2 f}{\partial \mu^2} \\ \chi &= \frac{\partial^2 f}{\partial h^2} \end{aligned} \tag{4.1}$$

diskutiert werden. Wie in Abschnitt 3.2 beschrieben, stellt man sich den Grundzu-

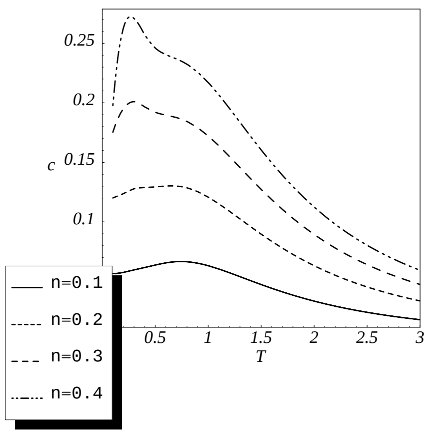

Abbildung 4.1.: spezif. Wärme für niedrige Dichten

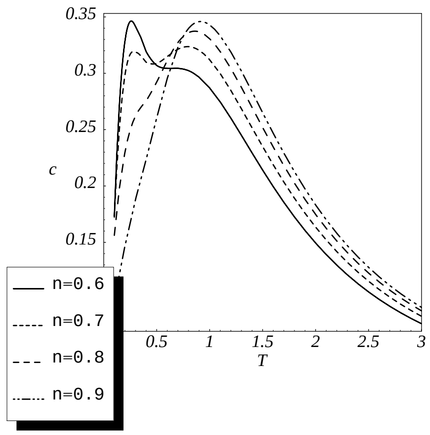

Abbildung 4.2.: spezif. Wärme für hohe Dichten

stand des tJ-Modells als eine Ansammlung gebundener Singuletts vor. Die Elementaranregungen bei $T = 0$ sind dann

1. Anheben eines Strings analog zur Teilchen-Loch-Anregung bei Fermionen,

2. Spinanregung durch Aufbrechen eines Paares.

Da man sich hier mit den Anregungen bei *endlicher* Temperatur befaßt, kann man nicht erwarten, daß diese Elementaranregungen das thermodynamische Verhalten des Systems vollständig beschreiben, da diese beiden Elementaranregungen Tieftemperaturanregungen aus dem Grundzustand bei $T = 0$ sind. Trotzdem werden

die wesentlichen qualitativen Aspekte der Thermodynamik mit diesem "Grundzustandsbild" richtig erfaßt.
Die magnetische Suszeptibilität χ beschreibt den Response des Systems auf ein äußeres Magnetfeld. Da nur die Spinfreiheitsgrade des Systems an dieses Feld ankoppeln, erwartet man daß in χ nur die elementaren Spin-Anregungen des Systems beitragen. In dem gleichen Sinne bezeichnet man die Kompressibilität κ auch als Ladungssuszeptibilität und beobachtet analog nur einen Beitrag der Ladungsanregungen. Die spezifische Wärme zeigt jedoch eine Überlagerung aller Anregungen des Systems. In Abschnitt (3.2) wurde gezeigt, daß das Aufbrechen eines Strings einer lückenlo-

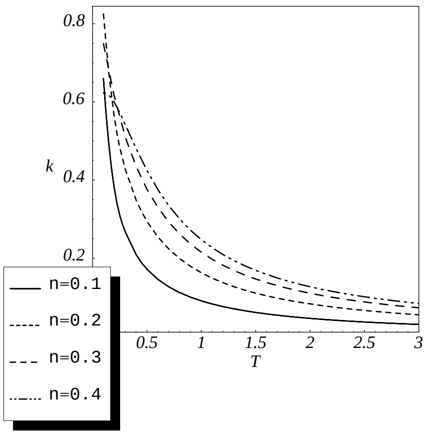

Abbildung 4.3.: κ für niedrige Dichten

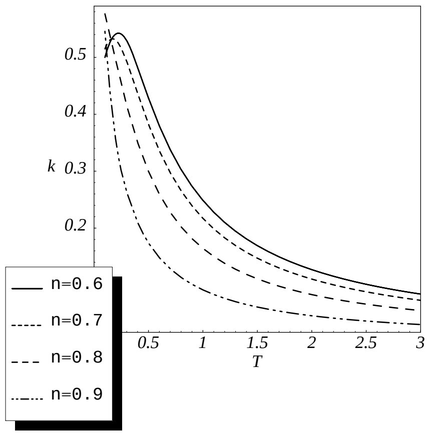

Abbildung 4.4.: κ für hohe Dichten

sen Anregung entspricht, da die Strings beliebig schwach gebunden sind. Betrachtet man die magnetische Suszeptibilität in Abb. 4.7, so sieht man, daß sich ein starkes Maximum ausprägt, das bei steigender Dichte zu höheren Temperaturen wandert. Ein Vergleich mit entsprechenden Größen des Heisenberg-Modells [7] bestätigt die Annahme, daß dieses Maximum durch die elementaren Spin-Anregungen, das Aufbrechen von Singuletts, hervorgerufen ist. Bei sehr hoher Dichte, $n = 0.9$, ist das Maximum wie beim Heisenbergmodell ungefähr bei $T/J = 1$ angesiedelt.
Die Kompressibiltät verhält sich dagegen in anderer Weise. Die Betrachtung der

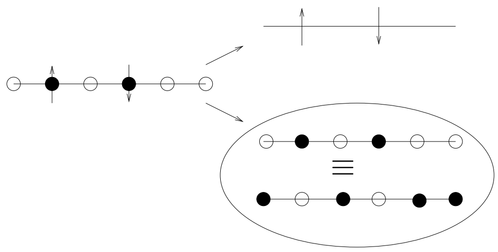

Abbildung 4.5.: Teilchen-Loch-Symmetrie

Ladungssuszeptibilität in den Abbildungen 4.3 und 4.4 zeigt, daß ihr Maximum mit steigender Dichte zu höheren Temperaturen wandert, aber bei hohen Dichten wieder zu kleineren Temperaturen zurückkehrt. Die Maxima der beiden Suszeptibilitäten verhalten sich also unterschiedlich in ihrer Abhängigkeit von der Dichte. Das Maximum der magnetischen Suszeptibilität wandert monoton zu höheren Temperaturen, da bei hohen Dichten auch mehr Singulett-Paare zur Spinanregung zur Verfügung stehen. Die zyklische Bewegung des Maximums der Ladungssuszeptibilität kann im Bild der Trennung von Spin und Ladung interpretiert werden. Die Abbildung 4.5

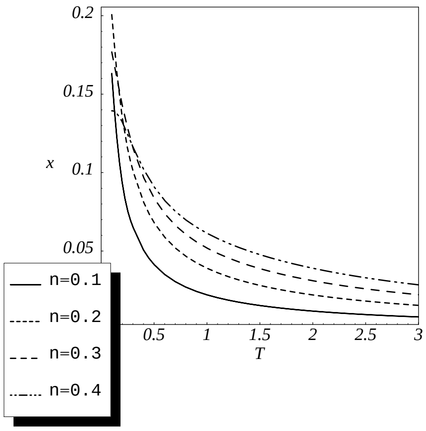

Abbildung 4.6.: χ für niedrige Dichten

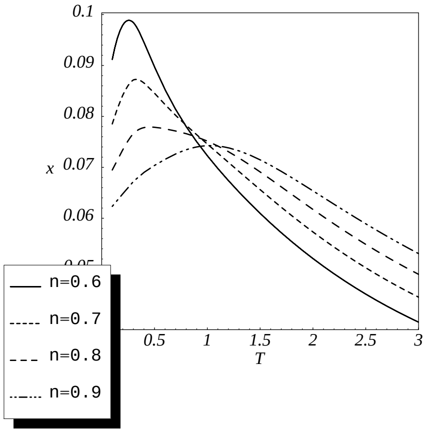

Abbildung 4.7.: χ für hohe Dichten

soll veranschaulichen, wie die Spin-Ladungsseparation vor sich geht. Auf Grund der Trennung der Freiheitsgrade kann man sich zwei Hilfssysteme, zum einen eine Spinkette, und zum anderen eine Kette von hüpfenden spinlosen Teilchen vor einem Lochhintergrund vorstellen. Das zweite Hilfssystem hat Teilchen-Loch-Symmetrie, wie es dargestellt ist. Das führt direkt auf die Interpretation der Bewegung des Maximums der Ladungssuszeptibilität. Die Verhältnisse bei sehr geringer Dichte entsprechen den Verhältnissen bei sehr hoher Dichte. Bildlich gesprochen sind bei geringer Dichte wenige Teilchen vorhanden, die durch Hüpfen angeregt werden können und bei hoher Dichte besteht wenig Möglichkeit zu hüpfen.

Die spezifische Wärme zeigt alle Aspekte der Anregungen. Aufgrund des Bildes zweier Elementaranregungen würde man in ihr einen Ladungspeak und einen Spinpeak erwarten. Eine genaue Analyse der spezifischen Wärme [5] zeigt jedoch,daß man drei Maxima erkennen kann (siehe Abb. 4.8). Auch dieses ist ausgehend von den Elementaranregungen zu verstehen. Das erste Maximum bei kleinen Temperaturen ist eine Folge der Teilchen-Loch-Anregungen für Paare. Das zweite Maximum resultiert aus den Spinanregungen durch Aufbrechen von Singuletts. Wenn alle Singuletts aufgebrochen sind, besteht die einzige Möglichkeit in Einzelanregungen von Ladungen. D.h. bei endlichen Temperaturen wird das Verhalten des Systems durch die beiden Elementaranregungen bei $T = 0$ im Luttinger-Bild zumindest nicht vollständig beschrieben und nur in der spezifischen Wärme sind diese zusätzlichen Anregungsmöglichkeiten sichtbar.

Abbildung 4.8.: spezifische Wärme c für mittlere Dichten

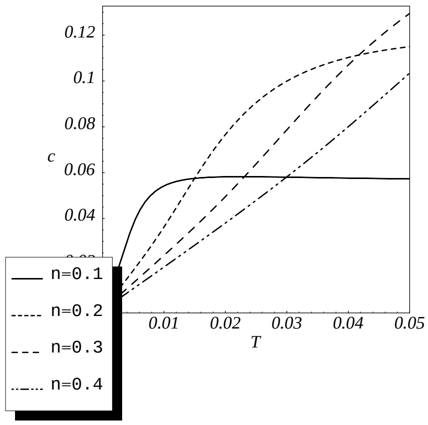

Abbildung 4.9.: c bei tiefen Temperaturen für geringe Dichte

Ein weiterer interessanter Aspekt manifestiert sich im Tieftemperaturverhalten der spezifischen Wärme und der Entropie. Die Abbildungen 4.10 und 4.11 zeigen die Entropie und die spezifische Wärme bei tiefen Temperaturen für die Dichten $n = 0.6$ bis $n = 0.9$. In diesem Temperaturbereich erwartet man, daß die Trennung von Spin

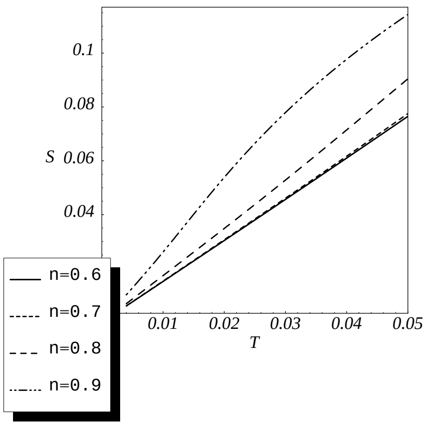

Abbildung 4.10.: S bei tiefen Temperaturen

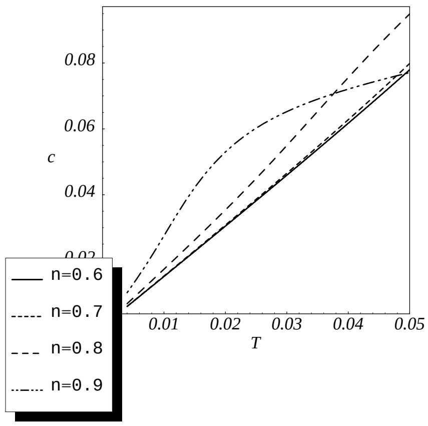

Abbildung 4.11.: c bei tiefen Temperaturen

und Ladung erfüllt ist. Ein solches System läßt sich im Tieftemperaturbereich durch Methoden der konformen Feldtheorie [34, 35] beschreiben. Für die freie Energie des tJ-Modells erhält man mithilfe dieser Berechnungen bei tiefen Temperaturen

$$f = f_0 - \left(\frac{\pi c_s}{6 v_s} + \frac{\pi c_c}{6 v_c} \right) T^2. \tag{4.2}$$

Die Größen $v_{c,s}$ sind die *unterschiedlichen* Fermigeschwindigkeiten für die beiden Elementaranregungen. $c_{v,s}$ sind die konformen Anomalien der zugrundeliegenden Virasoro-Algebren, für die im hier betrachteten Fall $c_c = c_s = 1$ gilt. Die Abbildungen (4.10) und (4.11) zeigen das nach der konformen Feldtheorie erwartete lineare Verhalten von spezifischer Wärme und Entropie. Bei geringen Dichten $n = 0.1$ bis $n = 0.4$ kann man im gleichen Temperaturbereich den Übergang zu dieser linearen Abhängigkeit überzeugend erkennen (siehe Abb. 4.9). Somit zeigt das System Luttingerflüssigkeits-Eigenschaften bei hinreichend tiefen Temperaturen.

4.2. Logarithmische Korrekturen

In [31] wurde gezeigt, daß die kritische antiferromagetische Heisenbergkette logarithmische Korrekturen für die magnetische Suszeptibilität aufweist. Für die führende T-Abhängigkeit von χ hat man

$$\chi(T) = \frac{1}{2\pi v} + \frac{1}{4\pi v \log(T_0/T)} + \text{h.o.c.} \tag{4.3}$$

mithilfe des Bethe-Ansatzes und feldtheoretischen Methoden gefunden. Ausgehend von seinen Integralgleichungen (5.21) für die isotrope Spin-$\frac{1}{2}$-Heisenbergkette (XXX-Kette) bei tiefen Temperaturen hat A. Klümper in [9] einen analytischen Ausdruck für diese Korrekturen gefunden, der (4.3) bestätigt. Die analytische Methode zur Berechnung dieser Korrekturen aus den nicht-linearen Integralgleichungen kann wahrscheinlich auf das tJ-Modell verallgemeinert werden. In der Tat erwartet man auch beim tJ-Modell bei hohen Dichten n das Auftreten logarithmischer Korrekturen, da der Limes $n \to 1$ dem Übergang zur XXX-Kette entspricht. Die Auswertung der magnetischen Suszeptibilität bei tiefen Temperaturen und der Dichte $n = 0.8$ bestätigt dieses (Abb. 4.12). Die Suszeptibilität zeigt einen immer stärker werden-

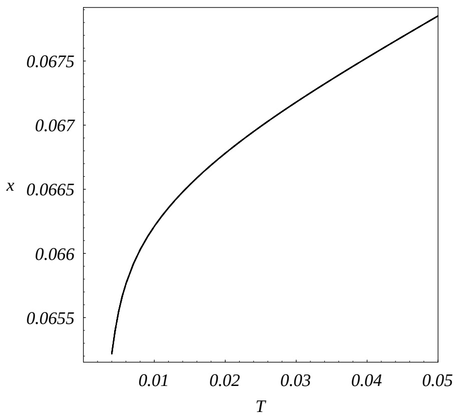

Abbildung 4.12.: Logarithmische Korrektur

den Anstieg für kleiner werdende Temperaturen, um dann bei $T = 0$ eine unendliche positive Steigung bei einem endlichen Wert $\chi(T = 0)$ zu besitzen.

4.3. Die Integralgleichungen im Tieftemperaturlimes

4.3.1. Die Integralgleichungen bei $T = 0$

Man betrachtet die Integralgleichungen (3.44) im Tieftemperaturlimes $\beta \gg 1$ bei endlichem positven Feld h [5]. Aufgrund des asymptotischen Verhaltens von $\overline{\mathfrak{b}} \sim e^{-\beta h}$ reduzieren sich die drei Integralgleichungen auf zwei

$$
\begin{aligned}
\log \mathfrak{b}(x) &= -\beta\varepsilon^0_{\mathfrak{b}}(x) - \Psi_{\mathfrak{b}} * \log(1+\mathfrak{c})\big|_{x+i\gamma/2} \\
\log \mathfrak{c}(x) &= -\beta\varepsilon^0_{\mathfrak{c}}(x) - \Psi_{\mathfrak{b}} * \log(1+\mathfrak{b})\big|_{x+i\gamma/2} - \Psi_{\mathfrak{c}} * \log(1+\mathfrak{c})\big|_{x}
\end{aligned}
$$

mit

$$
\begin{aligned}
\varepsilon^0_{\mathfrak{b}}(x) &= 2\pi\Psi_{\mathfrak{b}}(x+i/2) - (\mu + h/2) \\
\varepsilon^0_{\mathfrak{c}}(x) &= 2\pi\Psi_{\mathfrak{c}}(x) - 2\mu.
\end{aligned} \tag{4.4}
$$

Die Ableitung f' steht im folgenden für $\frac{\partial f}{\partial h}$ und es wird $\ell b = \log \mathfrak{b}$ definiert. Da-

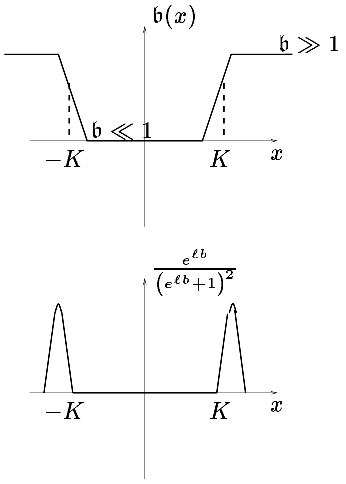

Abbildung 4.13.: Crossover-Verhalten der Hilfsfunktion $\mathfrak{b}$

mit gilt $\log \mathfrak{B} = \log(1 + e^{\ell b})$ und man erhält die folgenden Integralgleichungen zur Berechnung der magnetischen Suszeptibilität im Tieftemperaturlimes

$$
\begin{aligned}
\ell b'' &= -\Psi_{\mathfrak{b}} * \left(\frac{e^{\ell c}}{1+e^{\ell c}}\ell c''\right)\Bigg|_{x+\frac{i}{2}} - \Psi_{\mathfrak{b}} * \left(\frac{e^{\ell c}}{(1+e^{\ell c})^2}\left(\ell c'\right)^2\right)\Bigg|_{x+\frac{i}{2}} \\
\ell c'' &= -\Psi_{\mathfrak{b}} * \left(\frac{e^{\ell b}}{1+e^{\ell b}}\ell b''\right)\Bigg|_{x+\frac{i}{2}} - \Psi_{\mathfrak{b}} * \left(\frac{e^{\ell b}}{(1+e^{\ell b})^2}\left(\ell b'\right)^2\right)\Bigg|_{x+\frac{i}{2}} \\
&\quad - \Psi_{\mathfrak{c}} * \left(\frac{e^{\ell c}}{1+e^{\ell c}}\ell c''\right)\Bigg|_{x+\frac{i}{2}} - \Psi_{\mathfrak{c}} * \left(\frac{e^{\ell c}}{(1+e^{\ell c})^2}\left(\ell c'\right)^2\right)\Bigg|_{x}.
\end{aligned} \tag{4.5}
$$

Da die magnetische Suszeptibilität als $\chi = -\frac{1}{\beta}\partial_h^2 \log \mathfrak{c}\Big|_{x=0}$ definiert ist, und $\ell x, \ell x', \ell x''$ linear von β abhängen, divergieren alle Terme mit der Abhängigkeit $(\ell x')^2$ für $\beta \to \infty$. Das ist eine Ursache der Divergenz der thermodynamischen Größen bei der numerischen Auswertung der ursprünglichen Integralgleichungen im Tieftemperaturlimes. Daher ist hier beim Übergang zu $T = 0$ eine Analyse des numerisch verifizierten Crossover-Verhaltens der Hilfsfunktionen notwendig. Der in Abb. (4.13) gezeigte Verlauf, der in (4.6) auftretenden Funktionen, wird im Tieftemperaturbereich immer akzentuierter [5]. Daraus resultiert die Form der Vorfaktoren in (4.6), wie sie ebenfalls dargestellt ist. Man kann also nach der geeigneten Linearisierung [1], also zum Beispiel $\ell c(\pm K_c) = \partial_h \ell c(x \mp K_c)$, die Funktion $\ell c'$ an der Stelle $\pm K_x$ auswerten und das restliche Integral analytisch ausrechnen. Exemplarisch ergibt sich

$$\Psi_{\mathfrak{c}} * \left(\frac{e^{\ell c}}{(1+e^{\ell c})^2} (\ell c')^2 \right)\Bigg|_x = \frac{\{\ell c'(K_c)\}^2}{\partial_x \ell c(K_c)} \cdot \left\{ \frac{1}{(x-K_c)^2+1} + \frac{1}{(x+K_c)^2+1} \right\}, \tag{4.6}$$

um damit insgesamt

$$\begin{aligned} \ell b''(x) &= -\Psi_{\mathfrak{bc}}(x) - \frac{1}{2\pi} \int\limits_{|y|>K_c} T_{sc}(x-y)\ell c''(y)dy \\ \ell c''(x) &= -\Psi_{\mathfrak{bb}}(x) - \Psi_{\mathfrak{cc}}(x) - \frac{1}{2\pi} \int\limits_{|y|>K_b} T_{sc}(x-y)\ell b''(y)dy \qquad (4.7) \\ & \qquad -\frac{1}{2\pi} \int\limits_{|y|>K_c} T_{cc}(x-y)\ell c''(y)dy \qquad (4.8) \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathfrak{cc}}(x) &= \tfrac{1}{\pi} \tfrac{\{\ell c'(K_c)\}^2}{\partial_x \ell c(K_c)} \cdot \left\{ \tfrac{1}{(x-K_c)^2+1} + \tfrac{1}{(x+K_c)^2+1} \right\} & T_{sc}(x) &= \tfrac{1}{x^2+1/4} \\ \Psi_{\mathfrak{bc}}(x) &= \tfrac{1}{2\pi} \tfrac{\{\ell c'(K_c)\}^2}{\partial_x \ell c(K_c)} \cdot \left\{ \tfrac{1}{(x-K_c)^2+1/4} + \tfrac{1}{(x+K_c)^2+1/4} \right\} & T_{cc}(x) &= \tfrac{2}{x^2+1} \\ \Psi_{\mathfrak{bb}}(x) &= \tfrac{1}{2\pi} \tfrac{\{\ell b'(K_b)\}^2}{\partial_x \ell b(K_b)} \cdot \left\{ \tfrac{1}{(x-K_b)^2+1/4} + \tfrac{1}{(x+K_b)^2+1/4} \right\} \end{aligned} \tag{4.9}$$

zu erhalten.

Es ist zu bemerken, daß jetzt alle Ausdrücke linear in β sind, da jedes $\ell c'$ und $\partial_x \ell c$ linear in β ist, und daher auch die Berechnung der magnetischen Suszeptibilität für $\beta \to \infty$ zu endlichen Werten führt. Eine Iteration dieser Gleichungen liefert die Nullpunktssuszeptibilität $\chi(T = 0)$. A.Klümper [9] ist die analytische Berechnung der magnetischen Suszeptibilität für das XXX-Heisenbergmodell im Tieftemperaturlimes gelungen, so daß auch für das tJ-Modell Hoffnung auf eine analytische Auswertung besteht, die die numerische Auswertung der nun linearen Integralgleichungen für $T = 0$ in der oben angegebenen Form überflüssig machen könnte.

[1] Zur Notation: $\left(\frac{d}{dx}\ell c(x)\right)\big|_{x=K_c} \equiv \partial_x \ell c(K_c)$

4.3.2. Integralgleichungen im Tieftemperaturlimes bei geringer Dichte

In diesem Abschnitt werden analytische Lösungen der Integralgleichungen im Limes geringer Dichte und tiefer Temperatur betrachtet.
Bei tiefen Temperaturen $\beta \gg 1$, geringer Teilchenzahldichte $\mu \ll 1$, kleinem magnetischen Feld h und kleinen Werten des Spektralparameters x, d.h. $2\pi\beta\Psi_{\mathfrak{c},\mathfrak{b},\overline{\mathfrak{b}}} \gg 1$, sind die Funktionen $\mathfrak{c}, \mathfrak{b}, \overline{\mathfrak{b}}$ in den Integralgleichungen (3.44) fast Null, so daß der Hauptbeitrag in den Integralgleichungen durch $x \gg 1$ verursacht wird. Als eine erste Näherung sieht man die Hilfsfunktionen als langsam variierend in diesem Bereich an. Man kann sie daher als Konstanten aus den Faltungsintegralen ziehen

$$\begin{aligned}
\log \mathfrak{b}(x) &\simeq -\beta/x^2 + \beta(\mu + h/2) - \log(1+\overline{\mathfrak{b}}) - \log(1+\mathfrak{c}) \\
\log \overline{\mathfrak{b}}(x) &\simeq -\beta/x^2 + \beta(\mu - h/2) - \log(1+\mathfrak{b}) - \log(1+\mathfrak{c}) \\
\log \mathfrak{c}(x) &\simeq -2\beta/x^2 + 2\beta\mu - \log(1+\overline{\mathfrak{b}}) - \log(1+\mathfrak{b}) - \log(1+\mathfrak{c}).
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Durch Exponenzieren der Gleichungen (4.10) erhält man ein Gleichungssystem für die Hilfsfunktionen $\mathfrak{b}, \overline{\mathfrak{b}}$ und $\mathfrak{c}$ mit der Lösung

$$\begin{aligned}
\mathfrak{b} &= \frac{e^{\beta(\mu+h/2)-\beta/x^2}}{e^{\beta(\mu-h/2)-\beta/x^2}+1} \quad ; \qquad \overline{\mathfrak{b}} = \frac{e^{\beta(\mu-h/2)-\beta/x^2}}{e^{\beta(\mu+h/2)-\beta/x^2}+1} \\
\mathfrak{c} &= \frac{e^{2\beta\mu-2\beta/x^2}}{e^{\beta(\mu-h/2)-\beta/x^2}+e^{\beta(\mu+h/2)-\beta/x^2}+1}.
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Da der größte Eigenwert durch $\log \Lambda = -\log \mathfrak{c}(0) + 2\beta\mu$ gegeben ist, interessiert hier die dritte der Gleichungen (4.10). In der obigen Approximation tragen vorwiegend große Werte der Integrationsvariable bei, d.h. mit $\Psi_{\mathfrak{c},\mathfrak{b},\overline{\mathfrak{b}}}(y) \sim 1/y^2$ gilt zum Beispiel

$$\begin{aligned}
\Psi_{\mathfrak{b}} * \log(1+\overline{\mathfrak{b}})\big|_{\frac{i}{2}} &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{\mathfrak{b}}(\frac{i}{2}-y)\log(1+\overline{\mathfrak{b}})(y)dy \\
&\approx \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{y^2}\log(1+\overline{\mathfrak{b}})(y)dy \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\beta}}\log(1+\overline{\mathfrak{b}})\left(\frac{\sqrt{\beta}}{y}\right)dy \\
&\qquad \text{mit der Substitution} \quad y \to \frac{\sqrt{\beta}}{y}.
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Die logarithmische Struktur der Summanden in $\mathfrak{c}(0)$ macht es möglich, den Logarithmus der Produkte $(1+\mathfrak{b}), \ldots$ mit den expliziten Ausdrücken (4.11) für die

Hilfsfunktionen zu berechnen. Es folgt dann mit $f = -\frac{1}{\beta}\log\Lambda$

$$f \sim -\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{\beta}}\log\left\{\sqrt{(1+\overline{\mathfrak{b}})(1+\mathfrak{b})}(1+\mathfrak{c})\right\}\left(\frac{\sqrt{\beta}}{y}\right)dy \tag{4.13}$$

$$\begin{aligned} f(\beta,\mu,h) &= -\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\beta^{\frac{3}{2}}}\log\left(1+e^{\beta(\mu+h/2)-\beta/x^2}\right)dx \\ &- \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\beta^{\frac{3}{2}}}\log\left(1+e^{\beta(\mu-h/2)-\beta/x^2}\right)dx. \end{aligned}$$

Das stimmt im Limes $h \to 0$ mit dem in [5] gefundenen Ergebnis überein. Eine Entwicklung dieses Ausdrucks im Tieftemperaturlimes und für kleine h ergibt

$$\begin{aligned} f = &- \frac{2}{3\pi}(\mu+h/2)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{12}(\mu+h/2)^{-\frac{1}{2}}\ T^2 \\ &- \frac{2}{3\pi}(\mu-h/2)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{12}(\mu-h/2)^{-\frac{1}{2}}\ T^2. \end{aligned} \tag{4.14}$$

Man erhält insbesondere die Nullpunkts-Suszeptibilität für den feldfreien Fall bei geringen Dichten [40]

$$\chi = \frac{1}{2\pi^2 n} \qquad n : \text{Teilchendichte.} \tag{4.15}$$

5. Berechnung von Korrelationslängen im Spin-$\frac{1}{2}$-Heisenberg-Modell bei tiefen Temperaturen

Der zweite Teil dieser Arbeit beschäftigt sich mit der analytischen Berechnung von Korrelationslängen. Es wird die Berechnung der Korrelationslängen direkt aus dem Formalismus der nicht-linearen Integralgleichungen angestrebt. Da eine derartige Methode zur Berechnung der Korrelationslängen noch nie durchgeführt wurde, ist es sinnvoll, sich auf einen Spezialfall des tJ-Modells zu beschränken. Im Limes der Teilchendichte $n \to 1$ haben die Elektronen keine Hüpffreiheit mehr. So geht das tJ-Modell in die isotrope Spin-$\frac{1}{2}$-Heisenberg-Kette über. In diesem Teil der Arbeit soll dieses einfachere Modell untersucht werden. Die nächsten Abschnitte sind einigen Grundlagen des Heisenberg-Modells gewidmet.

5.1. Der eindimensionale Heisenbergmagnet

5.1.1. Das Modell

Das Heisenberg-Modell [2] ist ein nicht-triviales Beispiel für ein wechselwirkendes Vielteilchensystem. Der Hamiltonian mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung auf einem Gitter mit L Plätzen lautet [1]

$$\mathcal{H} = -\sum_{m=1}^{L} \left\{ J_x \sigma_x^{(m)} \sigma_x^{(m+1)} + J_y \sigma_y^{(m)} \sigma_y^{(m+1)} + J_z \sigma_z^{(m)} \sigma_z^{(m+1)} \right\} . \tag{5.1}$$

Das komplett anisotrope Modell mit $J_x \neq J_y \neq J_z \neq J_x$ heißt XYZ-Modell. Das Heisenbergmodell im äußeren magnetischen Feld h parallel zur z-Achse ist nur für die XXZ-Kette exakt lösbar. Der Hamiltonian ist hier durch

$$\mathcal{H} = -\sum_{m=1}^{L} \left\{ \sigma_x^{(m)} \sigma_x^{(m+1)} + \sigma_y^{m} \sigma_y^{(m+1)} + \Delta \sigma_z^{(m)} \sigma_z^{(m+1)} \right\} + h \sum_{m=1}^{L} \sigma_z^{(m)} \tag{5.2}$$

mit periodischen Randbedingungen $\sigma^{(M+1)} = \sigma^{(1)}$ gegeben. $\Delta = 1$ enspricht dem isotropen Ferromagneten und $\Delta = -1$ dem isotropen Anti-Ferromagneten. Für $-1 \leq \Delta < 1$ hat das Spektrum des Hamiltonians keine Lücke, was für einen algebraischen Zerfall der Korrelationen bei $T = 0$ spricht. Der Koordinaten-Bethe-Ansatz [1] ist ein geeignetes Verfahren zur Diagonalisierung des Problems. Es sollen hier nur die Ergebnisse angegeben werden. Mit den Definitionen für den Impuls p_0 und die Zweiteilchen-Streuphase $\Theta(\lambda - \mu)$

$$\begin{aligned} p_0(\lambda) &= i \log \left[\left\{ \cosh(\lambda - i\frac{\gamma}{2}) / (\cosh \lambda + i\frac{\gamma}{2}) \right\} \right] ; \quad \Delta = \cos\gamma \\ \Theta(\lambda_1 - \lambda_2) &= i \log \frac{\sinh(i\gamma + \lambda_1 - \lambda_2)}{\sinh(i\gamma - \lambda_1 + \lambda_2)} \end{aligned} \tag{5.3}$$

[1] $\sigma_i^{(m)}$ bezeichnet die i-te Pauli-Matrix am m-ten Gitterplatz

erhält man als Ausdruck für die logarithmische Form der Bethe-Ansatz-Gleichung

$$Lp_0(\lambda_\alpha) + \sum_{\beta=1}^{N_\downarrow} \Theta(\lambda_\alpha - \lambda_\beta) = 2\pi n_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N_\downarrow. \tag{5.4}$$

$N_\downarrow$ ist die Anzahl der umgeklappten Spins ausgehend vom ferromagnetischen Grundzustand. $\{n_\alpha\}$ ist ein Satz von ganzen Zahlen (ungeradzahligen Vielfachen von $\frac{1}{2}$) für ungerades (gerades) $N_\downarrow$. Der Energieeigenwert $E_{N_\downarrow}$ zur Quantenzahl $N_\downarrow$, also zum Superpositionszustand aller Zustände mit $N_\downarrow$ umgeklappten Spins beträgt

$$E_{N_\downarrow} = \sum_{\alpha=1}^{N_\downarrow} \varepsilon_0(\lambda_\alpha) - hL \tag{5.5}$$

mit der Einteilchen-Dispersion

$$\begin{aligned} \varepsilon_0(\lambda) &= -2\sin\gamma \frac{dp_0(\lambda)}{d\lambda} + 2h \\ &= -2\sin^2\gamma \left[(\cosh(\lambda - i\frac{\gamma}{2})\cosh(\lambda + i\frac{\gamma}{2})\right]^{-1} + 2h. \end{aligned} \tag{5.6}$$

Der zugehörige Zustand kann als ein $N_\downarrow$-Teilchen-Zustand mit den Impulsen $p_0(\lambda_\alpha)$ und den Energien $\varepsilon_0(\lambda_\alpha)$ über dem ferromagnetischen Vakuumzustand $|0\rangle$ interpretiert werden. In diesem Kontext nennt man jeden umgeklappten Spin ein "Teilchen". Die Teilchendichte ist dann durch

$$D = \frac{N_\downarrow}{L} \tag{5.7}$$

gegeben. Im thermodynamischen Limes, d.h. $N_\downarrow \to \infty$ und $L \to \infty$ mit $D = \text{const}$, kann man eine lokale Dichte im Raum der Bethe-Ansatz-Zahlen einführen [10]

$$\varrho(\lambda_\alpha) = \frac{1}{L(\lambda_{\alpha+1} - \lambda_\alpha)}, \tag{5.8}$$

um die folgenden Integralgleichungen

$$\begin{aligned} p_0'(\lambda) &= 2\pi\varrho(\lambda) - \int_{-K}^{K} k(\lambda - \mu)\varrho(\mu)d\mu \\ D &= \int_{-K}^{K} \varrho(\lambda)d\lambda \end{aligned} \tag{5.9}$$

mit dem "nackten" Einteilchenimpuls $p_0(x)$ zu erhalten. Der Integrationskern ist die Ableitung der Zweiteilchen-Streuphase Θ

$$k(\lambda) = \frac{\partial\Theta(\lambda)}{\partial\lambda}. \tag{5.10}$$

Führt man die nackte Dichte $\varrho_0(x)$ ein, gilt im hier behandelten Modell $\varrho_0 = p_0'/2\pi$ und man kann die erste der Gleichungen (5.9) als

$$\varrho(\lambda) = \varrho_0(\lambda) + \frac{1}{2\pi} \int_{-K}^{K} k(\lambda - \mu)\varrho(\mu) d\mu \tag{5.11}$$

ausdrücken. Desweiteren führt man die "dressed energy" ein

$$\varepsilon(\lambda) = \varepsilon_0(\lambda) + \frac{1}{2\pi} \int_{-K}^{K} k(\lambda - \mu)\varepsilon(\mu) d\mu. \tag{5.12}$$

Sie ist die Energie von Teilchenanregungen über der Grundzustandsenergie. Diese "angezogene" Energie ist eine der Größen, die man bei der folgenden Vorgehensweise erwartet. Im nächsten Abschnitt werden die Integralgleichungen für das Heisenberg-Modell bei *endlicher* Temperatur angegeben, die völlig anolog zum Verfahren beim tJ-Modell gewonnen wurden [7]. Da das Ziel dieses Teils der Arbeit die Bestimmung von Korrelationslängen in der Tieftemperaturasymptotik ausgehend von diesen Integralgleichungen ist, erwartet man für die Ergebnisse einen Zusammenhang zu typischen Größen der Tieftemperaturanregung, wie der "dressed energy".
Die andere Größe dieser Art ist die "dressed charge", definiert als

$$\xi(\lambda) = 1 + \frac{1}{2\pi} \int_{-K}^{K} k(\lambda, \mu)\xi(\mu) d\mu. \tag{5.13}$$

Um ihre Bedeutung zu klären, werden jetzt die Finite-Size-Korrekturen im Heisenberg-Modell [24]

$$\begin{aligned} \delta E &= \frac{2\pi v}{L} \cdot x \\ \text{mit} \quad x &= \left[\left(\frac{\Delta N}{2\xi(K)} \right)^2 + (d\xi(K))^2 + N^+ + N^- \right]. \end{aligned} \tag{5.14}$$

betrachtet. Die Gleichung (5.14) bedarf einiger Interpretation. Man kann die auftretenden Größen in folgender Weise erklären, indem man folgende Prozesse betrachtet:

1. n_α ist die Quantelung nach (5.4), die dem "Teilchen" am Fermi-Punkt K zugehörig ist. Man kann diese Zahl um N^+ ändern. Analog ändert man diese Zahl am Fermi-Punkt $-K$ um N_-.

2. Man kann die Anzahl der "Teilchen", also die Anzahl der Down-Spins, um ΔN ändern.

3. Schließlich betrachtet man Rückstreuprozesse, bei denen d Teilchen von einem Fermi-Punkt zum anderen springen.

Die Bedeutung von ξ liegt in ihrem Zusammenhang mit den kritischen Exponenten des Systems. Die Korrelationsfunktionen zerfallen algebraisch gemäß $g(r) \sim r^{-2x}$, wobei x aus der Finite-Size-Korrektur zur jeweiligen Anregung bestimmt wird, wie es in Gleichung (5.14) angegeben ist.

5.1.2. Die Heisenbergkette bei endlicher Temperatur

Die Herleitung der nicht-linearen Integralgleichung für das Heisenbergmodell verläuft von der Methode her völlig analog zum tJ-Modell. Hier ist das zu betrachtende klassische Modell das 6-Vertex-Modell mit alternierenden Reihen [7]. Das 8-Vertexmodell kann für periodische Randbedingungen in beiden Richtungen exakt gelöst werden und entspricht der XYZ-Kette ohne äußeres Feld. Will man ein äußeres magnetisches Feld h einführen, muß man die Randbedingungen in einer Richtung modifizieren. Das 8-Vertexmodell ist dann allerdings nicht mehr integrabel. Man geht daher zum 6-Vertexmodell über [13]. Wenn die durch die Fixierung des Randes zusätzlich auftretenden Operatoren die Symmetrie des Modells haben, bleibt das 6-Vertexmodell exakt lösbar [7]. In diesem Rahmen kann man die XXZ-Kette mit äußerem Feld betrachten. Man erhält wieder über die Diagonalisierung der Quantentransfer-Matrix eine Eigenwertgleichung unter der Bedingung der Bethe-Ansatz-Gleichungen. Durch Einführung von geeigneten Hilfsfunktionen $\mathfrak{a}$ und $\overline{\mathfrak{a}}$ resultieren die folgenden Integralgleichungen für die bei $T = 0$ kritische[2] XXZ-Kette [7]

$$\begin{aligned} \log \mathfrak{a}(x) &= -\frac{\pi\beta}{\gamma}\frac{1}{\cosh \frac{\pi}{\gamma} x} + \frac{\pi}{\pi-\gamma}\beta \cdot \frac{h}{2} \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} \left[k(x-y)\log \mathfrak{A}(y) - k(x-y-i\gamma+i\varepsilon)\log \overline{\mathfrak{A}}(y) \right] dy \end{aligned} \tag{5.15}$$

für den Limes der Trotter-Zahl $M \to \infty$. Es gilt $\mathfrak{A} = 1 + \mathfrak{a}$ und man erhält die Integralgleichung für $\overline{\mathfrak{a}}$ durch die Ersetzungen $\mathfrak{a} \leftrightarrow \overline{\mathfrak{a}}$ und $\beta h/2 \leftrightarrow -\beta h/2$. Für die Berechnung der angeregten Zustände der Quanten-Transfermatrix soll die kritische XXX-Kette im Tieftemperaturlimes betrachtet werden. Dazu ist eine qualitative Vorstellung über die Verteilung der Bethe-Ansatz-Wurzeln -und Löcher notwendig. Daher wird im folgenden der einfachste Fall, die kritische XY-Kette, genauer betrachtet.

[2]Eindimensionale Systeme zeigen kein kritisches Verhalten für $T > 0$.

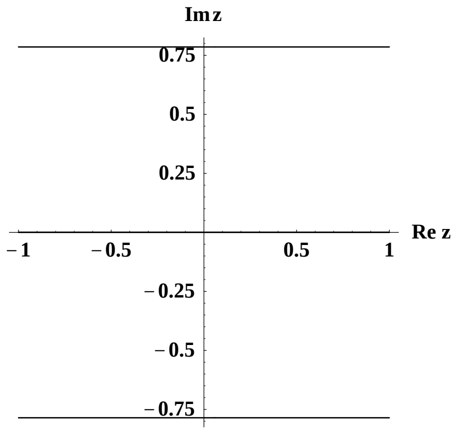

Abbildung 5.1.: $h = 0$

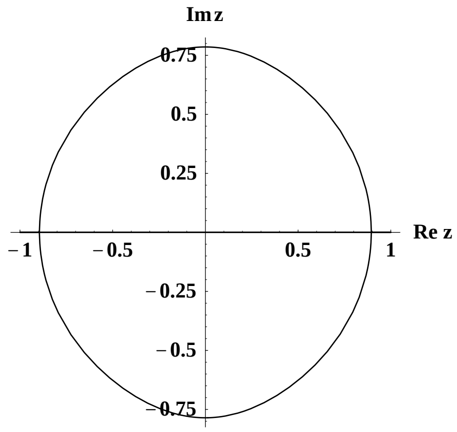

Abbildung 5.2.: $0 < h < h_c$

5.1.3. Die XY-Kette

Man erhält die kritische XY-Kette aus (5.15) im Spezialfall $\gamma \to \pi/2$, so daß $\Delta = 0$ und

$$\log \mathfrak{a}(x) = -\frac{2\beta}{\cosh 2x} + \beta h \tag{5.16}$$

gilt. In diesem Limes verschwindet der Integrationskern k [7]. Dies spricht für die Wechselwirkungsfreiheit des Systems. In der Tat läßt sich die XY-Kette durch eine Jordan-Wigner-Transformation auf freie Fermionen abbilden. Für die Hilfsfunktion $\mathfrak{a}$ gilt, wenn v_k die Position einer Bethe-Ansatz-Zahl oder eines Loches beschreibt,

$$\mathfrak{a}(v_k) = -1. \tag{5.17}$$

Wegen (5.17) ist $\log \mathfrak{a}(v_k) = i\pi * (2k+1)$, also rein imaginär. Bestimmt man also die rein imaginären Lösungslinien der XY-Integralgleichungen (5.16), erhält man Linien in der komplexen Ebene, auf denen die Bethe-Ansatz-Zahlen -und Löcher liegen müssen. Die Bedingung lautet also

$$\mathrm{Re}\left\{-\frac{2\beta}{\cosh 2z} + \beta h\right\} = 0 \tag{5.18}$$

mit dem Ergebnis

$$\mathrm{Im} z = \frac{1}{2} \arccos\left\{\frac{\cosh 2\mathrm{Re} z}{h} \pm \sqrt{\frac{\cosh^2 \mathrm{Re} z}{h^2} - \sinh^2 2\mathrm{Re} z}\right\}. \tag{5.19}$$

Die Abbildung (5.1) zeigt das System bei $h = 0$. Die Bethe-Ansatz-Zahlen und -Löcher sind auf Linien parallel zur x-Achse bei $x \pm i\pi/4$ angeordnet, um sich mit

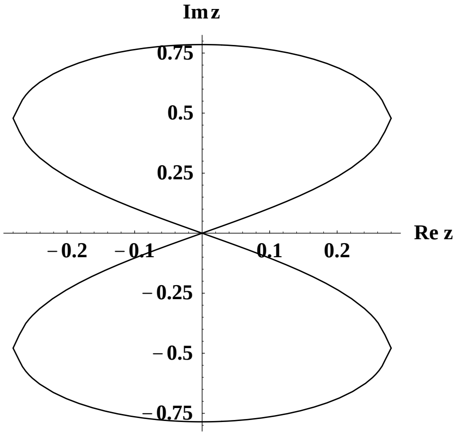

Abbildung 5.3.: $h = h_c$

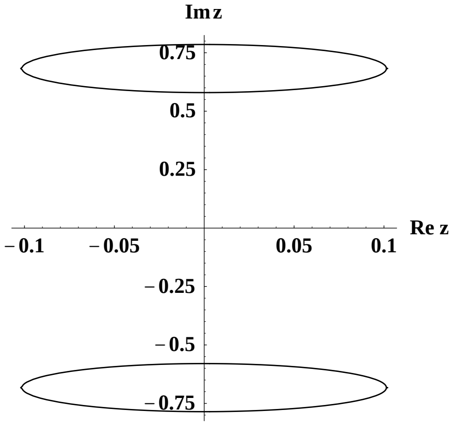

Abbildung 5.4.: $h > h_c$

anwachsendem Magnetfeld h in Richtung der x-Achse zu krümmen (Abb. 5.2) und zu schließen (5.4). Erreicht man den kritischen Wert des äußeren Feldes $h = h_c$, kommt es zur Einschnürung (Abb. 5.3). Für $h > h_c$ schließen sich beide Äste in ihrer Halbebene. Das System zeigt dann kein kritisches Verhalten bei $T = 0$ mehr. In den weiteren Betrachtungen ist der Fall $h < h_c$ relevant. Die Teilchen und Löcher liegen auf gebogenen Linien und sammeln sich im Tieftemperaturlimes in der Nähe von $x = -K$ und $x = +K$. Im Grundzustand sind alle Wurzeln in der unteren komplexen Halbebene angeordnet, während sich die Löcher in der oberen komplexen Halbebene befinden. Im Vergleich mit dem Fall $h = 0$ ist entscheidend, daß sich die Kurven für $h < h_c$ im endlichen Bereich auf der x-Achse schließen. Es wird die Annahme gemacht, daß dieses Bild qualitativ für die kritische XXX-Kette,die im nächsten Abschnitt betrachtet wird, erhalten bleibt [25].

5.2. Berechnung von Korrelationslängen für die XXX-Kette bei tiefen Temperaturen

5.2.1. Die XXX-Kette

Die isotrope antiferromagnetische Spin-$\frac{1}{2}$-Heisenberg-Kette ist durch

$$\mathcal{H} = 2J \sum_{j=1}^{M} \vec{S}_j \vec{S}_{j+1} \tag{5.20}$$

definiert. Im Tieftemperaturlimes $\beta \to \infty$ reduzieren sich analog zum tJ-Modell die beiden Integralgleichungen auf eine. Man erhält die isotrope Kette durch den Übergang $\gamma \to 0$ [7] aus (5.15)

$$\begin{aligned} \log \mathfrak{a}(x) &= -\frac{v\beta}{\cosh x} + \frac{\beta h}{2} + \int_{-\infty}^{\infty} k(x-y) \log \mathfrak{A}(y) dy \\ k(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{e^{-\frac{\pi}{2}k}}{\cosh \frac{\pi}{2}k} \cos(kx) dk \\ v &= \pi J. \end{aligned} \tag{5.21}$$

Man kann mit der Lösung der Integralgleichung (5.21) die freie Energie des Systems in geschlossener Form angeben [7]

$$\beta f = \beta e_0 - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\log \left\{ \mathfrak{A}\overline{\mathfrak{A}}(x) \right\}}{\cosh x} dx, \tag{5.22}$$

die sich im Tieftemperaturlimes auf

$$\beta f = \beta e_0 - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\log \mathfrak{A}(x)}{\cosh x} dx \tag{5.23}$$

reduziert. Das ist natürlich gleichbedeutend mit der Feststellung, daß der größte Eigenwert Λ_{max} im Tieftemperaturbereich die Form

$$\ln \Lambda_{\text{max}} = -e_0 + \frac{1}{2\beta\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\log \mathfrak{A}(x)}{\cosh x} dx \tag{5.24}$$

hat. Die explizite Form der Konstanten e_0 ist hier nicht wichtig. Für die weiteren Betrachtungen spielt nur die Struktur dieser Gleichung

$$\log \mathfrak{a}(x) = -\beta\varepsilon_0(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} k(x-y) \log(1+\mathfrak{a}(y)) dy \tag{5.25}$$

mit der Symmetrie des Integrationskerns

$$k(x) = k(-x). \tag{5.26}$$

eine Rolle.

5.2.2. Verteilung der Löcher und Wurzeln

In Abbildung 5.5 ist die Verteilung der Wurzeln und Löcher im führenden Zustand, also in dem Zustand, der zum größten Eigenwert gehört, für $0 < h < h_c$ dargestellt. Man sieht, daß die Bethe-Ansatz-Zahlen -und Löcher in der oberen und unteren komplexen Halbebene arrangiert sind und jeweils eine Wurzel und ein Loch gleichen Realteil haben. Der Integrationsweg der Integralgleichung (5.21) verläuft zwischen

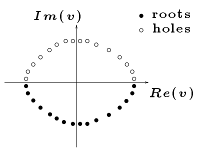

Abbildung 5.5.: Verteilung der Bethe-Ansatz-Zahlen beim XXX-Heisenberg-Modell

den unteren Wurzeln und oberen Löchern auf der reellen Achse. Umverteilung der Wurzeln erhält die Anzahl der Bethe-Ansatz-Zahlen und die Magnetisierung. Die maximale Anzahl der Bethe-Ansatz-Zahlen korrespondiert zum führenden Zustand der Quanten-Transfermatrix. Entfernen einer Wurzel führt zu einem niedriger liegenden Eigenzustand der Quanten-Transfermatrix mit geänderter Magnetisierung. Daher werden angeregte Zustände mit Spin durch Entfernen von Wurzeln gekennzeichet. Auf diese Weise betrachtet man zwei Arten von Elementaranregungen

- Spinlose Anregungen: Die Wurzeln werden so umverteilt, daß die dem Punkte $x = -K$ nächsten Wurzeln auf die d dem Punkte $x = K$ nächsten Löcher gesetzt werden. So entstehen also d Wurzeln in der oberen Halbebene und d Löcher in der unteren Halbebene (siehe Abb. 5.6), [3]

- Anregungen mit Spin: es werden jeweils s Wurzeln, die $x = K$ und $x = -K$ am nächsten liegen, entfernt (siehe Abb. 5.8).

5.2.3. Spinlose Anregungen

Die Grundidee zur Beschreibung von Anregungen durch die Integralgleichungen besteht darin, die Form der Gleichungen unverändert zu lassen und nur die Integratioswege zu verändern, so daß diese Pfade weiterhin zwischen Teilchen und Löchern

[3]Natürlich bedeutet hier “Spinlose Anregung”, daß sich die Magnetisierung des Eigenzustands der Quanten-Transfermatrix in z-Richtung bei diesem Anregungstyp nicht ändert.

verlaufen. Das ist auch konsistent mit der prinzipiellen Vorgehensweise, da man die Gestalt der Integrationswege nach der Verteilung der Bethe-Ansatz-Zahlen ausgerichtet hat. Die modifizierten Löcher oder Teilchen werden jedoch umrundet. So wird die Anregung im Integrationsweg offenbar. Diese Deformation der Integrationswege verändert natürlich die Integralgleichung, so daß ihre Lösung nicht mehr den größten Eigenwert Λ_{max} liefert, sondern einen der nächstgrößten Eigenwerte Λ_n. Korrelationslängen sind nach der in Kapitel 1 vorgestellten Methode durch

$$\xi^{-1} = \log\left(\Lambda_{\text{max}}/\Lambda_n\right) \tag{5.27}$$

gegeben. Die Lösung der "angeregten" Integralgleichung ist also ein möglicher Zugang zu Korrelationslängen des Systems. In Abb. 5.6 sind die der modifizierten Wur-

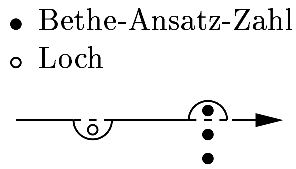

Abbildung 5.6.: Spinlose Anregung

zelverteilung angepaßten Integrationswege beschrieben. Da die Anzahl der Bethe-Ansatz-Wurzeln nicht verändert wird, bleibt die Magnetisierung des Systems in z-Richtung unverändert. Das heißt, die Anregung ist der longitudinalen Spin-Spin-Korrelation $\langle s_z s_z \rangle$ zugehörig, wenn, wie oben angenommen, das Magnetfeld in z-Richtung zeigt. Es wird jetzt die Integralgleichung für die kritische XXX-Kette im Tieftemperaturlimes in ihrer Struktur (5.25)

$$\log \mathfrak{a}(x) = -\beta\varepsilon_0(x) + \int\limits_{-\infty}^{+\infty} k(x-y)\log(1+\mathfrak{a}(y))dy \tag{5.28}$$

betrachtet. Ausgangspunkt der Analyse der Tieftemperaturanteile der Integralgleichung ist das numerisch verifizierte Cross-Over-Verhalten der Hilfsfunktion $\mathfrak{a}$, das in Abb. 5.7 dargestellt ist. Aus dem Verlauf dieser Funktion schließt man, daß die Terme führender Ordnung im Intervall $[-K, K]$ mit $\log(1+\mathfrak{a}) \approx \log\mathfrak{a}$ zustande kommen und außerhalb dieses Intervalls in führender Ordnung $\log(1+\mathfrak{a}) \approx 0$ gilt. Die Integration entlang des oben beschriebenen Weges unter Berücksichtigung der Elementaranregungen liefert

$$\log \mathfrak{a}(x) = -\beta\varepsilon_0(x) + \int\limits_{-K}^{+K} k(x-y)\left(\log\mathfrak{a}(y) + 2\pi i d\right)dy + \mathcal{O}(\frac{1}{\beta}) \tag{5.29}$$

für den Bulk-Anteil, der linear von β abhängt. Mit den in Anhang E eingeführten Hilfsintegralgleichungen für die "dressed charge" und die "dressed energy" ergibt

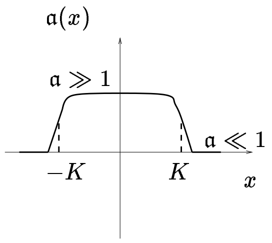

Abbildung 5.7.: Verlauf von $\mathfrak{a}$ im Grundzustand

sich als Lösung

$$\log \mathfrak{a}(x) = -\beta\varepsilon(x) + 2\pi i d(\xi(x) - 1). \tag{5.30}$$

Die explizite Rechnung ist in Anhang B angegeben. Die Behandlung der $1/\beta$-Korrekturen im Tieftemperaturlimes erfordert eine genauere Analyse der Logarithmus-Definition. Durch die oben gewählten Integrationswege gewinnt der Logarithmus beim Passieren von $x = -K$ eine Phase von $+2\pi i d$, um sie beim Durchgang $x = +K$ wieder zu verlieren. Im Grundzustand ist $\log \mathfrak{a}$ reell mit dem in Abb. (5.7) gezeigten Verhalten. Wenn also der Zweig des Logarithmus für $\log \mathfrak{a}$ und $\log(1 + \mathfrak{a})$ derselbe sein soll, wie es für die Wohldefiniertheit der unten angegebenen Substitutionen erforderlich ist, ist wohl der Imaginärteil von $\log \mathfrak{a}$ eine symmetrische Funktion. Für die "dressed energy" gilt an der Fermi-Kante $\varepsilon(K) = \varepsilon(-K) = 0$, so daß mit (5.30)

$$\log \mathfrak{a}(K) = 2\pi i d(\xi(K) - 1) \tag{5.31}$$

gilt und daher $\log \mathfrak{a}(K)$ rein imaginär ist. Man schließt daher

$$\log \mathfrak{a}(K) = \log \mathfrak{a}(-K). \tag{5.32}$$

Aufgrund der stärker werdenden Akzentuierung des Crossover-Verhaltens der Hilfsfunktion $\mathfrak{a}$ für $\beta \to \infty$ ist es möglich, an den beiden Fermipunkten eine Linearisierung von $\log \mathfrak{a}$ durchzuführen

$$\log \mathfrak{a}(x) = \begin{cases} \log \mathfrak{a}(K) + \beta\varepsilon'(K)(x + K) & : \text{ bei } x = -K \\ \log \mathfrak{a}(K) - \beta\varepsilon'(K)(x - K) & : \text{ bei } x = K \end{cases}, \tag{5.33}$$

um die $\mathcal{O}(1/\beta)$-Korrekturen analytisch zu berechnen.
Es ist zu bemerken, daß für große β die Ableitung von $\log \mathfrak{a}$ durch $\log \mathfrak{a} = -\beta\varepsilon(x)$ dominiert wird und die komplexe Korrektur bei der Ableitung vernachlässigt werden kann. Die $\mathcal{O}(1/\beta)$-Anteile aus der Integralgleichung lauten

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{-K} k(x-y)\log(1+\mathfrak{a}(y))dy \; + \int_{-K}^{K} k(x-y)\log(1+\tfrac{1}{\mathfrak{a}(y)})dy \\ &+ \int_{K}^{\infty} k(x-y)\log(1+\mathfrak{a}(y))dy. \end{aligned} \tag{5.34}$$

Zur Berechnung dieser Anteile betrachtet man die beiden Intervalle $[-\infty, 0]$ und $[0, \infty]$. Substituiert man $z = \log \mathfrak{a}(x)$ mit den linearisierten Ausdrücken aus (5.33) ergibt sich

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\beta\varepsilon'(K)} \int\limits_{\underset{\longrightarrow\cup}{-\infty}}^{-K} k(x-y)\log(1+\mathfrak{a}(y))dy + \frac{1}{\beta\varepsilon'(K)} \int\limits_{\underset{\longrightarrow}{-K}}^{0} k(x-y)\log(1+\frac{1}{\mathfrak{a}(y)})dy \\ = &\int\limits_{\underset{\longrightarrow\cup}{-\infty}}^{\log\mathfrak{a}(K)} k(x-y)\log(1+e^{z})dz + \int\limits_{\underset{\longrightarrow}{\log\mathfrak{a}(K)}}^{\infty} k(x-y)\log(1+e^{-z})dz. \end{aligned} \tag{5.35}$$

In Anhang D ist ausführlich beschrieben, wie man das erste Integral mit seinen d Umläufen berechnet. Man erhält

$$\int\limits_{-\infty}^{\log\mathfrak{a}(K)} (1+e^{z})dz + \int\limits_{\log\mathfrak{a}(K)}^{\infty} (1+e^{-z})dz - 2\pi^2 d^2 + 2\pi i d \log\mathfrak{a}(K). \tag{5.36}$$

Leitet man die beiden Summanden aus (5.36) nach der Integralgrenze $\log\mathfrak{a}(K)$ ab, ergibt sich $\log\mathfrak{a}(K)$ und damit als Gesamtwert beider Integrale $\frac{1}{2}\log\mathfrak{a}^2 + \text{const}$. Die Konstante berechnet sich zu $\frac{\pi^2}{6}$ (D.5). Man gelangt so insgesamt zu dem Ausdruck

$$\begin{aligned} &\int\limits_{\underset{\longrightarrow\cup}{-\infty}}^{-K} k(x-y)\log(1+\mathfrak{a}(y))dy + \int\limits_{\underset{\longrightarrow}{-K}}^{0} k(x-y)\log(1+\frac{1}{\mathfrak{a}(y)})dy = \\ &\frac{1}{\beta\varepsilon'(K)}\left(\frac{\pi^2}{6} + \frac{1}{2}(\log\mathfrak{a}(K))^2 - 2\pi^2 d^2 + 2\pi i d\log\mathfrak{a}(K)\right) = \\ &\frac{1}{\beta\varepsilon'(K)}\left(\frac{\pi^2}{6} + (\log\mathfrak{a}(K) + 2\pi i d)^2\right) \underbrace{=}_{(5.31)} \\ &\frac{1}{\beta\varepsilon'(K)}\left(\frac{\pi^2}{6} - 2\pi^2 d^2 \xi(K)^2\right). \end{aligned} \tag{5.37}$$

Die Integrationen im Intervall $[0, \infty]$ liefern denselben Beitrag. Es folgt das Ergebnis

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\frac{1}{\beta})\text{-Anteile} &= \frac{\Omega}{\beta\varepsilon'(K)} \\ \text{mit} \quad \Omega &= \frac{\pi^2}{6} - 2\pi^2 d^2 \xi(K)^2, \end{aligned} \tag{5.38}$$

das genauso für das Intervall $[-\infty, 0]$ aus (5.34) gilt.

5.2.4. Anregungen mit Spin

Anregungen mit veränderter Magnetisierung enstehen durch Entfernen von Bethe-Ansatz-Zahlen aus der Verteilung. Die longitudinale Korrelationsfunktion $\langle s_z s_z \rangle$ verschwindet[4] bei dieser Form der Anregung, so daß transversale Korrelationen beschrieben werden. Man ermittelt also hier die transversale Korrelationslänge. Aufgrund der Symmetrie des Systems in der xy-Ebene folgert man

$$\langle s_x s_x \rangle = \langle s_y s_y \rangle \,, \tag{5.39}$$

und damit natürlich auch die Gleichheit der zugehörigen Korrelationslängen.
Wie aus Abb. 5.8 ersichtlich werden die Singularitäten zweimal im mathematisch positiven Sinn umlaufen. Stellt man sich vor, der Logarithmus hat bei $-\infty$ die Phase $-2\pi i s$, so gewinnt er bei $x = -K$ die Phase $+2\pi i s$ und ebenso bei $x = K$. Der Imaginärteil des Logarithmus ist also ungerade und man folgert in gleicher Weise wie für die spinlosen Anregungen

$$\log \mathfrak{a}(-K) = -\log \mathfrak{a}(K). \tag{5.40}$$

Für den Bulk-Anteil ergibt sich demzufolge die Integralgleichung

$$\begin{aligned}
\log \mathfrak{a}(x) &= -\beta\varepsilon_0(x) - 2\pi i s \cdot \int_{-\infty}^{-K} k(x-y)dy + \int_{-K}^{K} k(x-y)\log \mathfrak{a}(y)dy \\
&+ 2\pi i s \cdot \int_{K}^{\infty} k(x-y)dy + \mathcal{O}(1/\beta) \\
&= -\beta\varepsilon_0(x) + 2\pi i s \left[\int_{K}^{\infty} k(x-y)dy - \int_{-\infty}^{-K} k(x-y)dy \right] \\
&+ \int_{-K}^{K} k(x-y)\log \mathfrak{a}(y)dy
\end{aligned} \tag{5.41}$$

mit der Lösung (siehe Anhang D)

$$\log \mathfrak{a}(K) = 2\pi i s \left(1 - \frac{1}{\xi(K)} \right). \tag{5.42}$$

Die Berechnungen der $\mathcal{O}(1/\beta)$-Korrekturen vollziehen sich analog zu denen der spinlosen Anregungen, man muß aber (5.40) bei der Linearisierung beachten.

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}(\frac{1}{\beta})\text{-Anteile} &= \frac{\Omega}{\beta\varepsilon'(K)} \\
\text{mit} \quad \Omega &= \frac{\pi^2}{6} - 2\pi^2 s^2 \frac{1}{\xi(K)^2}.
\end{aligned} \tag{5.43}$$

[4] Die Spinoperatoren sind beispielsweise, wie in (2.3) beschrieben, auf den Gitterplätzen 1 und $r+1$ plaziert.

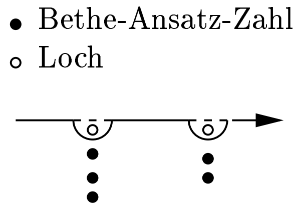

Abbildung 5.8.: Anregungen mit Spin

5.3. Berechnung der Korrelationen

Im folgenden sollen die oben berechneten Tieftemperatur-Korrekturen benutzt werden, um einen Ausdruck für den der jeweiligen Anregung zugehörigen Eigenwert im Tieftemperaturlimes zu erhalten.
Die Energiedichte des Systems bei $T = 0$ ist durch

$$e = E/M = e_0 + \int_{-K}^{K} \varrho_0(x)\varepsilon(x)dx = e_0 + \int_{-K}^{K} \varrho(x)\varepsilon_0(x)dx \tag{5.44}$$

gegeben [24]. Man betrachtet den Tieftemperaturausdruck für die freie Energie f (5.23)

$$\beta f = \beta e_0 - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\log \mathfrak{A}(x)}{\cosh x} dx. \tag{5.45}$$

In den obigen Abschnitten wurde gezeigt, daß in führender Ordnung in β

$$\log \mathfrak{a}(x) = -\beta\varepsilon(x) \tag{5.46}$$

gilt. Man kann jetzt den Ausdruck für den Eigenwert in der gleichen Weise wie die Integralgleichungen in $\mathcal{O}(\beta)$ und $\mathcal{O}(1/\beta)$-Terme aufteilen

$$\begin{aligned}
\beta f &= \beta e_0 - \frac{1}{2\pi} \int_{-K}^{K} \frac{\log(1 + \mathfrak{a}(x))}{\cosh x} dx + \mathcal{O}(1/\beta) \\
&= \beta e_0 - \frac{1}{2\pi} \int_{-K}^{K} \frac{\log(1 + e^{-\beta\varepsilon(x)})}{\cosh x} dx + \mathcal{O}(1/\beta) \\
&\approx \beta e_0 + \frac{\beta}{2\pi} \int_{-K}^{K} \frac{\varepsilon(x)}{\cosh x} dx + \mathcal{O}(1/\beta).
\end{aligned} \tag{5.47}$$

Es wurde wieder das Crossover-Verhalten von $\mathfrak{a}$ in (5.7) ausgenutzt. Führt man in der letzten Gleichung den Limes $\beta \to \infty$ aus, so muß man im Vergleich mit (5.44) die "nackte" Dichte als

$$\varrho_0(x) = \frac{1}{2\pi \cosh x} \tag{5.48}$$

identifizieren. Man kann also die Integralgleichung für die "dressed energy" bei der Berechnung des zur Anregung gehörigen Eigenwertes verwenden. Die Anregungen ohne Spin sollen zuerst behandelt werden.
Die Integralgleichung mit $\mathcal{O}(1/\beta)$-Korrektur lautet

$$\begin{aligned} \log \mathfrak{a}(x) + 2\pi i d &= -\beta\varepsilon_0(x) + 2\pi i d + \int_{-K}^{K} k(x-y)\left[\log \mathfrak{a}(y) + 2\pi i d\right] dy \\ &+ \frac{1}{\beta\varepsilon'(K)}\left[k(x-K) + k(x+K)\right] \cdot \Omega. \end{aligned} \tag{5.49}$$

Man erhält also zusätzlich zur Lösung (5.30) einen Korrekturterm

$$\log \mathfrak{a}(x) + 2\pi i d = -\beta\varepsilon(x) + 2\pi i d\xi(x) + \frac{1}{\beta\varepsilon'(K)}\left[k(x-K) + k(x+K)\right] \cdot \Omega. \tag{5.50}$$

Die wichtigsten Beziehungen im "dressed"-Formalismus werden in Anhang E angegeben.

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \varrho_0(x) \log(1+\mathfrak{a}(x)) dx &= \int_{-K}^{K} \varrho_0(x)\left[\log \mathfrak{a}(x) + 2\pi i d\right] dx + \underbrace{\frac{2}{\beta\varepsilon'(K)}\varrho_0(K)}_{\text{linearisierte } \mathcal{O}(1/\beta)\text{-Anteile}} \\ &= \int_{-K}^{K} \varrho_0(x)\left[-\beta\varepsilon(x) + 2\pi i d\xi(x) + \frac{1}{\beta\varepsilon'(K)}\left[k(x-K) + k(x+K)\right] \cdot \Omega\right] dx \\ &+ \frac{2}{\beta\varepsilon'(K)}\varrho_0(K) \\ &= \int_{-K}^{K} \varrho(x)\left[-\beta\varepsilon_0(x) + 2\pi i d + \frac{1}{\beta\varepsilon'(K)}\underbrace{\left[k(x-K) + k(x+K)\right]}_{2[\varrho(K)-\varrho_0(K)]} \cdot \Omega\right] dx \\ &+ \frac{2}{\beta\varepsilon'(K)}\varrho_0(K) \\ &= -\beta\int_{-K}^{K} \varrho(x)\varepsilon_0(x) dx + 2\pi i d\int_{-K}^{K} \varrho(x) dx + \frac{2\Omega}{\beta}\frac{\varrho(K)}{\varepsilon'(K)} \\ &= -\beta\int_{-K}^{K} \varrho(x)\varepsilon_0(x) dx + 2\pi i d\int_{-K}^{K} \varrho(x) dx + \frac{2\Omega}{v\beta}. \end{aligned} \tag{5.51}$$

v ist die Fermi-Geschwindigkeit (siehe Anhang E). Dann ergibt sich als Ausdruck für den zu der Anregung gehörigen Eigenwert im Tieftemperaturbereich

$$\Lambda = -e_0 - \int_{-K}^{K} \varrho(x)\varepsilon_0(x)dx + \frac{1}{v\beta} \cdot \left\{ \frac{\pi^2}{3} - 4\pi^2 d^2 \xi(K)^2 \right\} \tag{5.52}$$

unter Vernachlässigung des oszillatorischen (komplexen) Terms. Man kann natürlich die Linearisierung im Tieftemperaturbereich auch für den größten Eigenwert $\Lambda_{\max}$ vornehmen und erhält

$$\Lambda_{\max} = -e_0 - \int_{-K}^{K} \varrho(x)\varepsilon_0(x)dx + \frac{1}{v\beta} \cdot \left\{ \frac{\pi^2}{3} \right\}. \tag{5.53}$$

Mit dem Ausdruck für die Korrelationslänge (5.27) gelangt man zu

$$\xi_{\mathrm{l}} = \frac{v}{T} \cdot \frac{1}{4\pi^2 d^2 \xi(K)^2}. \tag{5.54}$$

Für die transversalen Anregungen "mit Spin" verläuft die Berechnung völlig analog. Also ergibt sich

$$\xi_{\mathrm{t}} = \frac{v}{T} \cdot \frac{\xi(K)^2}{4\pi^2 s^2} \tag{5.55}$$

für die transversale Korrelationslänge. Die "dressed charge" $\xi(K)$ hängt also mit der Korrelationslänge auf die oben angegebene Weise zusammen.

5.4. Ausblick

Es stellt sich natürlich die Frage, wie das Verfahren auf mehrkomponentige Systeme wie das tJ-Modell zu verallgemeinern ist. Als Ausblick sollen einige Lösungsansätze aufgezeigt werden.
Die Integralgleichung im Tieftemperaturlimes nehmen in führender Ordnung $\mathcal{O}(\beta)$ die Form

$$\begin{aligned} \log \mathfrak{b}(x) &= -\beta\varepsilon_{\mathfrak{b}}^0(x) - \frac{1}{2\pi} \int_{|y|>K_c} T_{sc}(x-y) \log \mathfrak{c}(y)dy \\ \log \mathfrak{c}(x) &= -\beta\varepsilon_{\mathfrak{c}}^0(x) - \frac{1}{2\pi} \int_{|y|>K_b} T_{sc}(x-y) \log \mathfrak{b}(y)dy \\ &\quad - \frac{1}{2\pi} \int_{|y|>K_c} T_{cc}(x-y) \log \mathfrak{c}(y)dy \end{aligned} \tag{5.56}$$

an [5]. Die Symbole $\delta_\mathfrak{c}^0$ und $\delta_\mathfrak{b}^0$ stehen für $\mathcal{O}(1)$-Terme, die wie beim Heisenberg-Modell durch die Deformation der Integrationswege zustande kommen. Es ist sinnvoll diese Gleichungen formal auszudrücken

$$\begin{pmatrix} \log \mathfrak{b} \\ \log \mathfrak{c} \end{pmatrix} = -\beta \begin{pmatrix} \varepsilon_\mathfrak{b}^0 \\ \varepsilon_\mathfrak{c}^0 \end{pmatrix} + \underline{\underline{K}} * \begin{pmatrix} \log \mathfrak{b} \\ \log \mathfrak{c} \end{pmatrix} \tag{5.57}$$

mit

$$\underline{\underline{K}} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2\pi} \int\limits_{|y|>K_c} T_{sc}(x-y)\,[\cdot]\,(y)dy \\ -\frac{1}{2\pi} \int\limits_{|y|>K_b} T_{sc}(x-y)\,[\cdot]\,(y)dy & -\frac{1}{2\pi} \int\limits_{|y|>K_c} T_{cc}(x-y)\,[\cdot]\,(y)dy \end{pmatrix}. \tag{5.58}$$

Mithilfe von $*$ wird der Funktionsvektor $(\log \mathfrak{b}, \log \mathfrak{c})$ durch Matrixmultiplikation an die Stellen $[\cdot]$ in die Integrale eingefügt. Führt man die Deformation der Integrationswege aus, gewinnt man die Zusatzterme $\delta_\mathfrak{c}^0$ und $\delta_\mathfrak{b}^0$ der Ordnung $\mathcal{O}(1)$

$$\begin{pmatrix} \log \mathfrak{b} \\ \log \mathfrak{c} \end{pmatrix} = -\beta \begin{pmatrix} \varepsilon_\mathfrak{b}^0 \\ \varepsilon_\mathfrak{c}^0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta_\mathfrak{b}^0 \\ \delta_\mathfrak{c}^0 \end{pmatrix} + \underline{\underline{K}} * \begin{pmatrix} \log \mathfrak{b} \\ \log \mathfrak{c} \end{pmatrix}. \tag{5.59}$$

Die Lösung dieser Gleichung ist

$$\begin{pmatrix} \log \mathfrak{b} \\ \log \mathfrak{c} \end{pmatrix} = -\beta \begin{pmatrix} \varepsilon_\mathfrak{b} \\ \varepsilon_\mathfrak{c} \end{pmatrix} + \underline{\underline{\xi}} * \begin{pmatrix} \delta_\mathfrak{b}^0 \\ \delta_\mathfrak{c}^0 \end{pmatrix} \tag{5.60}$$

mit den verallgemeinerten Gleichungen für die "dressed charge" ξ und die "dressed energy" ε

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \varepsilon_\mathfrak{b} \\ \varepsilon_\mathfrak{c} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \varepsilon_\mathfrak{b}^0 \\ \varepsilon_\mathfrak{c}^0 \end{pmatrix} + \underline{\underline{K}} * \begin{pmatrix} \varepsilon_\mathfrak{b} \\ \varepsilon_\mathfrak{c} \end{pmatrix} \\ \underline{\underline{\xi}} &= \mathrm{id}_2 + \underline{\underline{K}} * \underline{\underline{\xi}}. \end{aligned} \tag{5.61}$$

Die "dressed charge" hat also jetzt Matrix-Gestalt[5]. Diese Definitionen stimmen mit dem in [29] benutzten Formalismus überein. Es besteht also die Möglichkeit die für das Heisenbergmodell benutzte Methode auf Integralgleichungen mehrkomponentiger Systeme, wie zum Beispiel das tJ-Modell und das Hubbard-Modell anzuwenden.

[5] id_2 ist die 2×2 Einheitsmatrix.

6. Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Thermodynamik korrelierter Systeme behandelt. Mithilfe von Standard-Methoden, die auf die üblichen integrablen Systeme in der Vergangenheit angewendet wurden, ist die zuverlässige Untersuchung der Thermodynamik nur für relativ tiefe Temperaturen möglich. Auch die Ermittlung von Korrelationslängen der Systeme ist ein schwieriges Unterfangen.
Hier wurde die Transfermatrix-Methode für Gittersysteme erfolgreich angewendet, um zu einer Beschreibung der Thermodynamik bei *beliebigen* Temperaturen und zu einer Berechnung von Korrelationslängen bei tiefen Temperaturen zu gelangen.
Im ersten Teil der Arbeit wurde die Thermodynamik des tJ-Modells behandelt. Die durchgeführte erste exakte Berechnung der magnetischen Suszeptibiltät bei endlichen Temperaturen des supersymmetrischen tJ-Modells führte zu einer gelungenen Komplettierung der Analyse der Thermodynamik des Modells. Es wurde gezeigt, daß die Separation von Spin und Ladung, eine wesentliche Eigenschaft der Luttinger-Flüssigkeit des tJ-Modells, einen guten Erklärungsansatz für die Thermodynamik dieses Systems darstellt. Man muß jedoch beachten, daß bei höheren Temperaturen auch Ein-Teilchen-Anregungen eine Rolle spielen, die durch die Tieftemperaturansätze nicht erklärt werden.
Im zweiten Teil der Arbeit wurden Korrelationslängen im Spin-$\frac{1}{2}$-Heisenberg-Modell im Bereich tiefer Temperaturen analytisch berechnet. Man muß betonen, daß dieser Zugang direkt aus den nicht-linearen Integralgleichungen resultiert, und daher ein neues Verfahren zur Bestimmung von Korrelationslängen zumindest bei tiefen Temperaturen darstellt. Da die Beschreibung von integrablen Systemen über nicht-lineare Integralgleichungen auch für mehrkomponentige Systeme wie eben das tJ-Modell durchgeführt werden kann, läßt sich die Methode zur Gewinnung der Korrelationslängen auch auf solche Modelle anwenden. Die Stärke des in dieser Arbeit vorgestellten Verfahrens liegt in der Analyse der Systeme bei *endlichen* Temperaturen. Demzufolge stellen die im zweiten Teil durchgeführten Berechnungen einen ersten Schritt zur Entwicklung von Verfahren zur Bestimmung von Korrelationslängen bei *beliebiger* Temperatur dar. In der Zukunft ist es interessant, eine Systematisierung der Methode der nicht-linearen Integralgleichungen anzustreben, so daß jede integrable Quantenkette bei beliebiger Temperatur in Hinblick auf ihre Thermodynamik und auf Korrelationslängen untersucht werden kann. Konkret bedeutet das die Berechnung von Korrelationslängen im tJ- und im Hubbard-Modell durch die hier vorgestellte Linearisierungs-Methode bei tiefen Temperaturen und – wenn möglich

– die Verallgemeinerung dieser Methode auf beliebige Temperaturen.

A. Herleitung der Integralgleichungen

Die Angabe des Herleitungsweges stützt sich auf [5]. Zur expliziten Ableitungen der Intgralgleichungen geht man von den in Abschnitt 3.5 eingführten Hilfsfunktionen aus

$$\begin{array}{rclrclcl} \mathfrak{a} & := & \frac{\lambda_0}{\lambda_+} & \mathfrak{A} & := 1+\mathfrak{a} & = & \frac{\lambda_+ + \lambda_0}{\lambda_+} \\ \mathfrak{b} & := & \frac{\lambda_-}{\lambda_+ + \lambda_0} & \mathfrak{B} & := 1+\mathfrak{b} & = & \frac{\lambda_- + \lambda_+ + \lambda_0}{\lambda_+ + \lambda_0} \\ \mathfrak{c} & := & \frac{\lambda_- \lambda_+}{\lambda_0(\lambda_+ + \lambda_- + \lambda_0)} & \mathfrak{C} & := 1+\mathfrak{c} & = & \frac{(\lambda_- + \lambda_0)(\lambda_+ + \lambda_0)}{\lambda_0(\lambda_+ + \lambda_- + \lambda_0)}. \end{array} \tag{A.1}$$

Die entsprechenden Ausdrücke für $\overline{\mathfrak{a}}, \overline{\mathfrak{b}}, \overline{\mathfrak{A}}, \overline{\mathfrak{B}}$ ergeben sich, in dem man λ_+ gegen λ_- austauscht. Aufgrund der expliziten Form des Eigenwerts (3.42) in Abschnitt 3.5 werden weitere Funktionen eingeführt

$$\Phi_\pm(v) := (v_i \pm iu)^{\frac{M}{2}} \quad q_- = \prod_i (v - w_i) \quad q_+ = \prod_i (v - v_i). \tag{A.2}$$

Dann ergibt der Vergleich mit diesem expliziten Ausdruck für $\Lambda = \lambda_+ + \lambda_- + \lambda_0$

$$\begin{aligned} \lambda_- &= q_-(v+i)\Phi_+(v)\Phi_-(v-i) \\ \lambda_+ &= \frac{q_+(v-i)}{q_+(v)}\Phi_-(v)\Phi_+(v+i) \\ \lambda_0 &= \frac{q_-(v+i)}{q_-(v)}\frac{q_+(v-i)}{q_+(v)}\Phi_+(v)\Phi_-(v). \end{aligned} \tag{A.3}$$

Aufgrund dieser Beziehungen und Definitionen ergibt sich für den Zusammenhang zwischen den Hilfsfunktionen und den λ-Anteilen des Eigenwertes

$$\begin{aligned} \lambda_- + \lambda_0 &= \lambda_0 \mathfrak{C}\mathfrak{B} = \frac{\lambda_+}{\overline{\mathfrak{b}}} \\ \lambda_+ + \lambda_0 &= \lambda_0 \mathfrak{C}\overline{\mathfrak{B}} = \frac{\lambda_+}{\mathfrak{b}} \\ (\lambda_- + \lambda_0)(\lambda_+ + \lambda_0) &= \lambda_-\lambda_+\mathfrak{C}/\mathfrak{c}. \end{aligned} \tag{A.4}$$

Im nächsten Schritt definiert man eine Hilfsfunktion $\mathfrak{D}$, die in der oberen komplexen Halbebene $\mathbb{C}^+$ einschließlich der reellen Achse analytisch und nullstellenfrei ist

$$\begin{aligned} \mathfrak{D} &:= \frac{1}{q_+(v)}(q_-(v)\Phi_+(v+i) + q_-(v+i)\Phi_+(v) \\ &= (\lambda_+(v)\lambda_0(v))\frac{q_-(v)}{q_+(v-i)\Phi_-(v)} = \frac{q_-(v)}{q_+}\Phi_+(v+i)\mathfrak{A}(v). \end{aligned} \tag{A.5}$$

Da $\mathfrak{A} = 1 + \mathfrak{a}$ mit der in Anhang C eingführten Funktion $\mathfrak{a}$ ist, also als Nullstellen die Bethe-Ansatz-Zahlen $\{v_k\}$ besitzt, heben sich diese genau mit den Nullstellen von $q_+(v)$ auf. Da die Löcher nach Anhang C in der unteren komplexen Halbebene C^- liegen, ist $\mathfrak{D}$ nullstellenfrei. Zur Analytizität reicht die Bemerkung, daß alle Nenner-Nullstellen aus $\mathbb{C}^-$ sind. Zur weiteren Bearbeitung ist es notwendig, den Ausdruck (A.5) umzuformulieren

$$\begin{aligned} \mathfrak{D} &= \frac{q_-(v+i)}{q_+(v)} \Phi_+(v) \mathfrak{C}(v) \overline{\mathfrak{B}}(v) && \text{(A.6)} \\ &= \frac{q_-(v+i)}{q_+(v-i)} \Phi_-(v-i) \frac{\Phi_+(v)}{\Phi_-(v)} \frac{1}{\mathfrak{b}(v)}. && \text{(A.7)} \end{aligned}$$

Damit folgt dann

$$\mathfrak{D}\overline{\mathfrak{D}} = \Phi_-(v-i)\Phi_+(v+i)\mathfrak{C}/\mathfrak{c}. \tag{A.8}$$

Für das weitere ist es wesentlich, daß man ein geschlossenes Gleichungssystem für die Hilfsfunktionen $\mathfrak{b}, \overline{\mathfrak{b}}$ und $\mathfrak{b}$ im Fourier-Raum finden kann und führt daher die Fourier-Transformierte der logarithmischen Ableitung einer Funktion $f(v)$ durch

$$\hat{f}^{(\pm)} = \int_{\mathfrak{L}^\pm} \frac{dv}{2\pi} \left[\log f(v)\right]' e^{-ikv} \tag{A.9}$$

ein. Der Integrationsweg $\mathfrak{L}^\pm$ ist eine Gerade, die parallel und in der Nähe der reellen Achse in der oberen (unteren) komplexen Halbebene verläuft. Sie wird durch $v = x \pm i\gamma$ mit $v \in \mathfrak{L}^\pm$ und $x \in R$ parametrisiert, wobei $\gamma < |u|$ ist. Man wendet diese Fourier-Transformation auf $\mathfrak{D}$ an und beachtet, daß die Transformierten von analytischen Funktionen nach dem Cauchy-Integralsatz Null sind.

$$\begin{aligned} \hat{\mathfrak{D}}^-_{k>0} &= e^{-k}\hat{q}_- + \hat{\mathfrak{C}} + \overline{\hat{\mathfrak{B}}}; & \hat{\mathfrak{D}}^-_{k<0} &= \hat{\Phi}_+ + \hat{\mathfrak{C}} + \overline{\hat{\mathfrak{B}}} = 0 \\ \hat{\mathfrak{D}}^+_{k>0} &= e^{-k}\hat{q}_- + \hat{\Phi}_+ - \hat{\Phi}_- - \hat{\mathfrak{b}}; & \hat{\mathfrak{D}}^+_{k<0} &= e^{k}\hat{\Phi}_- + \hat{\mathfrak{C}} + \overline{\hat{\mathfrak{B}}} = 0 \end{aligned} \tag{A.10}$$

Vollig analog erhält man ähnliche Beziehungen für $\overline{\mathfrak{D}}$

$$\begin{aligned} \overline{\hat{\mathfrak{D}}}^-_{k>0} &= e^{-k}\hat{\Phi}_+ - e^{-k}\hat{q}_- - \overline{\hat{\mathfrak{b}}}; & \overline{\hat{\mathfrak{D}}}^-_{k<0} &= e^{k}\hat{q}_+ + \hat{\Phi}_- - \hat{\Phi}_+ - \overline{\hat{\mathfrak{b}}} = 0 \\ \hat{\mathfrak{D}}^+_{k>0} &= \hat{\Phi}_- - \hat{q}_- + \hat{\mathfrak{C}} + \hat{\mathfrak{B}} = 0; & \hat{\mathfrak{D}}^+_{k<0} &= e^{k}\hat{q}_+ + \hat{\mathfrak{C}} + \hat{\mathfrak{B}}. \end{aligned} \tag{A.11}$$

Aufgrund von (A.8) ergibt sich dann für das Produkt der beiden $\mathfrak{D}$-Funktionen

$$\begin{aligned} \hat{\mathfrak{D}}^-_{k>0} + \overline{\hat{\mathfrak{D}}}^-_{k>0} &= e^{-k}\hat{\Phi}_+ - e^{-k}\hat{q}_- - \overline{\hat{\mathfrak{b}}}, \\ \overline{\hat{\mathfrak{D}}}^-_{k<0} + \overline{\hat{\mathfrak{D}}}^-_{k<0} &= e^{k}\hat{q}_+ + \hat{\Phi}_- - \hat{\Phi}_+ - \overline{\hat{\mathfrak{b}}} = 0 \end{aligned} \tag{A.12}$$

Für den Fall $k > 0$ ergibt die Auswertung dieser Gleichungen in Bezug auf $\overline{\hat{\mathfrak{D}}}^-$

$$e^{-k}\hat{q}_- + \overline{\hat{\mathfrak{B}}} = e^{-k}\hat{\Phi}_+ - \hat{\mathfrak{c}}; \qquad \hat{\mathfrak{c}} = \overline{\hat{\mathfrak{b}}} - \overline{\hat{\mathfrak{B}}}. \tag{A.13}$$

in dem man einfach die Ausdrücke aus (A.10),(A.11) und (A.12) für $\mathfrak{D}^-$ einsetzt. Für $\mathfrak{D}^+$ erhält man analog

$$
\begin{aligned}
\hat{\overline{\mathfrak{b}}} &= e^{-k}(\hat{\Phi}_+ - \hat{\Phi}_-) - e^{-k}(\hat{\mathfrak{B}} + \hat{\mathfrak{C}}), \\
\hat{\mathfrak{c}} &= e^{-k}(\hat{\Phi}_+ - \hat{\Phi}_-) - e^{-k}(\hat{\mathfrak{B}} + \hat{\mathfrak{C}}) - \hat{\overline{\mathfrak{B}}}.
\end{aligned}
\tag{A.14}
$$

Bei Ausnutzung aller Beziehung dieser Art ergibt sich ein *vollständiges* Gleichungssystem für die Hilfsfunktionen $\hat{\mathfrak{b}}, \hat{\overline{\mathfrak{b}}}$ und $\hat{\mathfrak{c}}$

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathfrak{b}} &= \begin{cases} (\hat{\Phi}_+ - \hat{\Phi}_-) - \hat{\overline{\mathfrak{B}}} + \hat{\mathfrak{C}}) & : k > 0 \\ e^k(\hat{\Phi}_- - \hat{\Phi}_+) - e^k(\hat{\overline{\mathfrak{B}}} + \hat{\mathfrak{C}}) & : k < 0 \end{cases} \\
\hat{\overline{\mathfrak{b}}} &= \begin{cases} e^{-k}(\hat{\Phi}_+ - \hat{\Phi}_-) - e^{-k}(\hat{\mathfrak{B}} + \hat{\mathfrak{C}}) & : k > 0 \\ (\hat{\Phi}_- - \hat{\Phi}_+) - (\hat{\mathfrak{B}} + \hat{\mathfrak{C}}) & : k < 0 \end{cases} \\
\hat{\overline{\mathfrak{c}}} &= \begin{cases} e^{-k}(\hat{\Phi}_+ - \hat{\Phi}_-) - e^{-k}(\hat{\mathfrak{B}} + \hat{\mathfrak{C}}) - \hat{\overline{\mathfrak{B}}} & : k > 0 \\ e^k(\hat{\Phi}_- - \hat{\Phi}_+) - e^k(\hat{\overline{\mathfrak{B}}} + \hat{\mathfrak{C}}) - \hat{\mathfrak{B}} & : k < 0 \end{cases}
\end{aligned}
\tag{A.15}
$$

Die Fouriertransformierte von $(\hat{\Phi}_+ - \hat{\Phi}_-)$ lautet iN sign(k)sinh(ku). Die Rücktransformation in den Spektralparameterraum führt dann auf die gesuchten nicht-linearen Integralgleichungen

$$
\begin{aligned}
\log \mathfrak{b} &= \Phi_{\mathfrak{b}}^{(M)} + \beta(\mu + h/2) - \Psi_{\mathfrak{b}} * \log \overline{\mathfrak{B}} - \Psi_{\mathfrak{b}} * \log \mathfrak{C} \\
\log \overline{\mathfrak{b}} &= \Phi_{\overline{\mathfrak{b}}}^{(M)} + \beta(\mu - h/2) - \Psi_{\overline{\mathfrak{b}}} * \log \mathfrak{B} - \Psi_{\overline{\mathfrak{b}}} * \log \mathfrak{C} \\
\log \mathfrak{c} &= \Phi_{\mathfrak{c}}^{(M)} + 2\beta\mu - \Psi_{\mathfrak{b}} * \log \overline{\mathfrak{B}} - \Psi_{\overline{\mathfrak{b}}} * \log \mathfrak{B} - \Psi_{\mathfrak{c}} * \log \mathfrak{C}
\end{aligned}
\tag{A.16}
$$

mit

$$
\begin{aligned}
\Phi_{\mathfrak{b}}^{(M)} &= iM\left(\arctan\tfrac{v-i}{u} - \arctan\tfrac{v}{u}\right), & \Psi_{\mathfrak{b}} &= \tfrac{1}{2\pi v(v-i)} \\
\Phi_{\overline{\mathfrak{b}}}^{(M)} &= -iM\left(\arctan\tfrac{v+i}{u} - \arctan\tfrac{v}{u}\right), & \Psi_{\overline{\mathfrak{b}}} &= \tfrac{1}{2\pi v(v+i)} \\
\Phi_{\mathfrak{c}}^{(N)} &= iM\left(\arctan\tfrac{v-i}{u} - \arctan\tfrac{v+i}{u}\right), & \Psi_{\mathfrak{c}} &= \tfrac{2}{2\pi(v^2+1)}
\end{aligned}
\tag{A.17}
$$

Die Integrationskonstanten $\beta(\mu + h), \ldots$ in den Intgralgleichungen (A.16) folgen aus dem Limes $v \to \infty$ für den Spektralparameter v. Dazu betrachtet man diesen Grenzwert explizit für die in (A.1) durch die λ-Anteile des Eigenwerts definierten Hilfsfunktionen $\mathfrak{b}, \overline{\mathfrak{b}}$ und $\mathfrak{c}$ und es folgt

$$
\mathfrak{b} \to \frac{e^{\beta(\mu+h/2)}}{e^{\beta(\mu+h/2)} + 1}, \overline{\mathfrak{b}} \to \frac{e^{\beta(\mu-h/2)}}{e^{\beta(\mu-h/2)} + 1}, \mathfrak{c} \to \frac{e^{2\beta\mu}}{e^{\beta(\mu+h/2)} + e^{\beta(\mu-h/2)} + 1}. \tag{A.18}
$$

Ein entscheidender Vorteil des Zugangs zur Thermodynamik über die nicht-lineraren Integralgleichungen wir hier offenbar, da der Trotter-Limes $M \to \infty$ jetzt sehr einfach mit

$$
\Phi_{\mathfrak{b},\overline{\mathfrak{b}}}^{(M\to\infty)} = -2\pi\beta\Psi_{\mathfrak{b},\overline{\mathfrak{b}}} \quad \text{und} \quad \Phi_{\mathfrak{c}}^{(M\to\infty)} = -2\pi\beta\Psi_{\mathfrak{c}} \tag{A.19}
$$

durchführbar ist. Der Integrationsweg für $\Psi_{\mathfrak{c}} * \log \mathfrak{C}$ ist auf die reelle Achse verschiebbar, da sich dort keine Singularitäten von $\mathfrak{c}$ befinden. Dementsprechend verschieben sich die Integrationspfade für $\mathfrak{b}$ und $\overline{\mathfrak{b}}$ auf die in Formel (3.44) angegebenen Linien.

B. Berechnung der $\mathcal{O}(\beta)$-Anteile im Tieftemperaturbereich

B.0.1. Spinlose Anregungen

Man sucht eine Lösung der Integralgleichung

$$\log \mathfrak{a}(x) = -\beta\varepsilon_0(x) + \int_{-K}^{0} k(x-y)\log(1+\mathfrak{a}(y))dy + \int_{0}^{K} \log(1+\mathfrak{a}(y))dy \tag{B.1}$$

Die Integrationswege stehen hier stellvertretend für eine d-fache Umrundung der Singularitäten. Da der Logarithmus nicht eindeutig in der gesamten komplexen Ebene ist, liefert die mathematisch positive Umrundung im ersten Integral einen Phasenfaktor von $+2\pi id$ und beim zweiten Integral $-2\pi id$. Kehrt man jedoch im zweiten Integral den Integrationsweg um, so werden auch dort die Singularitäten positiv umlaufen und man erhält auch hier $\log\mathfrak{a} + 2\pi id$. So können die beiden Terme wie folgt zusammengefaßt werden

$$\log \mathfrak{a}(x) = -\beta\varepsilon_0(x) + \int_{-K}^{K} \{k(x-y)\log\mathfrak{a}(y) + 2\pi id\}\, dy. \tag{B.2}$$

Da man sich hier für den führenden Beitrag interessiert, ist $\log(1+\mathfrak{a})$ durch $\log\mathfrak{a}$ zu ersetzen. Addition von $2\pi id$ auf beiden Seiten und Vergleich mit den Integralgleichungen aus Anhang E für die "gedresste" Ladung und Energie liefert unmittelbar das Ergebnis

$$\log \mathfrak{a}(x) + 2\pi id = -\beta\varepsilon(x) + 2\pi id\xi(x). \tag{B.3}$$

B.1. Anregungen mit Spin

Für den Bulk-Anteil ist die Integralgleichung (5.41) zu lösen

$$\frac{\log \mathfrak{a}(x)}{2\pi i s} = -\beta\varepsilon_0(x) + \left[\int_K^\infty k(x-y)dy - \int_{-\infty}^{-K} k(x-y)dy\right] + \int_{-K}^{K} k(x-y)\left(\frac{\log \mathfrak{a}(y)}{2\pi i s}\right) dy. \quad \text{(B.4)}$$

Da man an einem Ausdruck für $\log \mathfrak{a}(K)$ interessiert ist, und $\varepsilon(K) = 0$ gilt, betrachtet man die Hilfsintegralgleichung

$$f(x) = \left[\int_K^\infty k(x-y)dy - \int_{-\infty}^{-K} k(x-y)dy\right] + \int_{-K}^{K} k(x-y)f(y)dy. \quad \text{(B.5)}$$

Man man kann unter der Bedingung, daß $k(x)$ eine gerade Funktion ist leicht zeigen daß $f(x)$ ungerade ist. Ableitung der Hilfsintegralgleichung (B.5) ergibt

$$f'(x) = [k(x-K) + k(x+K)]\,(1 - f(K)) + \int_{-K}^{K} k(x-y)f'(y)dy. \quad \text{(B.6)}$$

Da f eine ungerade Funktion ist gilt $f(K) - f(-K) = 2f(K)$. Es sei weiter bemerkt, daß man f' durch seine "nackte" Funktion ersetzt. Die Herleitung soll hier explizit angegeben werden

$$2f(K) = \int_{-K}^{K} f'(x)dx = \int_{-K}^{K} f'(x)\cdot 1dx = \int_{-K}^{K} f'(x)\xi_0(x)dx = \int_{-K}^{K} f_0'(x)\xi(x)dx. \quad \text{(B.7)}$$

Wendet man den in Anhang E angegebenen Formalismus auf f' an, so ist f_0' völlig analog zur Definition der "dressed charge" und "dressed energy" als

$$f'(x) = f_0'(x) + \int_{-K}^{K} k(x-y)f'(y)dy \quad \text{(B.8)}$$

definiert und Vergleich mit (B.6) liefert

$$f_0'(x) = [k(x-K) + k(x+K)]\,(1 - f(K)). \quad \text{(B.9)}$$

Man erhält

$$\begin{aligned} 2f(K) &= (1-f(K))\cdot \underbrace{\int_{-K}^{K} [k(x-K)+k(x+K)]\,\xi(x)}_{\xi(K)-1+\xi(-K)-1=2\xi(K)-2} \\ &= 2\cdot[1-f(K)]\,(\xi(K)-1) \\ &\Longrightarrow\ f(K) = 1-\frac{1}{\xi(K)} \end{aligned} \tag{B.10}$$

Wertet man die Integralgleichung (B.5) mit dem Ansatz $\log\mathfrak{a}(x) = -\beta\varepsilon(x) + 2\pi i s f(x)$ aus, erfüllt sich die Integralgleichung (B.4) in jedem Summanden genau mit der Definition der “dressed energy” und der Integralgleichung für f. An der Stelle $x = K$ ausgwertet führt dies unter Berücksichtigung von $\varepsilon(K) = 0$ auf

$$\log\mathfrak{a}(K) = -\beta\varepsilon(K) + 2\pi i s f(K) = 2\pi i s(1-\frac{1}{\xi(K)}). \tag{B.11}$$

C. Eigenschaften der Bethe-Ansatz-Zahlen beim tJ-Modell

Zur Analyse der Verteilung der Bethe-Ansatz-Zahlen führt man die folgende Hilfsfunktion ein

$$\mathfrak{a}(v) = \left(\frac{v+iu+i}{v+iu}\right)^{N/2} \prod_{j=1}^{N/2} \frac{v-\overline{v}_j}{v-\overline{v}_j+i} e^{\beta\mu}. \tag{C.1}$$

Betrachtet man die Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.42) für verschwindendes äußeres magnetisches Feld h, so sind die beiden Sätze von Bethe-Ansatz-Zahlen $\{w_j\}$ und $\{v_k\}$ komplex konjugiert zueindander, d.h es gilt

$$w_j = \overline{v}_j, \quad j = 1, \dots, N/2. \tag{C.2}$$

Dementsprechend reduzieren sich die beiden Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.42) auf eine Gleichung, die in ihrer expliziten Gestalt

$$\left(\frac{v+iu+i}{v+iu}\right)^{N/2} = -\prod_{j=1}^{N/2} \frac{v-\overline{v}_j+i}{v-\overline{v}_j} e^{-\beta\mu}. \tag{C.3}$$

lautet. Es folgt unmittelbar, daß Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen v_k die Eigenschaft

$$\mathfrak{a}(v_k) = -1 \tag{C.4}$$

haben. Es gibt noch weitere Lösungen von (C.4), die aber nicht die Bethe-Ansatz-Gleichungen erfüllen, die sogenannten Löcher. Sie sind ebenfalls in der Abbildung C.1 zu sehen. Für den Trotter-Limes $M \to \infty$ sammeln sich Wurzeln und Löcher mit nicht-verschwindendem Imaginärteil am Ursprung. Dies erschwert den traditionellen Zugang über Dichte-Funktionen der Bethe-Ansatz-Wurzeln. Diese Funktionen werden über $\frac{1}{L(v_{i+1}-v_i)}$ definiert. Bei obigem Verhalten der Wurzeln führt dies auf eine singuläre Dichtefunktion am Ursprung. (Für weitere Informationen über diesen traditionellen Zugang sei auf [10] verwiesen.) Auch im Trotter-Limes $N \to \infty$ sind die

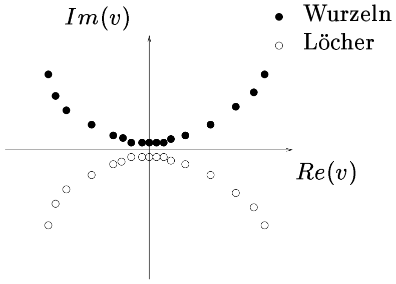

Abbildung C.1.: Verhalten von Bethe-Ansatz-Wurzeln und Löchern

Bethe-Ansatz-Wurzeln nur in einem beschränkten Bereich der komplexen Ebene verteilt. Daher zeigen die auf denen in (3.44) gewählten Integrationswegen definierten Hilfsfunktionen keine Singularitäten. Jedes durch nicht-lineare Integralgleichungen der hier behandelten Art beschreibbares System muß für die Bethe-Ansatz-Zahlen diese Eigenschaft aufweisen.

D. Berechnung dilogarithmischer Integrale

Zur Erläuterung der Berechnug dilogarithmischer Integrale bei Umrundung ihrer Singularitäten soll exemplarisch das Integral

$$\int_{-\infty}^{\log \mathfrak{a}(K)} \log(1+e^z)dz \tag{D.1}$$

betrachtet werden. Die Substitution $z = \log a$ transformiert das Integral in

$$\int_{0}^{\mathfrak{a}(K)} \frac{\log(1+\mathfrak{a})}{\mathfrak{a}} d\mathfrak{a}. \tag{D.2}$$

Diese Form macht klar, daß der Integrationsweg durch den Verlauf von $\mathfrak{a}$ in der komplexen Ebene determiniert ist. Die d-fache Umrundung der Singularitäten von $\log(1+\mathfrak{a})$ entspricht jetzt einer d-fachen Umrundung der -1, siehe Abb. D.1. Beim

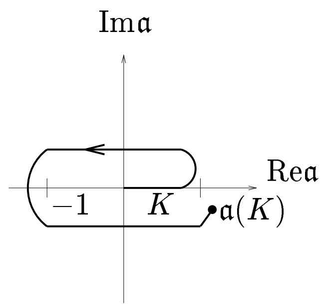

Abbildung D.1.: Verlauf der Hilfsfunktion $\mathfrak{a}$ beim Umrunden von Singularitäten

mathematisch positiven Umlauf gewinnt der Logarithmus die Phase $+2\pi i d$.[1] Es

[1]Man beachte, daß bei einem positven Umlauf aufgrund des Logarithmusschnittes auf der negativen reellen Achse die Phase von -1 $-i\pi$ beträgt, da der Restanteil nach Ausführen der Umrundungen im positiven Sinne integriert wird.

ergibt sich sukzessive für d Umläufe

$$\underbrace{\int_0^{\mathfrak{a}(K)} \frac{\log(1+\mathfrak{a})}{\mathfrak{a}} d\mathfrak{a}}_{d \text{ Umläufe und obiger Integrationsweg}} = \int_0^{-1} \frac{\log(1+\mathfrak{a})}{\mathfrak{a}} d\mathfrak{a} + \underbrace{\int_{-1}^{\mathfrak{a}(K)} \frac{\log(1+\mathfrak{a}) + 2\pi i}{\mathfrak{a}} d\mathfrak{a}}_{d-1 \text{ Umläufe + Rest}}$$

$$= \int_0^{-1} \frac{\log(1+\mathfrak{a})}{\mathfrak{a}} d\mathfrak{a} + \underbrace{\int_{-1}^{\mathfrak{a}(K)} \frac{\log(1+\mathfrak{a}) + 2\pi i}{\mathfrak{a}} d\mathfrak{a}}_{d-2 \text{ Umläufe + Rest}} + 2\pi i(\log \mathfrak{a}(K) + i\pi) = \ldots$$

$$= \int_0^{\mathfrak{a}(K)} \frac{\log(1+\mathfrak{a})}{\mathfrak{a}} d\mathfrak{a} - 4\pi^2 + \sum_{n=1}^{d-1} n + 2\pi i d(\log \mathfrak{a}(K) + \pi i)$$

$$= \int_0^{\mathfrak{a}(K)} \frac{\log(1+\mathfrak{a})}{\mathfrak{a}} d\mathfrak{a} - 2\pi^2 d^2 + 2\pi i d \log \mathfrak{a}(K). \tag{D.3}$$

Analog findet man fur den d-fachen Umlauf im mathematisch negativen Sinne

$$\underbrace{\int_0^{\mathfrak{a}(K)} \frac{\log(1+\mathfrak{a})}{\mathfrak{a}} d\mathfrak{a}}_{d \text{ Umläufe}} = \int_0^{\mathfrak{a}(K)} \frac{\log(1+\mathfrak{a})}{\mathfrak{a}} d\mathfrak{a} - 2\pi^2 d^2 - 2\pi i d \log \mathfrak{a}(K). \tag{D.4}$$

Abschließend soll noch die explizite Berechnung des in Abschnitt (5.2.3) benötigten reellen dilogarithmischen Integrals angegeben werden.

$$\int_{-\infty}^{0} \log(1+e^z) dz + \int_0^{\infty} \log(1+e^{-z}) dz = 2 \int_{-\infty}^{0} \log(1+e^z) dz$$

$$= 2 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{e^{zn}}{n} dz = 2 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_{-\infty}^{0} \frac{e^{zn}}{n} dz$$

$$= 2 \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{n^2}}_{=\frac{\pi^2}{12}} = \frac{\pi^2}{6} \tag{D.5}$$

E. Der "dresssed"-Formalismus

Ausgangspunkt sind die Standarddefinitionen für die "dressed energy" $\varepsilon(x)$,"dressed charge" $\xi(x)$ und die Dichte $\varrho(x)$

$$
\begin{aligned}
\varepsilon(x) = \varepsilon_0(x) + \int_{-K}^{K} k(x-y)\varepsilon(y)dy, \\
\xi(x) = 1 + \int_{-K}^{K} k(x-y)\xi(y)dy, \\
\varrho(x) = \varrho_0(x) + \int_{-K}^{K} k(x-y)\varrho(x)dx.
\end{aligned} \tag{E.1}
$$

mit einem im hier behandelten Fall symmetrischen Integrationskern $k(x) = k(-x)$. Vergleicht man diese Definitionen mit denen in Kapitel 5 fällt auf, daß der Faktor $1/2\pi$ vor den Integralen in die Integralkerne absorbiert worden ist, um bei den Rechnungen eine kompaktere Notation zu erreichen.
Es sollen hier nur alle benötigen Beziehungen angegeben werden. Die Beweise sind allesamt komplikationslos.

$$
\begin{aligned}
\int_{-K}^{K} \varrho_0(x)\varepsilon(x)dx &= \int_{-K}^{K} \varrho_(x)\varepsilon_0(x)dx \\
\int_{-K}^{K} \varrho_0(x)\cdot\xi(x)dx &= \int_{-K}^{K} \varrho_(x)dx \quad \text{mit} \quad \xi_0(x) = 1.
\end{aligned} \tag{E.2}
$$

Es gelten die Symmetriebeziehungen

$$
\begin{aligned}
\varepsilon(K) &= \varepsilon(-K) \\
\varrho(K) &= \varrho(-K) \\
\xi(K) &= \xi(-K).
\end{aligned} \tag{E.3}
$$

Damit folgt z.B.

$$\int_{-K}^{K} \varrho(x) \cdot [k(x-K) + k(x+K)]\, dx = 2 \cdot [\varrho(K) - \varrho_0(K)]\,. \tag{E.4}$$

Zum Schluß soll noch ein Ausdruck für die Fermi-Geschwindigkeit v im Heisenbergmodell hergeleitet werden. Sie ist definiert als

$$v = \left.\frac{\partial \varepsilon(x)}{\partial k(x)}\right|_{x=K} = \left.\left(\frac{\partial \varepsilon(x)}{\partial x}\right) \cdot \left(\frac{\partial k}{\partial x}\right)^{-1}\right|_{x=K} \tag{E.5}$$

Um die zweite partielle Ableitung in (E.5) zu berechnen muß man die genauere Definition der Dichte ϱ

$$\varrho(x) = p_0'(x) + \int_{-K}^{K} k(x-y)\varrho(y)dy \tag{E.6}$$

und des Impulses

$$p(x) = p_0(x) + \int_{-K}^{K} \theta(x-y)\varrho(y)dy \tag{E.7}$$

mit der Zweiteilchen-Streuphase θ (5.3)

$$\frac{\partial \theta(x-y)}{\partial x} = k(x-y) \tag{E.8}$$

beachten. Es folgt direkt

$$p'(x) = \varrho(x) \tag{E.9}$$

und damit das Endergebnis für die Fermi-Geschwindigkeit v

$$v = \frac{\varepsilon'(K)}{\varrho(K)}. \tag{E.10}$$

F. Auszug aus dem C^{++}-Programmlisting

Es wird ein Auszug aus dem Programm zur numerischen Lösung der Integralgleichungen präsentiert. Die Klasse Tds löst die Integralgleichungen per Iteration im Fourierraum. Alle unwichtigen Details wurden unterdrückt um einen Überblick der Struktur zu ermöglichen.

Tds::Tds() { Setzen der Standard-Werte:
N = 12;Trotter-Zahl
T = 1.25;Temperatur
H = 0.0; äußeres Magnetfeld
mu = 0.1; chemisches Potential
Inf8 = 1; bei 1 wird mit $N = \infty$ gerechnet, der Fall endlicher Trotter-Zahl wird hier im Programm-Auszug nicht betrachtet.
gamma_ b = 0.4;Verschiebung der Integrationswege für $\mathfrak{b}$ und $\mathfrak{c}$
inet = 2048; Anzahl der Stützstellen für die schnelle Fouriertransformation
xMax =60; Cut-off für die Integrale
SetDampingFactor = 1;Dämpfungsfaktor bei der Iteration wird gesetzt
MaxIteration = 200; maximale Anzahl der Iterationsschritte
MinIteration = 10; minimale Anzahl der Iterationsschritte
PrecisionGoal = 0.000001; Ist die Differenz zweier aufeinanderfolgender Iterierten kleiner als PrecisionGoal, so wird die Iteration abgebrochen.
DampingFactor = 0.29;
FixedDampingFactor = 0.29;}
Festlegung der Reihenfolge der partiellen Ableitungen der Integralgleichungen , (siehe Kapitel reskalierter Formalismus)
const int Tds::dAll = 8;
const int Tds::dB[ ] = {0,0,0,1,2,1,0,0}; Ableitung nach $\beta = 1/T$
const int Tds::dM[ ] = {0,1,2,0,0,1,0,0}; Ableitung nach μ
const int Tds::dH[ ] = {0,0,0,0,0,0,1,2}; Ableitung nach H
// Speicherbelegung auf 0 setzen:
Tds:: Tds() {deallocate();}
Tds::deallocate() {
Wird hier nicht explizit angegeben. Alle für die Iteration relevanten Variablen werden zu Anfang der Iteration auf Null gesetzt.**}**

include "twoTds.h" In diesem Teil werden alle Mitglieder der Klasse Tds definiert.
Hier werden alle für die Iteration benötigten Arrays eingelesen:
Tds::calcDependencies() {
b = 1.0/T; Definition von β
u = -b/N; Definition des Spektalparameters
include "asymp.h"Einlesen der in (A.18) angegebenen asymptotischen Werte für die Hilfsfunkionen und deren Ableitungen.
// Setzen der Arraylänge
x.setSize(inet);
K1.setSize(inet);
(Analog:K2,K3,K4,K5 und E1)
Einlesen der Integrationskerne:
int k;
for(k=0;k<inet;k++){
x[k]=2.0*xMax*k/inet-xMax; Spektralparameter als Array
K1[k]=K_b(x[k]+2.0*I*gamma_b);$\Psi_{\mathfrak{b}}(x+2i\gamma)$
Alle anderen Integrationskerne aus (3.44) werden analog definiert.
E1[k]=exp(I*Pi*k);
Berechnung der Fouriertransformierten für die Kerne:
K1=fourier(K1);
K2=fourier(K2);
K3=fourier(K3);
K4=fourier(K4);
K5=fourier(K5);
Die Startwerte für $\ell b \ldots$ sind null:
if(inet != (log_b[0][0][0]).getSize()) {
for(k=0; *k*¡dAll; k++) {
(log_b[dB[k]][dM[k]][dH[k]]).setSize(inet,complex(0));
(log_c[dB[k]][dM[k]][dH[k]]).setSize(inet,complex(0));
(log_bquer[dB[k]][dM[k]][dH[k]]).setSize(inet,complex(0));
}}
// Einlesen der Inhomogenitäten $\Psi_{\mathfrak{b}} \ldots$ der Integralgleichungen
for(k=0; k<dAll; k++) {
(phi_b[dB[k]][dM[k]][dH[k]]).setSize(inet);
(phi_c[dB[k]][dM[k]][dH[k]]).setSize(inet);
(phi_bquer[dB[k]][dM[k]][dH[k]]).setSize(inet);
for(int j=0; j¡inet; j++) {
(phi_b[dB[k]][dM[k]][dH[k]])[j]=funPhi_b(dB[k], dM[k],dH[k], x[j]+I*gamma_b);
(phi_c[dB[k]][dM[k]][dH[k]])[j]=funPhi_c(dB[k], dM[k],dH[k], x[j]);
(phi_bquer[dB[k]][dM[k]][dH[k]])[j]=funPhi_bquer(dB[k], dM[k],dH[k], x[j]-I*gamma_b);}}}
Tds::calcHigherDependencies(){ Festlegung der Array-Länge:

```
fb.setSize(inet); Fb.setSize(inet);
fc.setSize(inet); Fc.setSize(inet);
fbquer.setSize(inet); Fbquer.setSize(inet);
```

Es werden Hilfsfunktionen definiert, die Ausdrücken entsprechen, die bei den abgeleiteten Integralgleichungen im resklalierten Formalismus auftreten:

```
Complex lb,lc,lbquer;
for(int k=0; k¡inet; k++) {
lb=log_b[0][0][0][k]+logInf_b[0][0][0];
if(rep(lb)¡=0) fb[k]=exp(lb)/(exp(lb)+1);
else fb[k]=1.0/(exp(-lb)+1);
if(rep(lb)¡=0) Fb[k]=exp( lb)/sqr(exp( lb)+1);
else Fb[k]=exp(-lb)/sqr(exp(-lb)+1);
}}
```

Für die Hilfsfunktionen $\overline{\mathfrak{b}}$ und $\mathfrak{c}$ wieder völlig analoge Defintionen.

Berechnung und Rückgabe von $\log \mathfrak{B}$ im resklalierten Formalismus. $d1, d2$ und $d3$ bezeichnen die jeweilige partielle Ableitung, wie es oben festgelegt wurde.

```
Array⟨Complex⟩ Tds::getLog_B(int d1, int d2, int d3) {
Array⟨Complex⟩ s(inet);
if(d1==0 && d2==0 && d3==0) {
Complex lb;
for(int k=0; k¡inet; k++) {
lb=log_b[0][0][0][k]+logInf_b[0][0][0];
if(rep(lb)¡=0) s[k]=log(1+exp(lb))-logInf_B[0][0][0];
else s[k]=lb+log(1+exp(-lb))-logInf_B[0][0][0];
}
return s;
}
s=fb*(log_b[d1][d2][d3]+logInf_b[d1][d2][d3])-logInf_B[d1][d2][d3];
if(d1==2 && d2==0 && d3==0) s=s+Fb*sqr(log_b[1][0][0]+logInf_b[1][0][0]);
if(d1==0 && d2==2 && d3==0) s=s+Fb*sqr(log_b[0][1][0]+logInf_b[0][1][0]);
if(d1==1 && d2==1 && d3==0) s=s+Fb*(log_b[0][1][0]+logInf_b[0][1][0])*
(log_b[1][0][0]+logInf_b[1][0][0]);
if(d1==0 && d2==0 && d3==2) s=s+Fb*sqr(log_b[0][0][1]+logInf_b[0][0][1]);
return s;}
```

Für $\log \overline{\mathfrak{B}}$ und $\log \mathfrak{C}$ analog.

// Durchführen eines Iterationsschrittes für die Ableitung $(d1, d2, d3)$

```
double Tds::calcConv(int d1, int d2, int d3) {
double S;
S=0;
Array⟨Complex⟩ log_b_old = log_b[d1][d2][d3];
Array⟨Complex⟩ log_c_old = log_c[d1][d2][d3];
Array⟨Complex⟩ log_bquer_old = log_bquer[d1][d2][d3];
Array⟨Complex⟩ f[6];
Array⟨Complex⟩ h0, h1, h2;
```

```
Array<Complex> coeffBq(3), coeffB(3), coeffC(3);

    f[0]=lCorrection(coeffBq,getLog_Bquer(d1,d2,d3));
f[1]=lCorrection(coeffC, getLog_C(d1,d2,d3));
f[2]=lCorrection(coeffB, getLog_B(d1,d2,d3));

    fourier(3,f);
h0=(K1*(f[0])+K2*(f[1]))*E1;log 𝔟
h1= (K2*(f[0])+K3*(f[1])+K4*(f[2]))*E1;log 𝔠
h2= (K4*(f[1])+K5*(f[2]))*E1;log 𝔟̄
f[0]=cc(h0); f[1]=cc(h1); f[2]=cc(h2);
fourier(3,f);
```

Berechnung der Integralgleichungen im Fourier-Raum:

```
log_b[d1][d2][d3]=cc(f[0])*2.0*xMax/sqrt(inet)+phi_b[d1][d2][d3]
+lCorrKb(coeffBq,2.0*gamma_b)+lCorrKb(coeffC,gamma_b);

log_c[d1][d2][d3] = cc(f[1])*2.0*xMax/sqrt(inet) +phi_c[d1][d2][d3]
+lCorrKb(coeffBq,gamma_b)+lCorrKbq(coeffB,-gamma_b) +lCorrKc(coeffC,0);

log_bquer[d1][d2][d3]=cc(f[2])*2.0*xMax/sqrt(inet) +phi_bquer[d1][d2][d3]
+lCorrKbq(coeffB,-2.0*gamma_b)+lCorrKbq(coeffC,-gamma_b);

S=add(abs(log_b_old-log_b[d1][d2][d3]) +abs(log_c_old-log_c[d1][d2][d3])+
abs(log_bquer_old-log_bquer[d1][d2][d3]));
log_b[d1][d2][d3]=log_b_old*DampingFactor+log_b[d1][d2][d3]*
(1.0-DampingFactor);

log_c[d1][d2][d3]=log_c_old*DampingFactor+log_c[d1][d2][d3]*
(1.0-DampingFactor);

log_bquer[d1][d2][d3]=log_bquer_old*DampingFactor+log_bquer[d1][d2][d3]
*(1.0-DampingFactor);
return S/(2.0*inet);}
```

Berechnung von $\log \mathfrak{b} \ldots$:

```
Tds::calcDerivative(int d1, int d2, int d3) {
int k,j;
Complex d;
long format=cout.flags();
IterationStep = 0;
```

Abbruchkontrolle für die Iteration

```
while(((Precision=calcConv(d1,d2,d3)) > PrecisionGoal ||
IterationStep < MinIteration) && ++IterationStep < MaxIteration) {
if(PlotData > 0) {
```

```
cout.setf(ios::scientific, ios::floatfield);
cout << “(* “ << IterationStep << “ : \ tD = “ << Precision
<< “ *)” << endl;
cout.flags(format);
}
}
LamPrecision[d1][d2][d3]=Precision;
if(d1==0 && d2==0 && d3==0) calcHigherDependencies();
} //Berechnung aller Arrays log 𝔟 . . . und ihrer Ableitungen bis zu max.
Tds::calcAllDerivatives(int max) {
calcDependencies();
calcDerivative(dB[k],dM[k],dH[k]);
}}
//Setzen der Anfangswerte für log 𝔟
Tds::setLog_b(int d1, int d2, int d3, const Array¡double¿ &xx, const Ar-
ray¡Complex¿ &yy) {
calcDependencies();
Interpolate fun(xx,yy);
log_b[d1][d2][d3]=fun(x);
}
Für log 𝔟̄ und log 𝔠 analog.
Array⟨Complex⟩ Tds::getLog_b(int d1, int d2,int d3)
{return log_b[d1][d2][d3];}
Array⟨Complex⟩ Tds::getLog_c(int d1, int d2, int d3)
{return log_c[d1][d2][d3];}
Array⟨Complex⟩ Tds::getLog_bquer(int d1, int d2, int d3)
return log_bquer[d1][d2][d3];}
// Berechnung des Integranden zur Bestimmung des Eigenwerts
const Tds *Tds::TdsVals;
double Tds::lamIntegrant(double x) {
Complex s=(*TdsVals).G_b(-x+I*(*TdsVals).gamma_b)*(*TdsVals).logBquer(x)+
(*TdsVals).G_bquer(-x-I*(*TdsVals).gamma_b)*(*TdsVals).logB(x)+
(*TdsVals).G_c(-x)* (*TdsVals).logC(x);
return rep(s);
}
// Kerne für den Eigenwert
inline Complex Tds::G_b(const Complex &x) const {
return 1/(2*Pi*(x*(x-I)));
} inline Complex Tds::G_c(const Complex &x) const {
return 2/(2*Pi*(x*x+1));
}
inline Complex Tds::G_bquer(const Complex &x) const {
return 1/(2*Pi*(x*(x+I));
```

```
}
// Berechnung des Eigenwerts
Tds::calcLogLambda(int max) {
Complex c;
int k=0;
calcAllDerivatives(max);
TdsVals=this;
for(k=0; k¡max;k++) {
logB.set(x,getLog_B(dB[k], dM[k], dH[k]));
logC.set(x,getLog_C(dB[k], dM[k], dH[k]));
logBquer.set(x,getLog_Bquer(dB[k], dM[k], dH[k]));
c=integrateGauss(lamIntegrant,x[0],x[inet-1]);
c=c+logInf_B[dB[k]][dM[k]][dH[k]]+
logInf_Bquer[dB[k]][dM[k]][dH[k]] ;
c=c+logInf_C[dB[k]][dM[k]][dH[k]];
LogLam[dB[k]][dM[k]][dH[k]]=rep(c);
}}
Rückgabe des Eigenwertes
Complex Tds::logLambda(int d1, int d2, int d3) {
for(int k=0; k¡dAll; k++)
if(d1==dB[k] && d2==dM[k] && d3==dH[k])
return LogLam[dB[k]][dM[k]][dH[k]];
}
double Tds::getPrecision(int d1, int d2, int d3) {
for(int k=0; k¡dAll; k++)
if(d1==dB[k] && d2==dM[k] && d3==dH[k])
return LamPrecision[dB[k]][dM[k]][dH[k]];
}
Definition der Inhomogenitäten in den Integralgleichungen
inline Complex Tds::funPhi_b(int d1, int d2, int d3,const Complex &x) {
if(d1==0 && d2==0 && d3==0)
return -b/(x-I)*(x+I);
if(d1==1 && d2==0 && d3==0) return
-1/(x-I)*(x+I);
return complex(0);
}
Definition der Kerne in den Integralgleichungen:
inline Complex Tds::K_b(const Complex &x) {return -1/(2*Pi*(x*(x-
I)));}
inline Complex Tds::K_c(const Complex &x) {return -2/(2*Pi*(x*x+1));}
inline Complex Tds::K_bquer(const Complex &x) {return -1/(2*Pi*(x*(x+I)));}
}
```

Literaturverzeichnis

[1] H. Bethe, Z. Physik 71 (1931), 205

[2] W. Heisenberg, Z. Physik 49 (1928), 619

[3] E. Ising, Z. Phys. 31 (1925), 253

[4] L. Onsager, Phys. Rev. 65 (1944), 117

[5] G. Jüttner,A. Klümper,J.Suzuki,cond-mat 9611058, (1996)

[6] G. Jüttner,A. Klümper,cond-mat 9606192, (1996)

[7] A. Klümper, Z.Phys. B 91, (1993) 507

[8] A. Klümper, T. Wehner, J. Zittarz, J. Phys. A: Math. Gen. 30 (1997), 1897

[9] A. Klümper, Logarithmic corrections in the spin 1/2 Heisenberg model cond-mat 9803225, (1998)

[10] A.Schadschneider, Dissertation Köln 1991

[11] M. Suzuki, Phys.Rev. B. 31 (1985) 2957.

[12] M. Suzuki, M. Inoue, Progr. Theor. Phys. 78 (1987), 787

[13] R.B. Baxter, Exactly Solved Models in Statistical Mechanics, Academic Press, London, (1982)

[14] R.Z. Bariev J. Phys. A.: Math. Gen. 27 (1994), 3381

[15] C.L. Schultz, Phys. Rev. Letters 46 (1981), 629

[16] C.L. Schultz, Physica 122A (1983), 71

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

[18] F.C. Zhang, T.M. Rice, Phys. Rev. B 37 (1988), 3759

[19] A. B. Harris, R. V. Lange, Phys. Rev. 157 (1967), 295

[20] P. Schlottmann, Phys. Rev.Lett. B 36 (1987), 5177

[21] P. B. Wiegmann, Phys. Rev. Lett. 60 (1988), 821

[22] F. D. M. Haldane, J. Phys. C 14, 2585

[23] R. F. Dashen, B. Hasslacher und A. Neveu, Phys. Rev. D11 (1975) 3424

[24] V.E. Korepin, N.M. Boguliubov, A.G. Izergin, Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions, Cambridge University Press, (1993)

[25] A.Klümper, (persönliche Mitteilung)

[26] P.-A. Bares, Dissertation, ETH Zürich (1991)

[27] C. K. Lai, J.Math. Phys. 15 (1974), 1675

[28] B. Sutherland, Phys. Rev. B 12 (1975), 3795

[29] N. Kawakami, S. K. Yang, J. Phys. Cond. Matt 5983, (1991)

[30] P. A. Bares, G.Blatter, Phys. Rev. Lett. 64 (1990), 2576

[31] S. Eggert, I. Affleck, M. Takahashi, cond-mat 9404062, (1994)

[32] J. G. Bednorz, K. A. Müller, Z. Phys. B64 (1986) 189

[33] X. G. Wen, F. Wilczek, A. Zee, Phys. Rev. B39 (1989), 11413

[34] H. W. Blöte, J. L. Cardy, M. P. Nightingale, Phys. Rev. Lett. 56 (1986), 742

[35] I. Affleck, Phys. Rev. Lett. 56 (1986), 746

[36] H. Frahm, N.C. Yu, J. Phys. A : Math. Gen. 23 (1990), 2115

[37] C. N. Yang, Phys. Rev. Lett. 19, (1967), 1312

[38] A. Klümper, M. Batchelor, P. Pearce, J. Phys. A 24 (1991), 3111

[39] M. Takahashi, Prog. Theor. Phys. 46 (1971), 401

[40] M. Quaisser, A. Schadschneider, J. Zittartz, J. Phys. A: Math. Gen. 25 (1992), L1127

Danksagung

Ich danke Herrn Priv. Doz. Dr. A. Klümper für die Anregung zu dieser Arbeit, seine hervorragende Betreuung und seine stete Diskussionsbereitschaft.

Herrn Prof. Dr. J. Zittartz danke ich für die Ermöglichung der guten Arbeitsbedingungen an seinem Lehrstuhl und seine Unterstützung.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. G. Jüttner für die ständige Betreuung und seinen fachlichen Rat im Verlauf der gesamten Diplomarbeit.

Für das Korrekturlesen dieser Arbeit und der sonstigen mir zuteil gewordenen Hilfe danke ich Dr. A. Schadschneider, Dipl. Phys. H. Niggemann, Dipl. Phys. K. Klauck, Dipl. Phys. L. Santen und Dr. A.Fuji.

Erklärung

Hiermit versichere ich, daß ich die vorliegende Arbeit selbständig angefertigt und außer den genannten Quellen keine weiteren Hilfsmittel benutzt habe.

Christian Scheeren