



BERGISCHE UNIVERSITÄT WUPPERTAL
FACHBEREICH PHYSIK

Determinantendarstellung von Übergangsmatrixelementen
für das eindimensionale Spin- $\frac{1}{2}$ XXZ-Modell

Dissertation
zur Erlangung der Doktorwürde
des Fachbereichs Physik
der Bergischen Universität Wuppertal

vorgelegt von

DANIEL BIEGEL
aus Brühl

WUB-DIS 2003-9
September 2003

Abstract

The one-dimensional spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg model was solved, in principle, by H. Bethe in 1931 using an ad hoc trial wavefunction, now famously known as the Bethe ansatz. Decades went by before the power and scope of this method of exact analysis became widely known for applications to spectrum and thermodynamics of a select class of completely integrable model systems.

Until recently, the most vexing exception to immense progress in the further development of the Bethe ansatz has been the absence of a practical method to use the exactly known and readily available Bethe wave functions for the explicit calculation of transition matrix elements. The knowledge of such transition rates is of paramount importance for an understanding of dynamic correlation functions in relation to the underlying quasiparticles and for the interpretation of experimental probes of quantum fluctuations in quasi-one-dimensional magnetic compounds.

It was most remarkable, therefore, when Kitanine, Maillet, and Terras succeeded in reducing matrix elements between Bethe wave functions for local spin operators to determinantal expressions.

Here these expressions are used to calculate dynamic spin structure factors of the Heisenberg antiferromagnet (XXX model) and the one-dimensional spin- $\frac{1}{2}$ XXZ model in the planar regime ($|\Delta| < 1$), both with periodic boundary conditions and an external magnetic field:

- Determinantal representations are derived for the zero-temperature spin fluctuations parallel and perpendicular to the external field.
- The singular nature of the Bethe ansatz equations for the case $\Delta = 0$ (XX model) is discussed and the XX limit is performed in the determinantal expressions for the transition matrix elements.
- As an application, lineshapes for dynamic structure factors relevant for experiments are calculated. The predominant excitations are identified within the framework of quasiparticles excited from a corresponding vacuum.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|-----------|
| Abbildungsverzeichnis | vii |
| Tabellenverzeichnis | vii |
| 1 Einleitung | 1 |
| 2 Der Bethe-Ansatz: Grundlagen | 3 |
| 2.1 Der Koordinaten-Bethe-Ansatz | 3 |
| 2.2 Quanteninverse Streutheorie und der algebraische Bethe-Ansatz | 12 |
| 2.2.1 Die Transfermatrix | 13 |
| 2.2.2 Der algebraische Bethe-Ansatz | 16 |
| 3 Die Anwendung des Bethe-Ansatzes auf das XXZ-Modell | 18 |
| 3.1 Die Bethe-Ansatz-Gleichungen für das XXZ-Modell | 18 |
| 3.2 Der Übergang zum XXX-Modell | 20 |
| 3.3 Der Übergang zum XX-Modell | 21 |
| 3.3.1 Nichtkritischer Fall | 22 |
| 3.3.2 Der Übergang beim Auftreten kritischer reeller Paare | 22 |
| 3.3.3 Der Übergang beim Auftreten kritischer komplexer Paare | 24 |
| 3.3.4 Die Bethe-Ansatz-Gleichungen für das XX-Modell: Allgemeiner Fall | 25 |
| 3.4 Evolution der 2-Spinon-Anregungen der Achterkette bei Variation von Δ | 26 |
| 3.5 Spinonen vs. Fermionen im XX-Modell | 34 |
| 4 Determinantendarstellung von Matrixelementen | 36 |
| 4.1 Matrixelemente im XXX-Modell | 38 |
| 4.2 Matrixelemente im planaren Bereich des XXZ-Modells | 42 |
| 4.2.1 Hyperbolische Parametrisierung | 42 |
| 4.2.2 Trigonometrische Parametrisierung | 45 |
| 4.3 Der Übergang zum XX-Modell | 47 |
| 4.3.1 Nichtkritischer Fall | 47 |
| 4.3.2 Der Übergang für $M_\lambda^z(q)$ beim Auftreten eines kritischen reellen Paares | 51 |
| 5 Berechnung von Isoimpulslinien (<i>Lineshapes</i>) | 55 |
| 5.1 Dominante Anregungsklassen | 55 |
| 5.2 <i>Lineshapes</i> im XXX- und XXZ-Modell | 64 |
| 5.2.1 <i>Lineshapes</i> im XXX-Modell | 64 |
| 5.2.2 Evolution von <i>Lineshapes</i> bei Variation von Δ | 67 |
| 5.2.3 Skalenverhalten der 2-Spinon-Übergangsraten $M_{-+}^{sp,sp}(\pi, \omega)$ im XX-Modell | 69 |
| 6 Ausblick | 72 |
| A Der dynamische Strukturfaktor in Theorie und Experiment | 73 |
| A.1 Der Wirkungsquerschnitt für Neutronenstreuung | 73 |
| A.2 Magnetische Streuung | 75 |
| A.3 Streuung von Neutronen an einer Spinkette | 77 |
| B Die ε-Entwicklung für $M_\lambda^z(q)$ | 80 |
| B.1 $\mathcal{K}_r(\{y_i\})$ | 80 |
| B.2 $\det N(\{y_i\})$ | 81 |
| B.3 $\det(H - \frac{2}{N}\mathbf{1})$ | 81 |
| B.3.1 $r = 2$ | 82 |
| B.3.2 $r = 3$ | 83 |
| B.3.3 Der allgemeine Fall | 86 |
| B.4 Zusammenführung der Einzelergebnisse | 86 |

Literatur

89

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|------|--|----|
| 2.1 | Auswirkung der Magnon-Magnon-Wechselwirkung auf das Anregungsspektrum der 2-Magnon-Streuzustände | 6 |
| 2.2 | Auswirkung der Spinon-Spinon-Wechselwirkung auf das Anregungsspektrum der 2-Spinon-Streuzustände | 9 |
| 2.3 | Das Psinon-Vakuum für verschiedene Magnetisierungen | 11 |
| 2.4 | Auswirkung der Psinon-Psinon-Wechselwirkung auf das Spektrum der 2-Psinon-Anregungen | 12 |
| 2.5 | Grafische Darstellung der zentralen Vertauschungsrelation (Yang-Baxter-Relation) . . | 14 |
| 3.1 | 2-Spinon-Anregungen mit $S_T^z = 1$ (Klasse A): Verhalten der Magnon-Impulse bei Variation von Δ ($N = 8$) | 29 |
| 3.2 | 2-Spinon-Anregungen mit $S_T^z = 0$ (Klasse B): Verhalten der Magnon-Impulse bei Variation von Δ ($N = 8$) | 30 |
| 3.3 | 2-Spinon-Anregungen mit $S_T^z = 1$ (Klasse A): Verhalten der Zustandsenergie bei Variation von Δ ($N = 8$) | 31 |
| 3.4 | 2-Spinon-Anregungen mit $S_T^z = 0$ (Klasse B): Verhalten der Zustandsenergie bei Variation von Δ ($N = 8$) | 31 |
| 3.5 | 2-Spinon-Anregungen mit $S_T^z = 0$ (Klasse C): Verhalten der Magnon-Impulse bei Variation von Δ ($N = 8$) | 32 |
| 3.6 | 2-Spinon-Anregungen mit $S_T^z = 0$ (Klasse C): Verhalten der Zustandsenergie bei Variation von Δ ($N = 8$) | 32 |
| 4.1 | Spektrum und Matrixelemente $M_\lambda^-(\pi)$ für eine Kette der Länge $N = 512$ (XXX-Modell, $M_z = N/4$) | 42 |
| 4.2 | Evolution der Matrixelemente $M_\lambda^z(q)$ bei Variation von N und Δ (XXZ-Modell, $M_z = 0$ und $M_z = 2$, nichtkritischer Fall) | 51 |
| 4.3 | Evolution der Matrixelemente $M_\lambda^z(q)$ bei Variation von N und Δ (XXZ-Modell, $M_z = 0$, ein kritisches reelles Paar) | 53 |
| 5.1 | Gemäß Auswahlregeln erlaubte Übergänge im XXX-Modell | 56 |
| 5.2 | Konfigurationen der Bethe-Quantenzahlen für die $\psi\psi$ -Anregungen | 59 |
| 5.3 | Spektrum und relatives Gewicht der $\psi\psi$ -Anregungen | 59 |
| 5.4 | Spektrum und Dispersionsrelation der $\psi\psi^*$ -Anregungen (parallele Spinfluktuationen) . | 60 |
| 5.5 | Konfigurationen der Bethe-Quantenzahlen für die $\psi\psi^*$ -Anregungen (parallele Spinfluktuationen) | 61 |
| 5.6 | Spektrum und relatives Gewicht der $\psi\psi^*$ -Anregungen (parallele Spinfluktuationen) . . | 61 |
| 5.7 | Konfigurationen der Bethe-Quantenzahlen für die $\psi\psi^*$ -Anregungen (senkrechte Spinfluktuationen) | 62 |
| 5.8 | Spektrum und relatives Gewicht der $\psi\psi^*$ -Anregungen (senkrechte Spinfluktuationen) . | 62 |
| 5.9 | <i>Lineshape</i> : $M_{zz}^{\psi\psi^*}(\pi/2, \omega)$ für mehrere Kettenlängen und $M_z = N/4$ (XXX-Modell) . . | 65 |
| 5.10 | Zustandsdichte der $\psi\psi^*$ -Anregungen und ihr Beitrag zu $S_{zz}(\pi/2, \omega)$ ($N = 512$, $M_z = N/4$, XXX-Modell) | 65 |
| 5.11 | <i>Lineshapes</i> : $M_{-+}^{\psi\psi}(\pi, \omega)$ und $S_{-+}(\pi, \omega)$ für mehrere Kettenlängen und $M_z = N/4$ (XXX-Modell) | 66 |
| 5.12 | Übergangsmatrixelemente $M_\lambda^+(q)$ am unteren Ende des $\psi\psi^*$ -Spektrums (XXX-Modell) | 67 |
| 5.13 | <i>Lineshape</i> : $M_{-+}^{sp,sp}(\pi, \omega)$ für $N = 512$ und $M_z = 0$ bei Variation von Δ | 68 |
| 5.14 | <i>Lineshape</i> : $S_{-+}^{sp,sp}(\pi, \omega)$ für $N = 512$ und $M_z = 0$ bei Variation von Δ | 68 |
| 5.15 | <i>Lineshape</i> : $M_{-+}^{\psi\psi}(\pi, \omega)$ für $N = 256$ und $M_z = N/4$ bei Variation von Δ | 69 |
| 5.16 | <i>Lineshape</i> : $M_{zz}^{\psi\psi^*}(q, \omega)$ mit $q = \pi/2, \pi/4$ und $3\pi/4$ für $N = 256$ und $M_z = N/4$ bei Variation von Δ | 70 |
| 5.17 | <i>Lineshape</i> : $\overline{M}_{-+}^{sp,sp}(\pi, \omega)$ für Ketten verschiedener Länge und $M_z = N/4$ (XX-Modell) . | 71 |
| A.1 | Geometrie eines Neutronen-Streuxperiments | 74 |

Tabellenverzeichnis

| | | |
|-----|---|----|
| 3.1 | Konfigurationen der Bethe-Quantenzahlen für die 2-Spinon-Triplett-Zustände mit $S_T^z = 1$ im XXX-Modell ($N = 8$) | 27 |
| 3.2 | Konfigurationen der Bethe-Quantenzahlen für den Grundzustand und die 2-Spinon-Triplett-Zustände mit $S_T^z = 0$ im XXX-Modell ($N = 8$) | 27 |
| 3.3 | Konfigurationen der Bethe-Quantenzahlen für die 2-Spinon-Singulett-Zustände im XXX-Modell ($N = 8$) | 27 |
| 5.1 | Gemäß Auswahlregeln erlaubte Übergänge im XXX-Modell | 57 |
| 5.2 | Zur Magnetisierung $M_z = N/4$ gehörendes äußeres Magnetfeld | 64 |

1 Einleitung

Der Herausforderung, Magnetismus und die Eigenschaften von magnetischen Materialien beschreiben und erklären zu wollen, begegnen die in der Festkörperphysik agierenden Wissenschaftler mit der Konstruktion geeigneter Modelle, anhand derer sich grundlegende Zusammenhänge erkennen und untersuchen sowie offene Fragen diskutieren und beantworten lassen.

In diesem Zusammenhang dienen Spinmodelle als Modelle für magnetische Materialien. Sie reduzieren die Komplexität der Beschreibung der magnetischen Eigenschaften eines Festkörpers, indem sie sich auf die zugrunde liegenden elementaren Wechselwirkungen konzentrieren. Dies ermöglicht einen Einblick in die auftretenden – und in aller Regel auch experimentell beobachtbaren – Phänomene, wie z.B. kollektiven Magnetismus oder die Existenz von kritischen Temperaturen und Phasenübergängen in einer, zwei oder drei Dimensionen.

Unter den Spinmodellen sind die eindimensionalen Modelle von herausragender Bedeutung, da für sie die Lösung des Eigenwertproblems des zugehörigen Hamilton-Operators, d.h. die Bestimmung seiner Eigenwerte und -funktionen, mit erheblich weniger Aufwand verbunden ist als in höherdimensionalen Systemen. Neben numerischen Näherungsverfahren existieren für eine ganze Reihe eindimensionaler Modelle analytische und numerische Verfahren zur exakten Diagonalisierung.

Hans Bethe stellte 1931 einen Ansatz für die Wellenfunktionen bzw. Eigenvektoren des eindimensionalen Spin-1/2 Heisenberg-Modells vor (BETHE, 1931). Die Formulierung des Heisenberg-Modells geht auf Überlegungen von Heisenberg (HEISENBERG, 1928), Bloch (BLOCH, 1930) und anderen zur Beschreibung von Ferromagnetismus im Rahmen des Approximationsverfahrens für Moleküle nach London und Heitler (HEITLER & LONDON, 1927) zurück. Durch die geschickte Parametrisierung der Eigenvektoren des Heisenberg-Modells gelang es Bethe, das Problem der exakten Bestimmung der Eigenwerte und -funktionen auf die Lösung eines Systems von nichtlinearen Gleichungen zurückzuführen. In der Folgezeit wurde der Bethe-Ansatz von zahlreichen Autoren aufgegriffen und weiterentwickelt, so daß es heutzutage eine große Zahl von quantenmechanischen Mehrkörperproblemen gibt, die sich mit Hilfe des Bethe-Ansatzes exakt lösen lassen.

Die Entdeckung bzw. Herstellung von Materialien, deren magnetische Eigenschaften von quasi-eindimensionalen Strukturen bestimmt werden, rückte das Heisenberg-Modell und mit ihm verwandte Modelle, wie z.B. das XXZ- oder XX-Modell, auch verstärkt in den Fokus von Experimentatoren. Es zeigte sich nämlich, daß bei einer Vielzahl solcher Materialien, wie z.B. Kalium-Trifluorocuprat, KCuF_3 , oder Kupferbenzoat, $\text{Cu}(\text{C}_6\text{D}_5\text{COO})_2 \cdot 3\text{D}_2\text{O}$, zur Interpretation der gewonnenen Meßdaten das Heisenberg-Modell herangezogen werden kann (BROHOLM *et al.*, 2002).

Für die experimentelle Untersuchung quasi-eindimensionaler magnetischer Materialien stehen verschiedene Methoden, wie z.B. Röntgenbeugung oder Elektronenstreuung, zur Verfügung. Aufgrund der vorteilhaften Eigenschaften des Neutrons wird allerdings in vielen Fällen auf Neutronenstreuung zurückgegriffen (BROHOLM *et al.*, 2002).

Bei Streuexperimenten mit Neutronen wird in aller Regel der Wirkungsquerschnitt gemessen, in den zentral der dynamische Strukturfaktor eingeht. Beim dynamischen Strukturfaktor handelt es sich um eine Größe, die von der experimentellen Anordnung unabhängig ist. In ihn gehen ausschließlich die Struktur und die dynamischen Eigenschaften der untersuchten Probe ein. Aus seiner Messung lassen sich so unmittelbar Rückschlüsse auf die Zusammensetzung und die Eigenschaften der Probe ziehen (SQUIRES, 1978; LOVESEY, 1987). Gleichzeitig lassen sich mit Hilfe geeigneter theoretischer Modelle Vorhersagen über Größe und Aufbau des dynamischen Strukturfaktors machen. Er bildet somit eine natürliche Schnittstelle zwischen Theorie und Experiment (BROHOLM *et al.*, 2002).

Im Rahmen des Bethe-Ansatzes stehen für diejenigen Modelle, auf die der Ansatz angewendet werden kann, mit den Bethe-Ansatz-Wellenfunktionen die exakten Eigenzustände zur Verfügung. Damit ist es grundsätzlich möglich, Übergangsmatrixelemente für verschiedene dynamische Observablen explizit auszurechnen. Aus diesen Übergangsmatrixelementen läßt sich dann der zugehörige dynamische Strukturfaktor aufbauen. Aufgrund des hohen numerischen Aufwandes ist man hier allerdings auf kleine Systemgrößen beschränkt (KARBACH *et al.*, 2000; KARBACH & MÜLLER, 2000; KARBACH *et al.*, 2002).

Im Mittelpunkt der vorliegenden Arbeit steht die Herleitung einer Determinantendarstellung für die Übergangsmatrixelemente des Spin-Fluktuationsoperators im eindimensionalen Spin-1/2 XXZ-Modell.

In diese Determinantendarstellung müssen dann nicht mehr explizit die Bethe-Ansatz-Wellenfunktionen eingesetzt werden, sondern nur noch elementare Funktionen der jeweiligen Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen. Den Ausgangspunkt hierfür bildet die Arbeit von Kitanine, Maillet und Terras (KITANINE *et al.*, 1999), in der sich die Autoren der Problematik im Kontext des algebraischen Bethe-Ansatzes nähern.

Der Aufbau der Arbeit ist wie folgt:

In Kapitel 2 werden zunächst die im weiteren Verlauf der Arbeit benötigten Grundlagen des Bethe-Ansatzes diskutiert. Besonderes Augenmerk liegt hier auf der Interpretation der Anregungszustände der betrachteten Modelle als kollektive Anregungen von Quasiteilchen.

In Kapitel 3 wird die Anwendung des Bethe-Ansatzes auf das XXZ-Modell erläutert und der Übergang zum XX-Modell als Grenzwert $\Delta \rightarrow 0$ des Anisotropieparameters des XXZ-Modells durchgeführt. Die Bethe-Ansatz-Gleichungen für das XX-Modell werden hergeleitet.

Die Herleitung der Determinantendarstellung für die Übergangsmatrixelemente des Spin-Fluktuationsoperators im XXX- und XXZ-Modell erfolgt dann in Kapitel 4. Auch hier wird der Grenzübergang $\Delta \rightarrow 0$, der das XXZ- in das XX-Modell überführt, betrachtet. Kapitel 4 wird durch die beiden Anhänge A und B ergänzt. Anhang A beschäftigt sich mit der Rolle des dynamischen Strukturfaktors in Theorie und Experiment. Hier werden insbesondere die in Kapitel 4 zugrunde gelegten Formeln für den dynamischen Strukturfaktor der eindimensionalen Kette hergeleitet. In Anhang B findet sich die Herleitung eines in Kapitel 4 diskutierten zentralen Resultates für das XX-Modell.

In Kapitel 5 wird schließlich als Anwendung der Determinantendarstellung die Berechnung von Isoimpulslinien bzw. *Lineshapes* für lange Ketten gezeigt.

Die Arbeit schließt mit einem Ausblick in Kapitel 6.

2 Der Bethe-Ansatz: Grundlagen

Hans Bethe stellte 1931 mit dem Bethe-Ansatz ein Verfahren zur exakten Diagonalisierung des eindimensionalen ferromagnetischen Spin-1/2 Heisenberg-Modells vor (BETHE, 1931). Im Rahmen des Bethe-Ansatzes wird das Problem der exakten Bestimmung der Eigenwerte und Eigenvektoren des Modells auf die Lösung eines Systems von nichtlinearen Gleichungen zurückgeführt. Gleichzeitig treten Sätze von – je nach Parametrisierung – natürlichen bzw. ganz- oder halbzahligen Zahlen, die sogenannten Bethe-Quantenzahlen, auf, die zur Charakterisierung der Eigenzustände herangezogen werden können.

Mittlerweile wird der Bethe-Ansatz in seiner ursprünglichen Form als Koordinaten-Bethe-Ansatz bezeichnet. Daneben haben sich mit der Zeit weitere Zweige etabliert, unter denen insbesondere der sogenannte algebraische Bethe-Ansatz zu nennen ist (KOREPIN *et al.*, 1993).

Mit dem Bethe-Ansatz steht ein mächtiges Werkzeug zur Verfügung, um die Eigen- bzw. Anregungszustände und Spektren von Quantenspinsystemen zu bestimmen. Um dieses Werkzeug effizient und wirkungsvoll nutzen zu können, ist es jedoch notwendig, die Anregungszustände in geeigneter Weise zu klassifizieren. Generell kann man versuchen, eine solche Klassifikation ausschließlich über die Sätze von Bethe-Quantenzahlen, die die jeweiligen Anregungszustände charakterisieren, vorzunehmen. Im Hinblick auf bestimmte Fragestellungen – insbesondere bei der Diskussion von Anregungsspektren – hat es sich allerdings als nützlich erwiesen, die Charakterisierung via Bethe-Quantenzahlen mit einer Beschreibung der Anregungszustände im Teilchenbild zu verbinden (KARBACH, 2002). Im Teilchenbild werden die Anregungszustände als kollektive Anregungen von Quasiteilchen, die aus einem physikalischen Vakuum erzeugt werden, interpretiert.

Im folgenden werden die Grundlagen des Koordinaten-Bethe-Ansatzes und des algebraischen Bethe-Ansatzes erläutert. Hierbei wird insbesondere auch auf die jeweils relevanten Quasiteilchen eingegangen. Im Mittelpunkt der Ausführungen steht das eindimensionale Spin-1/2 Heisenberg-Modell.

2.1 Der Koordinaten-Bethe-Ansatz

Das eindimensionale ferromagnetische Spin-1/2 Heisenberg-Modell besitzt den Hamiltonian

$$H_F = -J \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \quad (2.1)$$

$$= -J \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + S_i^z S_{i+1}^z \right], \quad J > 0. \quad (2.2)$$

H_F operiert auf einem Hilbertraum der Dimension 2^N und beschreibt ein System von Spins mit Quantenzahl $s = \frac{1}{2}$, die entlang einer Kette der Länge N angeordnet sind, wobei zwischen direkt benachbarten Spins eine ortsunabhängige Nächste-Nachbar-Wechselwirkung besteht. Die Kopplungskonstante J ist ein Maß für die Stärke der Wechselwirkung zwischen zwei benachbarten Spins. Das negative Vorzeichen, also $-J < 0$, legt den ferromagnetischen Charakter der Austauschwechselwirkung fest (MATTIS, 1981; YOSIDA, 1996). Darüber hinaus werden periodische Randbedingungen angenommen, d.h. die Kette wird quasi zu einem Ring geschlossen, und die Gitterkonstante wird gleich Eins gesetzt. Ferner sind die Auf- und Absteigeoperatoren S_i^\pm durch $S_i^\pm = S_i^x \pm i S_i^y$ gegeben.

Das Heisenberg-Modell ist invariant gegenüber Rotationen im Spinraum und diskreten Translationen um ein beliebiges Vielfaches der Gitterkonstanten (BETHE, 1931; KARBACH, 1994). Bezeichnet \mathbb{T} den Translationsoperator, der die Spinkonfiguration entlang der Kette um einen Gitterplatz verschiebt, dann gilt:

$$[H_F, \mathbb{T}] = 0. \quad (2.3)$$

Aus der Invarianz von H_F gegenüber Rotationen im Spinraum folgt die Erhaltung des Gesamtpins $\vec{S}_T = \sum_{i=1}^N \vec{S}_i$ und aller seiner Komponenten:

$$[H_F, \vec{S}_T^2] = 0, \quad [H_F, S_T^\alpha] = 0, \quad \alpha = x, y, z. \quad (2.4)$$

Dies führt einerseits dazu, daß alle Eigenzustände von H_F , die zu einem durch die Quantenzahl S_T charakterisierten Spin-Multiplett gehören, entartet sind, d.h. alle Eigenzustände von H_F sind mindestens $(2S_T + 1)$ -fach entartet. Andererseits erlaubt die Erhaltung der z -Komponente des Gesamtspins, die H_F darstellende Matrix in Block-Diagonalform zu überführen, indem man die den Hilbertraum aufspannenden Basisvektoren bezüglich der Quantenzahl

$$S_T^z = \frac{N}{2} - r, \quad r = 0, \dots, N, \quad (2.5)$$

sortiert (BETHE, 1931; KARBACH & MÜLLER, 1997). Hierbei bezeichnet r die Anzahl der Down-Spins. Der Block bzw. Unterraum zu $r = 0$ (ausschließlich Up-Spins) besteht nur aus einem einzigen Zustand, $|F\rangle = |\uparrow \dots \uparrow\rangle$. Dieser ist ein Eigenzustand von H_F mit der Energie

$$E_0 = -\frac{JN}{4}. \quad (2.6)$$

E_0 ist die Grundzustandsenergie des Heisenberg-Ferromagneten. Da der Unterraum zu $r = 0$ gemäß (2.5) die Quantenzahlen $S_T = S_T^z = N/2$ trägt, gehört $|F\rangle$ zu einem entarteten Spinnultipllett mit insgesamt $(N + 1)$ Zuständen. Folglich ist der Grundzustand des Ferromagneten $(N + 1)$ -fach entartet. Für die Diagonalisierung des zu $r = 1$ gehörenden Blocks der Größe $N \times N$ nutzt man die Translationsinvarianz des Hamiltonians aus (BLOCH, 1930; ORBACH, 1958). Hierzu kennzeichnet man die N zu $r = 1$ gehörenden Basiszustände durch die Position des einen Down-Spins,

$$|n\rangle = S_n^- |F\rangle, \quad n = 1, \dots, N, \quad (2.7)$$

und konstruiert mit Hilfe dieser Vektoren translationsinvariante Basiszustände $|\psi_k\rangle$:

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{ikn} |n\rangle, \quad k = \frac{2\pi m}{N}, \quad m = 0, 1, \dots, N - 1. \quad (2.8)$$

Die Zustände $|\psi_k\rangle$ sind Eigenzustände des Translationsoperators \mathbb{T} mit Eigenwerten e^{ik} . Gemäß (2.3) sind sie ebenfalls Eigenzustände von H_F mit Eigenwerten E , für die gilt:

$$\frac{E - E_0}{J} = 1 - \cos k. \quad (2.9)$$

Die Zustände $|\psi_k\rangle$ repräsentieren die sogenannten 1-Magnon-Anregungen (KARBACH & MÜLLER, 1997), bei denen die totale Ordnung der Spins im Zustand $|F\rangle$ durch eine Spinwelle mit Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ gestört wird (BLOCH, 1930; BETHE, 1931). Dementsprechend wird die zugehörige Wellenzahl k auch als Magnonimpuls bezeichnet.

Für $r \geq 2$ gelingt es nicht, den Hamiltonian mit Hilfe der translationsinvarianten Basis vollständig zu diagonalisieren (BETHE, 1931; ORBACH, 1958; KARBACH & MÜLLER, 1997). Stattdessen wird im Rahmen des (Koordinaten-) Bethe-Ansatzes folgender Ansatz für die Eigenzustände in dem zu einem festen r gehörenden invarianten Unterraum der Dimension $\binom{N}{r}$ gemacht (BETHE, 1931):

$$|\psi\rangle = \sum_{1 \leq n_1 < n_2 < \dots < n_r \leq N} a(n_1, n_2, \dots, n_r) |n_1, n_2, \dots, n_r\rangle. \quad (2.10)$$

Hierbei kennzeichnen die natürlichen Zahlen n_i , $i = 1, \dots, r$, analog zu (2.7) die Positionen der Down-Spins:

$$|n_1, n_2, \dots, n_r\rangle = S_{n_1}^- S_{n_2}^- \dots S_{n_r}^- |F\rangle. \quad (2.11)$$

Per Konstruktion stehen Zustände aus Unterräumen zu verschiedenem r senkrecht aufeinander, d.h. ihr Skalarprodukt verschwindet.

Der Ansatz für die Koeffizienten $a(n_1, n_2, \dots, n_r)$ berücksichtigt das Auftreten von r Wellenzahlen k_1, \dots, k_r und eines Phasenwinkels $\theta_{i,j}$ pro Wellenzahl-Paar (k_i, k_j) :

$$a(n_1, n_2, \dots, n_r) = \sum_{\mathcal{P} \in \mathcal{S}_r} \exp \left(i \sum_{j=1}^r k_{\mathcal{P}_j} n_j + \frac{i}{2} \sum_{i < j}^r \theta_{\mathcal{P}_i, \mathcal{P}_j} \right). \quad (2.12)$$

Die Summe $\mathcal{P} \in \mathcal{S}_r$ läuft über alle $r!$ Permutationen der Indizes $\{1, 2, \dots, r\}$. Setzt man in (2.10)-(2.12) $r = 1$, so reproduziert man bis auf die Normierung die in (2.8) angegebenen Zustände $|\psi_k\rangle$. Das Einsetzen des Ansatzes (2.10) in die Eigenwert-Gleichung $H_F |\psi\rangle = E |\psi\rangle$ und die Diskussion des hieraus resultierenden Gleichungssystems für die Koeffizienten (2.12) führen zu dem Ergebnis (BETHE, 1931; KARBACH & MÜLLER, 1997), daß die Bethe-Ansatz-Wellenfunktion (2.10) mit Koeffizienten (2.12) ein Eigenzustand von H_F zum Eigenwert

$$\frac{E - E_0}{J} = \sum_{i=1}^r (1 - \cos k_i) \quad (2.13)$$

ist, sofern die in (2.12) auftretenden Wellenzahlen $\{k_i\}$ die Bethe-Ansatz-Gleichungen

$$e^{iNk_i} = \prod_{j \neq i}^r \frac{e^{i(k_i + k_j)} + 1 - 2e^{ik_i}}{e^{i(k_i + k_j)} + 1 - 2e^{ik_j}}, \quad i = 1, \dots, r, \quad (2.14)$$

erfüllen. Hierin ist bereits die Translationsinvarianz des Systems berücksichtigt. Um die analytische und numerische Behandlung der Bethe-Ansatz-Gleichungen zu erleichtern, empfiehlt es sich, die Wellenzahlen $\{k_i\}$ in (2.14) durch einen Satz neuer Variablen $\{\hat{z}_i\}$ zu substituieren (FADDEEV & TAKHTAJAN, 1984; KARBACH *et al.*, 1998). Die neuen Variablen \hat{z}_i werden über die Beziehung

$$k_i = \pi - \phi(\hat{z}_i) \quad \text{mit} \quad \phi(\hat{z}_i) = 2 \cdot \arctan \hat{z}_i, \quad i = 1, \dots, r, \quad (2.15)$$

eingeführt.¹ Setzt man diese Definition der \hat{z}_i in (2.14) ein, so erhält man:

$$\left(\frac{\hat{z}_i - i}{\hat{z}_i + i} \right)^N = \prod_{j \neq i}^r \frac{\hat{z}_i - \hat{z}_j - 2i}{\hat{z}_i - \hat{z}_j + 2i}, \quad i = 1, \dots, r. \quad (2.16)$$

Diese Darstellung der Bethe-Ansatz-Gleichungen soll im folgenden als algebraische Form der Bethe-Ansatz-Gleichungen bezeichnet werden, da sie im Rahmen des algebraischen Bethe-Ansatzes in natürlicher Weise auftritt (vgl. Kapitel 2.2.2). Logarithmierung von (2.16) führt auf die trigonometrische Form der Bethe-Ansatz-Gleichungen:

$$N\phi(\hat{z}_i) = 2\pi I_i + \sum_{j \neq i}^r \phi \left(\frac{\hat{z}_i - \hat{z}_j}{2} \right), \quad i = 1, \dots, r. \quad (2.17)$$

In der trigonometrischen Form der Bethe-Ansatz-Gleichungen treten r ganz- oder halbzahlige Zahlen I_i auf, die Bethe-Quantenzahlen genannt werden (KARBACH & MÜLLER, 1997). Der Vorteil der trigonometrischen Form der Bethe-Ansatz-Gleichungen gegenüber der algebraischen Form besteht gerade in der Einführung der Bethe-Quantenzahlen, da diese zur Charakterisierung der Eigenzustände verwendet werden können (YANG & YANG, 1966; FADDEEV, 1995; KARBACH & MÜLLER, 1997). Man findet, daß die Bethe-Quantenzahlen I_i für gerades N halbzahlig sind, falls r gerade ist, und ganzzahlig, falls r ungerade ist (KARBACH *et al.*, 1998).

Um das Problem der Diagonalisierung von H_F zu lösen, müssen nun alle diejenigen Tupel (I_1, \dots, I_r) von Bethe-Quantenzahlen bestimmt werden, die zu einer reellen oder komplexen Lösung von (2.17) führen, so daß sich ein nichtverschwindender Eigenzustand von H_F ergibt. Jede solche Lösung repräsentiert einen Eigenzustand der Gestalt (2.10) mit Energie und Gesamtwellenzahl

¹Hier und im folgenden werden Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen, die sich auf das Heisenberg-Modell (XXX-Modell) beziehen, stets mit einem zusätzlichen Dach „ $\hat{}$ “ gekennzeichnet.

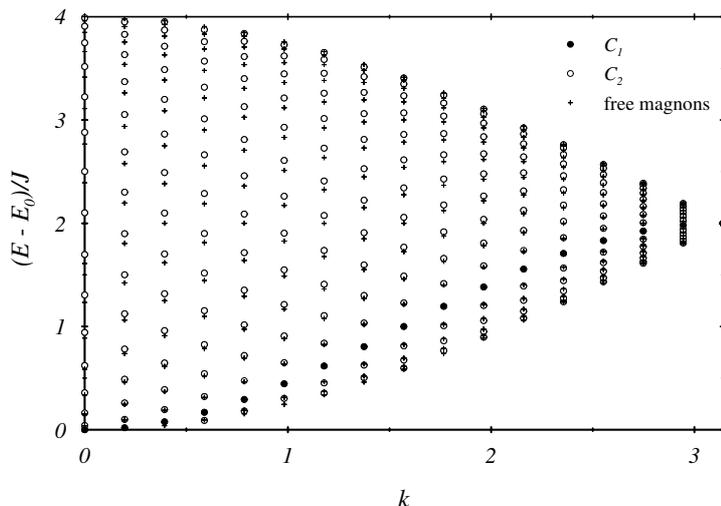


Abbildung 2.1: Anregungsspektrum der 2-Magnon-Streuzustände mit $0 \leq k \leq \pi$ (Datenpunkte C_1 und C_2) für eine Kette der Länge $N = 32$ im Vergleich zum Spektrum, das sich bei einer (hypothetischen) wechselwirkungsfreien Überlagerung zweier Magnonen ergibt. (KARBACH & MÜLLER, 1997)

$$\frac{E - E_0}{J} = \sum_{i=1}^r \frac{2}{1 + z_i^2}, \quad (2.18)$$

$$k = \sum_{i=1}^r k_i = \pi r - \frac{2\pi}{N} \sum_{i=1}^r I_i. \quad (2.19)$$

Betrachtet man die gewonnenen Resultate für allgemeines r , so stellt man fest, daß der Bethe-Ansatz aufgrund des ihm zugrunde liegenden Konstruktionsprinzips eine natürliche Klassifikation der Anregungszustände von H_F als kollektive Anregungen von r miteinander wechselwirkenden Quasiteilchen erlaubt, die mit Hilfe der Bethe-Quantenzahlen systematisch identifiziert werden können.

Hierzu wählt man aus dem $(N + 1)$ -fach entarteten Grundzustandsmultiplett den Zustand $|F\rangle$ als physikalisches Vakuum aus und interpretiert die übrigen Zustände als kollektive Anregungszustände, die sich aus r , $r = 1, \dots, N/2$, miteinander wechselwirkenden Quasiteilchen, den sogenannten Magnonen, konstituieren. Diese Magnonen werden aus dem physikalischen Vakuum $|F\rangle$ generiert. Sie haben Spin 1 und tragen die Energie $1 - \cos k_i$, vgl. (2.13), sowie den Impuls k_i (BETHE, 1931; FADDEEV & TAKHTAJAN, 1981).

Der zu $r = 1$ gehörende Unterraum wird von den 1-Magnon-Anregungen (2.8) aufgespannt. Ihre Dispersionsrelation ist durch (2.9) gegeben.

Die 2-Magnon-Anregungen, die den zu $r = 2$ gehörenden Unterraum aufspannen, werden durch die Gleichungen (2.10) ff. beschrieben, wenn man dort überall $r = 2$ setzt. Hierbei werden grundsätzlich zwei Typen von Anregungen unterschieden: Die 2-Magnon-Streuzustände (*2-magnon-scattering states*) werden durch zwei reelle Lösungen k_1 und k_2 der Bethe-Ansatz-Gleichungen (2.14) beschrieben, während die 2-Magnon-Bindungszustände (*2-magnon-bound-states*) in aller Regel durch das Auftreten eines komplex konjugierten Lösungspaars $k_1 = k_2^*$ gekennzeichnet sind (KARBACH & MÜLLER, 1997; KARBACH, 2002). Der Charakter einer Bindung bei den 2-Magnon-Bindungs-Zuständen schlägt sich insbesondere in der erhöhten Wahrscheinlichkeit nieder, daß sich die beiden umgeklappten Spins an benachbarten Gitterplätzen befinden (KARBACH & MÜLLER, 1997).

Zwischen den beiden Magnonen in einem 2-Magnon-Streuzustand kann eine dynamische Wechselwirkung beobachtet werden, die ihren Niederschlag im Auftreten einer Wechselwirkungsenergie, d.h. in

der Verschiebung der Zustandsenergie gegenüber einer äquivalenten (hypothetischen) Überlagerung zweier freier Magnonen, findet. Abb. 2.1 zeigt dies für eine Kette der Länge $N = 32$. Für $N \rightarrow \infty$ verschwindet die Energieverschiebung. Die 2-Magnon-Streuzustände bilden dann ein zweiparametriges Kontinuum zwischen den Begrenzungslinien (KARBACH & MÜLLER, 1997)

$$\frac{E - E_0}{J} = 2 \left(1 \pm \cos \frac{k}{2} \right). \quad (2.20)$$

Die 2-Magnon-Bindungszustände liegen in der (k, E) -Ebene auf einem einzigen Zweig unterhalb des Kontinuums der 2-Magnon-Streuzustände (KARBACH & MÜLLER, 1997). Bei ihnen sind die Wechselwirkungseffekte besonders stark ausgeprägt. Die Wechselwirkungsenergie verschwindet auch nicht im Grenzfall $N \rightarrow \infty$. Für $N \rightarrow \infty$ lautet die zugehörige Dispersionsrelation (BETHE, 1931):

$$\frac{E - E_0}{J} = \frac{1}{2}(1 - \cos k). \quad (2.21)$$

Mit größer werdendem r wird eine systematische Diskussion und Interpretation des Anregungsspektrums aufgrund der wachsenden Zahl wechselwirkender Teilchen zunehmend schwieriger. Dennoch lassen auch im allgemeinen Fall der r -Magnon-Anregungen die Bethe-Quantenzahlen eine systematische Charakterisierung der Anregungszustände und -spektren prinzipiell zu.

Eng verwandt mit dem eindimensionalen Heisenberg-Ferromagneten ist der Heisenberg-Antiferromagnet, auch XXX-Modell genannt. Der Hamiltonian des Antiferromagneten geht durch Vorzeichenumkehr aus dem Hamiltonian (2.1) des Ferromagneten hervor:

$$H_A = -H_F = \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}, \quad J > 0. \quad (2.22)$$

Das positive Vorzeichen ($J > 0$) legt den antiferromagnetischen Charakter der Austauschwechselwirkung fest (MATTIS, 1981; YOSIDA, 1996).

Da sich H_A und H_F nur durch ein Vorzeichen unterscheiden, haben beide Hamiltonians die gleichen Eigenvektoren. Allerdings haben die zugehörigen Eigenwerte,

$$\frac{E - E_F}{J} = - \sum_{i=1}^r \frac{2}{1 + \hat{z}_i^2}, \quad E_F = -E_0 = \frac{JN}{4}, \quad (2.23)$$

ein entgegengesetztes Vorzeichen, so daß das Anregungsspektrum beim Übergang von H_F zu H_A invertiert wird. Dies führt dazu, daß die physikalischen Eigenschaften des Antiferromagneten deutlich von denen des Ferromagneten abweichen.

Der Grundzustand $|A\rangle$ des Antiferromagneten liegt im durch $r = N/2$ festgelegten Unterraum. Das Lieb-Schultz-Mattis-Theorem (LIEB *et al.*, 1961) stellt sicher, daß $|A\rangle$ nicht entartet ist, d.h für $|A\rangle$ ist $S_T = 0$. Im Rahmen des Teilchenbildes läßt sich der antiferromagnetische Grundzustand $|A\rangle$ aus dem ferromagnetischen Grundzustand $|F\rangle$ durch die Anregung von $N/2$ Magnonen mit Wellenzahlen k_i und jetzt negativen Energien $-J(1 - \cos k_i)$ generieren. Er wird durch $N/2$ reelle Wellenzahlen k_i und folgenden Satz von Bethe-Quantenzahlen charakterisiert (HULTHÉN, 1938; YANG & YANG, 1966):

$$\{I_i^A\} = \left\{ - \left(\frac{N}{4} - \frac{1}{2} \right), - \left(\frac{N}{4} - \frac{3}{2} \right), \dots, \frac{N}{4} - \frac{1}{2} \right\}. \quad (2.24)$$

Möchte man Anregungen relativ zu $|A\rangle$ im Teilchenbild beschreiben, so stellt sich das Problem, daß in $|A\rangle$ bereits $N/2$ wechselwirkende Magnonen vorliegen und Anregungen durch die Vernichtung eines oder mehrerer Magnonen generiert werden. Dadurch liegt sowohl im Grundzustand als auch in den niedrigliegenden Anregungen stets eine große Zahl wechselwirkender Teilchen vor. Aus diesem Grund wird der antiferromagnetische Grundzustand $|A\rangle$ als (neues) physikalisches Vakuum des Antiferromagneten definiert. Aus diesem können dann wiederum elementare Quasiteilchen – die sogenannten Spinonen – zur Beschreibung der angeregten Zustände generiert werden (KARBACH *et al.*, 1998).

Das Spinon-Vakuum läßt sich am besten durch die zugehörigen Bethe-Quantenzahlen $\{I_i^A\}$, (2.24), charakterisieren, die symmetrisch um Null und dicht gepackt über einen Ausschnitt der I -Achse verteilt

sind. Das Spektrum von H_A läßt sich dann systematisch durch die Erzeugung elementarer Anregungen aufbauen, die durch elementare Modifikationen der regelmäßigen Anordnung der Bethe-Quantenzahlen für den Grundzustand $|A\rangle$ charakterisiert werden (KARBACH *et al.*, 1998).

Spinonen tragen, genauso wie Magnonen, neben Energie und Impuls einen Spin. Allerdings sind sie im Gegensatz zu den Magnonen Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen (FADDEEV & TAKHTAJAN, 1981). In einer Kette mit geradem N , bei der $S_T^z = \frac{N}{2} - r$ für alle Eigenzustände ganzzahlig ist, können Spinonen also nur paarweise auftreten. Betrachtet man nun eine 2-Spinon-Anregung von H_A , so können die Spins der beiden auftretenden Spinonen auf insgesamt vier verschiedene Arten koppeln, und so entweder einen Triplett-Zustand ($S_T = 1, S_T^z = 0, \pm 1$) oder einen Singulett-Zustand ($S_T = 0 = S_T^z$) bilden. Diese Zustände werden durch bestimmte Konfigurationen der Bethe-Quantenzahlen beschrieben. Die Erhaltung des Gesamtspins erfordert, daß die drei Zustände, die zu einem Spin-Triplett gehören, entartet sind.

Im Unterraum zu $S_T^z = 1$ ergibt sich durch die Vernichtung eines Magnons aus dem Zustand $|A\rangle$ ein zweiparametriger Satz von Zuständen, indem die verbleibenden $N/2 - 1$ Bethe-Quantenzahlen systematisch über den erweiterten Bereich $-\frac{1}{4}N \leq I_i \leq \frac{1}{4}N$ verteilt werden (FADDEEV & TAKHTAJAN, 1981; KARBACH *et al.*, 1998).

Die Anzahl der verschiedenen Konfigurationen der Bethe-Quantenzahlen $\{I_i\}$ für $S_T^z = 1$ mit $I_{i+1} - I_i \geq 1$ beträgt $\frac{1}{8}N(N+2)$. Eine typische Konfiguration besteht aus drei Clustern, zwischen denen sich zwei Lücken befinden. Die beiden Lücken in der ansonsten regelmäßigen Verteilung können als aus dem Vakuum generierte Spinonen interpretiert werden. Die Positionen der Lücken zwischen den Clustern bestimmen die Impulse bzw. Wellenzahlen p_1, p_2 der beiden Spinonen. Die Summe der beiden Impulse liefert die Wellenzahl der 2-Spinon-Anregung bezogen auf die Wellenzahl des Vakuums: $q = k - k_A = p_1 + p_2$. Für $N \rightarrow \infty$ bilden die 2-Spinon-Anregungen ein Kontinuum innerhalb der Grenzen

$$\varepsilon_U(q) = \pi J \left| \sin \frac{q}{2} \right|, \quad \varepsilon_L(q) = \frac{\pi}{2} J |\sin q| \quad (2.25)$$

(DES CLOIZEAUX & PEARSON, 1962; YAMADA, 1969). Bei allen 2-Spinon-Triplett-Anregungen mit $S_T^z = 1$ lassen sich die beiden auftretenden Spinonen als lokalisierte Störungen des Spinon-Vakuums $|A\rangle$ interpretieren, die sich entlang der Kette mit den Impulsen p_1 und p_2 sowie den Energien $\varepsilon_{sp}(p_1)$ und $\varepsilon_{sp}(p_2)$ bewegen (KARBACH *et al.*, 2000). Die Dispersionsrelation

$$\varepsilon_{sp}(p) = \frac{\pi}{2} J \sin p, \quad 0 \leq p \leq \pi \quad (2.26)$$

(DES CLOIZEAUX & PEARSON, 1962; YAMADA, 1969), ist in dem in Abb. 2.2 eingebetteten Kasten dargestellt. Die beiden Spinonen streuen in periodischen Zeitabständen aneinander, so daß die 2-Spinon-Triplett-Anregungen auch als 2-Spinon-Streuzustände bezeichnet werden (KARBACH *et al.*, 2000).

Abb. 2.2 zeigt das Anregungsspektrum der 2-Spinon-Triplett-Anregungen mit $S_T^z = 1$ für eine Kette der Länge $N = 64$. Zum Vergleich sind die Energien $\varepsilon_{sp,sp} = \varepsilon_{sp}(p_1) + \varepsilon_{sp}(p_2)$ angegeben, die sich bei einer (hypothetischen) freien Überlagerung zweier Spinonen mit Impulsen p_1 und p_2 ergeben. Man sieht, analog zum Fall der 2-Magnon-Anregungen (vgl. Abb. 2.1), daß die jeweiligen Datenpunkte gegeneinander verschoben sind. Damit spiegelt sich hier in gleicher Weise die zwischen den beiden Spinonen auftretende Wechselwirkungsenergie wider.

Mit wachsendem N werden die Streuereignisse zwischen den beiden Spinonen in einem 2-Spinon-Streuzustand seltener. Die Häufigkeit der Streuereignisse nimmt hierbei proportional zum Abstand ab, den die beiden Spinonen zwischen zwei Streuereignissen zurücklegen (KARBACH *et al.*, 2000). Aus diesem Grunde erwartet man ein Verschwinden der Wechselwirkungsenergie proportional zu N^{-1} . Die Autoren von (KARBACH *et al.*, 2000) gehen davon aus, daß sich die Wechselwirkungsenergie zwischen den beiden Spinonen, beschrieben durch

$$\Delta E_{sp,sp}^{(N)}(q) = E_{sp,sp}^{(N)} - \varepsilon_{sp,sp}, \quad (2.27)$$

asymptotisch durch

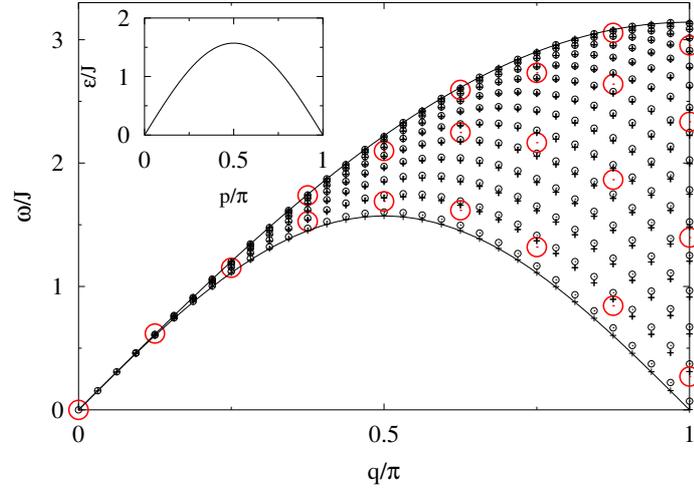


Abbildung 2.2: Anregungsspektrum der 2-Spinon-Streuzustände mit $0 \leq k \leq \pi$ und $S_T = S_T^z = 1$ für eine Kette der Länge $N = 64$ (\odot) im Vergleich zum Spektrum, das sich bei einer (hypothetischen) wechselwirkungsfreien Überlagerung zweier Spinonen ergibt (+). Die großen Kreise (\odot) zeigen die 2-Spinon-Streuzustände mit $S_T = S_T^z = 1$ für $N = 16$. Die durchgezogenen Linien sind die Kontinuumsgrenzen gemäß (2.25). Oben links ist die Dispersionsrelation der Spinonen, (2.26), eingebettet. (KARBACH, 2002)

$$\Delta E_{sp,sp}^{(N)}(q) = \frac{e_{sp}(p_1, p_2)}{N} \quad (2.28)$$

ausdrücken läßt (KARBACH *et al.*, 2000; KARBACH, 2002). Hierbei kann die Größe $e_{sp}(p_1, p_2)$ einem einzelnen 2-Körper-Stoß zwischen zwei Spinonen, die sich mit den Impulsen p_1 und p_2 bewegen, zugeordnet werden.

Bislang wurde das Spektrum der 2-Spinon-Triplett-Zustände mit $S_T = 1$ und $S_T^z = +1$ analysiert. Die 2-Spinon-Zustände mit $S_T = 1$ und $S_T^z = -1$ können aus den Zuständen mit $S_T^z = 1$ durch eine Spinflip-Transformation gewonnen werden. Diese Zustände weisen die gleichen Zusammenhänge zwischen Energie und Impuls auf wie die Zustände zu $S_T^z = +1$. Die verbleibenden beiden Sätze von 2-Spinon-Zuständen haben $S_T^z = 0$. Einer dieser beiden Sätze umfaßt Triplets mit $S_T = 1$, der andere Singulets mit $S_T = 0$.

Während alle 2-Spinon-Triplett-Zustände durch reelle Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen (2.17) beschrieben werden, werden die 2-Spinon-Singulett-Zustände durch das Auftreten eines Paares von komplex konjugierten Lösungen $\hat{z}_1 = \hat{z}_2^*$ neben den reellen Lösungen $\hat{z}_3, \dots, \hat{z}_{N/2}$ charakterisiert (KARBACH *et al.*, 1998). Es zeigt sich, daß das Auffinden der I_i -Konfigurationen für einen bestimmten Satz von Eigenzuständen mit komplexen Lösungen und die anschließende Bestimmung der Lösungen der zugehörigen Bethe-Ansatz-Gleichungen wesentlich diffiziler ist als die gleiche Aufgabe im Falle der rein reellen Lösungen (WOYNAROVICH, 1982; KARBACH *et al.*, 1998; BIEGEL, 2000).

Wie im Fall der 2-Magnon-Anregungen bedeutet das Auftreten eines komplexen Lösungspaares auch im hier betrachteten Kontext, daß ein gebundener Zustand aus zwei Magnonen vorliegt. Dementsprechend lassen sich die 2-Spinon-Singulett-Anregungen auch als gebundene Zustände (*bound states*) bezeichnen. Die Zahl der 2-Spinon-Singulets, $\frac{1}{8}N(N-2)$ innerhalb der gesamten Brillouin-Zone, ist kleiner als die Zahl der Triplett-Lösungen, $\frac{1}{8}N(N+2)$ (KARBACH *et al.*, 1998). Mit größer werdendem N wird der Einfluß des komplexen Lösungspaares auf die Zustandsenergie im Vergleich zu dem der reellen Lösungen $\hat{z}_3, \dots, \hat{z}_{N/2}$ immer geringer, und verschwindet schließlich völlig im Grenzwert $N \rightarrow \infty$. Die 2-Spinon-Singulets bilden dann ein Kontinuum innerhalb der gleichen Grenzen (2.25) wie die Triplett-Zustände (KARBACH *et al.*, 1998).

Bislang wurde das Heisenberg-Modell ohne Anwesenheit eines äußeren Magnetfeldes betrachtet. Liegt nun ein äußeres homogenes Magnetfeld der Stärke h' vor, so muß der Hamiltonian um einen Zeeman-Term ergänzt werden (KARBACH *et al.*, 1998). Im Falle des Heisenberg-Antiferromagneten geht der Hamiltonian (2.22) so über in

$$H_{A,h} = H_A - hJS_T^z, \quad h = \frac{h'}{J}. \quad (2.29)$$

Die beiden Summanden, aus denen $H_{A,h}$ aufgebaut ist, befinden sich im Widerstreit: Während der Zeeman-Term eine Ausrichtung der Spins parallel zur Vorzugsrichtung, der positiven z -Richtung, energetisch bevorzugt, kostet jede parallele Ausrichtung eines Spinpaares aufgrund des ersten Terms Austauschenergie.

Der Einbau des äußeren Magnetfeldes mittels eines Zeeman-Terms in (2.29) zerstört die Integrabilität des Modells nicht. Es gilt weiterhin $[H_{A,h}, S_T^z] = 0$, so daß die Eigenvektoren von h unabhängig sind und sich durch das Einschalten des Magnetfeldes nicht verändern. Allerdings wird die Entartung der $(2S_T + 1)$ zu einem S_T -Multipllett gehörenden Eigenzustände aufgehoben. Die Energieniveaus spalten proportional zu h auf und ordnen sich symmetrisch um ihre ursprüngliche Lage an (KARBACH *et al.*, 1998). Dementsprechend geht die Formel für die Zustandsenergie, (2.23), durch das Einschalten des äußeren Magnetfeldes über in

$$\frac{E - E_F}{J} = - \sum_{i=1}^r \left(\frac{2}{1 + \hat{z}_i^2} \right) - hS_T^z. \quad (2.30)$$

In jedem Multipllett erfährt der Zustand mit $S_T^z = S_T$ die größte Energieabnahme, d.h. im Spektrum wird dieser Zustand am stärksten nach unten verschoben. Das Ausmaß der Verschiebung ist per Konstruktion proportional zu S_T . Der vorher nicht-entartete Zustand $|A\rangle$ mit $S_T = 0$ wird hierbei überhaupt nicht verschoben, während der Zustand $|F\rangle$ mit $S_T = N/2$ stärker als alle Zustände absteigt. Dies führt dazu, daß der Zustand $|F\rangle$, obwohl er sich für $h = 0$ am oberen Ende des Spektrums befindet, zum Grundzustand von $H_{A,h}$ wird, sofern nur ein ausreichend starkes Magnetfeld angelegt wird. Das Magnetfeld h_S , „where $|F\rangle$ overtakes its closest competitor in the race of levels down the energy axis“ (KARBACH *et al.*, 1998), wird als Sättigungsfeld bezeichnet.

Die Reihenfolge, in der Eigenzustände mit der Quantenzahl S_T^z bei einem Anwachsen von h zum Grundzustand $|\psi_0\rangle$ von $H_{A,h}$ werden, hängt von ihrer relativen Ausgangsposition für $h = 0$ ab. Wird der Grundzustand von einem Zustand mit Quantenzahl S_T^z gebildet, so spricht man davon, daß die Magnetisierung $M_z = S_T^z$ vorliegt (KARBACH *et al.*, 1998). In (YANG & YANG, 1966) wird gezeigt, daß die Bethe-Quantenzahlen $\{I_i^0\}$ des Grundzustandes $|\psi_0\rangle$ zu einem festen M_z durch

$$I_i^0 = -\frac{1}{2} \left(\frac{N}{2} - M_z + 1 \right) + i, \quad i = 1, \dots, r = \frac{N}{2} - M_z, \quad (2.31)$$

gegeben sind. Setzt man hierin $M_z = 0$, so folgt (2.24) für den magnetfeldfreien Fall.

Die Magnetisierung M_z wächst zwischen $h = 0$ und dem Sättigungsfeld $h_S = 2J$ (KARBACH *et al.*, 1998) in $N/2$ Schritten der Größe $1/N$ von $M_z = 0$ bis $M_z = N/2$ an. Erhöht man h , so werden wegen (2.5) bei jedem dieser Schritte für den Grundzustand $|\psi_0\rangle$ zwei Spinonen neu erzeugt bzw. ein Magnon vernichtet. Damit bewegt sich für $h \neq 0$ im Grundzustand eine makroskopische Zahl ($\mathcal{O}(N)$) von Spinonen durch das System. Die Zahl der Streueignisse ist groß und die auftretende Wechselwirkungsenergie zwischen den Spinonen verschwindet im Grenzfall $N \rightarrow \infty$ nicht, da die Dichte der Spinonen endlich bleibt. Damit ist es nicht möglich, das Spektrum der niedrigliegenden Anregungen aus der Dispersionsrelation (2.26) der freien Spinonen zu rekonstruieren (KARBACH *et al.*, 1998). Betrachtet man statt der Spinonen die in $|\psi_0\rangle$ vorhandenen Magnonen, so ist man mit demselben Problem konfrontiert: Die Zahl der Magnonen im Grundzustand $|\psi_0\rangle$ und den niedrigliegenden Anregungen ist ebenfalls makroskopisch von $\mathcal{O}(N)$. Die Wechselwirkungsenergie zwischen den Magnonen bleibt auch im Grenzfall $N \rightarrow \infty$ endlich, so daß es nicht möglich ist, Informationen über das Spektrum der niedrigliegenden Anregungen aus der Dispersionsrelation (2.9) der freien Magnonen zu gewinnen (KARBACH *et al.*, 1998).

Aus diesen Gründen bietet es sich an, analog zur Einführung der Spinonen den Zustand $|\psi_0\rangle$, der als Zustand mit $N/2 - M_z$ Magnonen oder als Zustand mit $2M_z$ Spinonen interpretiert werden kann, als

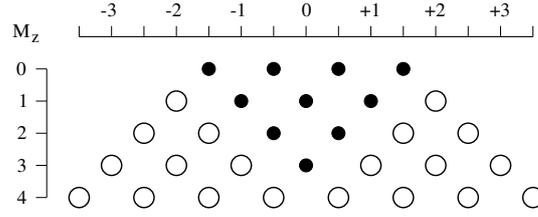


Abbildung 2.3: Konfigurationen der Bethe-Quantenzahlen I_i^0 (●) für das jeweilige Psinon-Vakuum $|\psi_0\rangle$ zu den Magnetisierungen $M_z = 0, 1, \dots, 4$ für eine Kette der Länge $N = 8$. Jede Bethe-Quantenzahl (●) repräsentiert ein Magnon, jede Lücke (○) ein Spinon. (KARBACH *et al.*, 2000)

neues physikalisches Vakuum für eine neue Klasse von Quasiteilchen, die sogenannten Psinonen, zu definieren (KARBACH *et al.*, 1998; KARBACH & MÜLLER, 2000; KARBACH, 2002; KARBACH *et al.*, 2002). Die elementaren Anregungen können dann bezüglich dieses Vakuums konstruiert werden, indem man die regelmäßige Anordnung der Bethe-Quantenzahlen $\{I_i^0\}$ systematisch modifiziert.

Zu diesem Zweck führt man eine Klasse K_r von Eigenzuständen ein, für die die zugehörigen Bethe-Quantenzahlen I_i für $0 \leq r \leq N/2$ und $0 \leq m \leq N/2 - r = M_z$ alle Konfigurationen

$$-\frac{r}{2} + \frac{1}{2} - m \leq I_1 < I_2 < \dots < I_r \leq \frac{r}{2} - \frac{1}{2} + m \quad (2.32)$$

umfassen (KARBACH *et al.*, 1998). Jeder Eigenzustand aus K_r wird durch reelle Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen (2.17) beschrieben. $m \in \mathbb{N}$ läßt sich in diesem Kontext als eine Art magnetische Quantenzahl interpretieren. Für festes m kann ein Zustand aus K_r als Streuzustand mit m Paaren von Psinonen interpretiert werden (KARBACH *et al.*, 1998), es liegt dann also ein $2m$ -Psinon-Streuzustand vor.

Für $M_z = 0$ fällt das Psinon-Vakuum mit dem Spinon-Vakuum und für $M_z = N/2$ (Saturierung) mit dem Magnon-Vakuum zusammen. Die Transformation des Psinon-Vakuums vom Spinon-Vakuum zum Magnon-Vakuum beim Anwachsen der Magnetisierung ist in Abb. 2.3 für eine Kette der Länge $N = 8$ dargestellt. In der dritten Reihe von Abb. 2.3 findet sich die Konfiguration des Psinon-Vakuums bei halber Sättigung, d.h. $M_z = N/4$ (man spricht hier auch von Viertelmagnetisierung). Hier liegen doppelt so viele Spinonen wie Magnonen vor. Dieser Fall ist von besonderem Interesse, da er sich genau in der Mitte zwischen $M_z = 0$ und Sättigung, zwischen Spinon- und Magnon-Vakuum befindet. Das Psinon-Vakuum $|\psi_0\rangle$ ist der einzige Zustand mit $m = 0$. Die Bethe-Quantenzahlen liegen symmetrisch um Null und sind dicht gepackt über den durch (2.32) bzw. (2.31) gegebenen Ausschnitt der I -Achse verteilt. Geht man in (2.32) von $m = 0$ zu $m = 1$ über, so erhält man die 2-Psinon-Anregungen. Die Konfigurationen der Bethe-Quantenzahlen bestehen hier typischerweise aus drei Clustern, zwischen denen sich zwei Lücken, d.h. Spinonen, befinden. Diese beiden inneren Spinonen übernehmen nun die Rolle der Psinonen. Die übrigen $2M_z - 2$ Spinonen verbleiben außerhalb der beiden äußeren Cluster. Beim Übergang zu $m = 2$ werden zwei weitere Spinonen in Psinonen transformiert. So lassen sich systematisch alle $2m$ -Psinon-Anregungen generieren (KARBACH *et al.*, 1998).

Abb. 2.4 zeigt das Spektrum der 2-Psinon-Anregungen für $M_z = N/4$ für zwei Ketten der Länge $N = 16$ und $N = 64$. Im Grenzwert $N \rightarrow \infty$ bilden die Anregungen ein Kontinuum innerhalb der in der Abbildung eingezeichneten Grenzen. Das 2-Psinon-Spektrum ist auf den Impulsbereich $|q| \leq q_s$ mit

$$q_s = \pi \left(1 - 2 \frac{M_z}{N} \right) \quad (2.33)$$

beschränkt (KARBACH *et al.*, 1998). Die ebenfalls in Abb. 2.4 gezeigte Dispersionsrelation der Psinonen, $\varepsilon_\psi(p)$, läßt sich aus den Kontinuumsgrenzen ableiten, sofern man verlangt, daß sich Wellenzahl und Energie eines jeden 2-Psinon-Zustands im Grenzwert $N \rightarrow \infty$ als $q = p_1 + p_2$ bzw. $\varepsilon_{\psi,\psi} = \varepsilon_\psi(p_1) + \varepsilon_\psi(p_2)$ schreiben lassen – ganz analog zu den 2-Spinon-Anregungen. Die zwei Bögen, die die untere Grenze des Kontinuums in Abb. 2.4 bilden, ergeben sich dann durch die Transformation $\varepsilon_\psi(q \pm \pi/4)$ (KARBACH *et al.*, 1998).

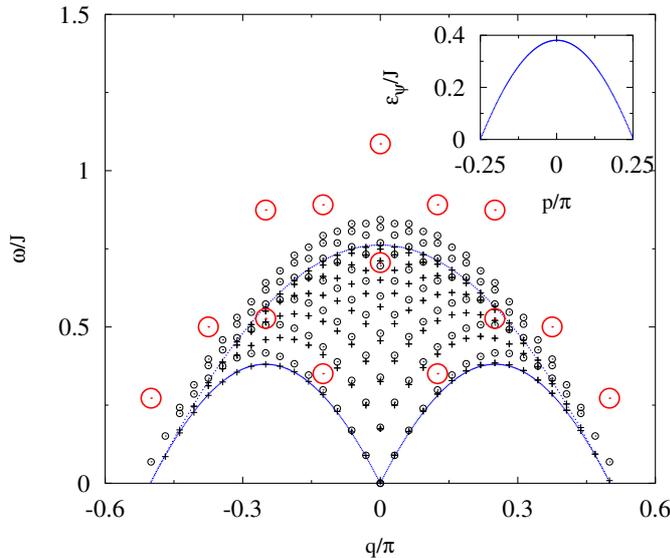


Abbildung 2.4: Spektrum der 2-Psinon-Anregungen für $M_z = N/4$ für eine Kette der Länge $N = 64$ (kleine Kreise, \odot) im Vergleich zum Spektrum, das sich bei (hypothetischer) wechselwirkungsfreier Überlagerung zweier Psinonen ergibt (+). Die großen Kreise (\oplus) zeigen die 2-Psinon-Anregungen für $N = 16$. Die eingezeichneten Kontinuumsgrenzen wurden aus den Daten zu $N = 2048$ abgeleitet. Oben rechts ist die Dispersionsrelation der Psinonen eingebettet. (KARBACH, 2002)

Für Ketten endlicher Länge tritt aufgrund der Streuprozesse zwischen den beiden Psinonen eine Wechselwirkungsenergie auf, die sich – analog zu den Magnon- und Spinon-Anregungen – wieder durch einen Vergleich der Zustandsenergien mit den Energien für die (hypothetische) wechselwirkungsfreie Überlagerung zweier freier Psinonen beobachten läßt. In Abb. 2.4 ist dies deutlich zu erkennen. Analog zu den 2-Spinon-Anregungen verschwindet diese Wechselwirkungsenergie proportional zu N^{-1} (KARBACH *et al.*, 1998). Dies ist ein weiterer Hinweis darauf, daß die Einführung der Psinonen (und des Psinon-Vakuums) für den Fall $h \neq 0$ zweckmäßig ist.

2.2 Quanteninverse Streutheorie und der algebraische Bethe-Ansatz

Die Ursprünge des algebraischen Bethe-Ansatzes liegen in dem Versuch, die klassische inverse Streutheorie (*classical inverse scattering method*, CISM) zu quantisieren und so quantenmechanischen Mehrkörperproblemen zugänglich zu machen. Die klassische inverse Streutheorie ist ein etabliertes Verfahren zur Lösung von partiellen Differentialgleichungen, wie sie in den unterschiedlichsten Bereichen der Physik auftreten. Sie wurde erstmals 1967 von Gardner, Greene, Kruskal und Miura bei ihrer Untersuchung der Korteweg-deVries-Gleichung angewandt (GARDNER *et al.*, 1967). Eine Übersicht über das Verfahren findet sich beispielsweise in (FADDEEV & TAKHTAJAN, 1987).

Das quantenmechanische Pendant zu CISM, die quanteninverse Streutheorie (*quantum inverse scattering method*, QISM), wurde um 1980 von Faddeev, Sklyanin und Takhtajan eingeführt (SKLYANIN & FADDEEV, 1978; SKLYANIN *et al.*, 1979; SKLYANIN, 1982). Die quanteninverse Streutheorie verbindet die Ideen des Bethe-Ansatzes mit denen der klassischen inversen Streutheorie. Sie ermöglicht eine einheitliche Sichtweise im Hinblick auf die exakte Lösung von klassischen und quantenmechanischen Modellen und schließt an die Arbeiten von Baxter zur Lösung von klassischen Vertexmodellen mit Hilfe der Transfermatrixmethode an (BAXTER, 1982). Eine Übersicht über QISM und die Modelle, auf die die Methode angewandt werden kann, findet sich beispielsweise in (KOREPIN *et al.*, 1993).

Im folgenden soll die Anwendung der quanteninversen Streutheorie auf das XXX-Modell mit periodischen Randbedingungen skizziert werden. Für eine ausführliche Herleitung und Diskussion sei auf

die bereits genannte Übersichtsliteratur sowie auf (TAKHTADZHAN & FADDEEV, 1979; FADDEEV & TAKHTAJAN, 1984) verwiesen.

2.2.1 Die Transfermatrix

Die zentrale Idee von QISM besteht darin, eine Schar von sogenannten Transfermatrizen $T(\hat{z})$, $\hat{z} \in \mathbb{C}$, zu konstruieren (BAXTER, 1982), die für jeden Wert des Scharparameters \hat{z} miteinander und mit dem Hamiltonoperator H (und gegebenenfalls weiteren Observablen) des interessierenden quantenmechanischen Systems kommutieren:

$$[T(\hat{z}), T(\hat{z}')] = 0, \quad (2.34)$$

$$[T(\hat{z}), H] = 0. \quad (2.35)$$

Gelingt dies und ist man ferner in der Lage, die Eigenwerte und Eigenfunktionen der Transfermatrix zu konstruieren, so hat man wegen (2.35) gleichzeitig das Eigenwertproblem für den Hamiltonian des eigentlich interessierenden Systems gelöst.

Der Hamiltonian (2.22) des Spin-1/2 XXX-Modells ist aus lokalen Spinvariablen $\vec{S}_{(i)} = \vec{\sigma}_{(i)}/2$ aufgebaut, deren Komponenten die Paulimatrizen σ^j , $j = 1, 2, 3$, bilden. Diese Variablen operieren auf einem lokalen Hilbertraum der Dimension 2, $h_i \cong \mathbb{C}^2$, $i = 1, \dots, N$. Der Hamiltonian insgesamt operiert auf einem Hilbertraum der Dimension 2^N , der sich als Tensorprodukt aller lokalen Hilberträume schreiben läßt:

$$\mathcal{H} = h_1 \otimes h_2 \otimes \dots \otimes h_N = \bigotimes_{i=1}^N h_i. \quad (2.36)$$

Die lokalen Spinvariablen \vec{S}_i operieren auf dem Hilbertraum \mathcal{H} gemäß der Vorschrift

$$\vec{S}_i = \mathbb{I}_1 \otimes \dots \otimes \mathbb{I}_{i-1} \otimes \vec{S} \otimes \mathbb{I}_{i+1} \otimes \dots \otimes \mathbb{I}_N. \quad (2.37)$$

Hierbei bezeichnet \mathbb{I}_i den Einheitsoperator auf dem entsprechenden lokalen Hilbertraum. Für die weiteren Betrachtungen ist es noch wichtig festzuhalten, daß sich der Hamiltonian (2.22) als Summe über Permutationsoperatoren schreiben läßt. Der Permutationsoperator $\mathbb{P}_{i,i+1}$ vertauscht die Spins an den Plätzen i und $i+1$ und ist durch

$$\mathbb{P}_{i,i+1} = \frac{1}{2} (\mathbb{I}_i \otimes \mathbb{I}_{i+1} + \vec{\sigma}_i \otimes \vec{\sigma}_{i+1}) = 2\vec{S}_i \vec{S}_{i+1} + \frac{1}{2} \quad (2.38)$$

gegeben (FADDEEV, 1995; BIEGEL, 2000). Damit geht (2.22) über in

$$H_A = \frac{J}{2} \sum_{i=1}^N \left(\mathbb{P}_{i,i+1} - \frac{1}{2} \right). \quad (2.39)$$

Im allgemeinen Fall beschreibt \mathbb{P} eine Permutation in $V_i \otimes V_j$ mit $V_i, V_j \cong \mathbb{C}^2$ und operiert dort gemäß

$$\mathbb{P}_{i,j}(A \otimes B) = B \otimes A, \quad A \in V_i, B \in V_j. \quad (2.40)$$

$\mathbb{P}_{i,j}$ ist offensichtlich invariant unter der Vertauschung der Indizes i und j und erfüllt zusätzlich die Relationen (FADDEEV, 1996)

$$\mathbb{P}_{k,i} \mathbb{P}_{k,j} = \mathbb{P}_{i,j} \mathbb{P}_{k,i} = \mathbb{P}_{k,j} \mathbb{P}_{j,i}. \quad (2.41)$$

Der erste Schritt bei der Konstruktion der Transfermatrix für das XXX-Modell besteht in der Einführung sogenannter Lax-Operatoren $L_{i,a}(\hat{z})$ (KOREPIN *et al.*, 1993), die auf dem lokalen Hilbertraum $h_i \otimes V$ operieren. In dieser Nomenklatur wird h_i als lokaler Quantenraum und $V \cong \mathbb{C}^2$ als Hilfsraum bezeichnet, vgl. auch (TAKHTADZHAN & FADDEEV, 1979; BAXTER, 1982). Im Falle der Spin-1/2

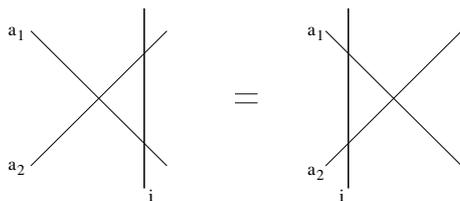


Abbildung 2.5: Grafische Darstellung der zentralen Vertauschungsrelation (Yang-Baxter-Relation)

Modelle haben die lokalen Quantenräume und der Hilfsraum stets die gleiche Dimension, im allgemeinen Fall eines Spin- s Modells hat man hingegen $h_i \cong \mathbb{C}^{2s+1}$. Im hier interessierenden Fall sind die Lax-Operatoren wie folgt gegeben (FADDEEV, 1995)²:

$$L_{i,a}(\hat{z}) = \hat{z}(\mathbf{I}_i \otimes \mathbf{I}_a) + \imath(\vec{\sigma}_i \otimes \vec{\sigma}_a) \quad (2.42)$$

$$= (\hat{z} - \imath)\mathbf{I}_{h_i \otimes V} + 2\imath\mathbb{P}_{i,a} \quad (2.43)$$

$$= \begin{pmatrix} \hat{z}\mathbf{I}_i + \imath\sigma_i^3 & \imath\sigma_i^- \\ \imath\sigma_i^+ & \hat{z}\mathbf{I}_i - \imath\sigma_i^3 \end{pmatrix} = L_i(\hat{z}) \quad (2.44)$$

mit $\sigma_i^\pm = \sigma_i^1 \pm \imath\sigma_i^2$. Hierbei bezieht sich der Index i weiterhin auf die lokalen Quantenräume, während sich der Index a auf den Hilfsraum V bezieht. Die Darstellung (2.44) beschreibt den Lax-Operator als 2×2 -Matrix im Hilfsraum V , deren Einträge Operatoren im lokalen Quantenraum h_i sind, die entsprechend jeweils als 2×2 -Matrizen in h_i dargestellt werden können. Wählt man die Darstellung (2.44), so kann der Index a , der den Hilfsraum kennzeichnet, unterdrückt werden.

Im nächsten Schritt müssen die Vertauschungsrelationen zwischen den Lax-Operatoren bestimmt werden. Da sich jeder Lax-Operator als 4×4 -Matrix über $h_i \otimes V$ darstellen läßt, bedeutet dies, Vertauschungsrelationen für insgesamt 16 Matrixelemente zu finden. Alle diese Vertauschungsrelationen lassen sich in folgender kompakter Form schreiben (TAKHTADZHAN & FADDEEV, 1979; FADDEEV & TAKHTAJAN, 1984):

$$R(\hat{z} - \hat{z}') \cdot [L_i(\hat{z}) \otimes L_i(\hat{z}')] = [L_i(\hat{z}') \otimes L_i(\hat{z})] \cdot R(\hat{z} - \hat{z}'). \quad (2.45)$$

Die zentrale Vertauschungsrelation (2.45) (FADDEEV, 1996) ist eine Gleichung in $V \otimes V \otimes h_i$. Sie gehört zur Familie der Yang-Baxter-Gleichungen (BAXTER, 1982; KOREPIN *et al.*, 1993). R ist eine 4×4 -Matrix über $V \otimes V$, die die Vertauschungsrelationen zwischen den Matrixelementen der Lax-Operatoren festlegt. Die zentrale Vertauschungsrelation läßt sich sehr einfach grafisch veranschaulichen (FADDEEV, 1995). Hierzu stellt man den Lax-Operator in Form zweier gekreuzter Linien dar, von denen eine den lokalen Quantenraum mit Index i repräsentiert, die andere den Hilfsraum, z.B. mit Index a_1 . Dann läßt sich die linke Seite von (2.45) wie in Abb. 2.5 gezeigt darstellen und man erhält die rechte Seite von (2.45), indem man die Hilbertraumlinie über den Kreuzungspunkt der beiden Hilfsraumlinien verschiebt.

Im Falle des XXX-Modells ist die R -Matrix gegeben durch

$$R(\hat{z}) = \frac{1}{\hat{z} + 2\imath} (2\imath\mathbf{I}_{V \otimes V} + \hat{z}\mathbb{P}_{V \otimes V}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(\hat{z}) & c(\hat{z}) & 0 \\ 0 & c(\hat{z}) & b(\hat{z}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.46)$$

(FADDEEV & TAKHTAJAN, 1984; FADDEEV, 1995) mit

²Der Zusammenhang zwischen dem hier verwendeten Parameter \hat{z} und dem in (FADDEEV & TAKHTAJAN, 1984; FADDEEV, 1995; FADDEEV, 1996) verwendeten Parameter λ ist durch $\lambda = \hat{z}/2$ gegeben.

$$b(\hat{z}) = \frac{2\iota}{\hat{z} + 2\iota}, \quad c(\hat{z}) = \frac{\hat{z}}{\hat{z} + 2\iota}. \quad (2.47)$$

Im letzten Schritt kann nun die Transfermatrix konstruiert werden. Dazu bemerkt man zunächst, daß sich die Wirkung der Lax-Operatoren auf einfache Weise geometrisch interpretieren läßt. Der Lax-Operator $L_i(\hat{z})$ kann als Link entlang der Spinkette interpretiert werden, der den Transport zwischen den Gitterplätzen i und $i + 1$ via der Lax-Gleichung

$$\psi_{i+1} = L_i(\hat{z})\psi_i, \quad \psi_i = \begin{pmatrix} \psi_i^1 \\ \psi_i^2 \end{pmatrix}, \quad \psi_i^1, \psi_i^2 \in \mathcal{H}, \quad (2.48)$$

beschreibt (KOREPIN *et al.*, 1993; FADDEEV, 1996). Das geordnete Operatorprodukt entlang der gesamten Kette beschreibt demnach eine einmalige Umrundung der zum Ring geschlossenen Kette („*monodromy around [... the] circle*“ (FADDEEV, 1996)). Der zugehörige Operator $T(\hat{z})$ heißt Monodromie-Matrix (*monodromy matrix*):

$$\mathcal{T}(\hat{z}) = L_N(\hat{z}) \cdot L_{N-1}(\hat{z}) \cdots L_1(\hat{z}). \quad (2.49)$$

In dieser Darstellung ist die Monodromie-Matrix eine 2×2 -Matrix über dem Hilfsraum. Konstruktionsbedingt erfüllt sie die gleichen Vertauschungsregeln (2.45) wie die Lax-Operatoren:

$$R(\hat{z} - \hat{z}') \cdot [\mathcal{T}(\hat{z}) \otimes \mathcal{T}(\hat{z}')] = [\mathcal{T}(\hat{z}') \otimes \mathcal{T}(\hat{z})] \cdot R(\hat{z} - \hat{z}'). \quad (2.50)$$

Die Transfermatrix $T(\hat{z})$ folgt aus der Monodromie-Matrix $\mathcal{T}(\hat{z})$ durch Spurbildung über dem Hilfsraum (TAKHTADZHAN & FADDEEV, 1979):

$$T(\hat{z}) = \text{tr} \mathcal{T}(\hat{z}). \quad (2.51)$$

Beschreibt man die Monodromie-Matrix durch

$$\mathcal{T}(\hat{z}) = \begin{pmatrix} A(\hat{z}) & B(\hat{z}) \\ C(\hat{z}) & D(\hat{z}) \end{pmatrix}, \quad (2.52)$$

so ist die Transfermatrix folglich durch

$$T(\hat{z}) = A(\hat{z}) + D(\hat{z}) \quad (2.53)$$

gegeben. $A(\hat{z})$, $B(\hat{z})$, $C(\hat{z})$ und $D(\hat{z})$ sind Operatoren in \mathcal{H} . Die Vertauschungsrelation (2.50) stellt sicher, daß $T(\hat{z})$ und $T(\hat{z}')$ für jeden Wert des Parameters \hat{z} bzw. \hat{z}' miteinander kommutieren. Damit ist (2.34) erfüllt. Nun muß noch der Zusammenhang mit dem Hamiltonian (2.22) des XXX-Modells gefunden werden.

Dazu betrachtet man den Lax-Operator (2.43) an der Stelle $\hat{z} = \iota$. Für diesen Wert des Parameters hat der Operator die einfache Gestalt

$$L_{i,a}(\hat{z} = \iota) = 2\iota \mathbb{P}_{i,a}. \quad (2.54)$$

Dies überträgt sich entsprechend auf die Transfermatrix (2.51):

$$T(\hat{z} = \iota) = (2\iota)^N \text{tr}(\mathbb{P}_{N,a} \cdot \mathbb{P}_{N-1,a} \cdots \mathbb{P}_{1,a}). \quad (2.55)$$

Berücksichtigt man nun die in (2.41) zusammengestellten Eigenschaften des Permutationsoperators sowie zusätzlich $\text{tr} \mathbb{P}_{i,a} = \mathbb{I}_i$ (FADDEEV, 1996), so folgt aus (2.55):

$$T(\hat{z} = \iota) = (2\iota)^N \mathbb{P}_{N,N-1} \mathbb{P}_{N-1,N-2} \cdots \mathbb{P}_{2,1} = (2\iota)^N \mathbb{T}. \quad (2.56)$$

Für $\hat{z} = \iota$ entspricht die Transfermatrix also bis auf einen Vorfaktor gerade dem in Kapitel 2.1 eingeführten Translationsoperator \mathbb{T} . Leitet man die Transfermatrix (2.51) zunächst nach dem Parameter \hat{z} ab und setzt dann $\hat{z} = \iota$, so erhält man

$$\left. \frac{dT}{d\hat{z}} \right|_{\hat{z}=\iota} = (2\iota)^{N-1} \sum_{i=1}^N \text{tr}_i(\mathbb{P}_{N,a} \cdots \mathbb{P}_{i-1,a} \cdot \mathbb{P}_{i+1,a} \cdots \mathbb{P}_{1,a}). \quad (2.57)$$

Führt man nun (2.39), (2.56) und (2.57) zusammen, so findet man schließlich (TAKHTADZHAN & FADDEEV, 1979; FADDEEV, 1995):

$$H_A = J \left[\iota \left. \frac{d}{d\hat{z}} \ln T(\hat{z}) \right|_{\hat{z}=\iota} - \frac{N}{4} \right]. \quad (2.58)$$

Man erhält den Hamiltonian des XXX-Modells also im wesentlichen als logarithmische Ableitung der Transfermatrix an der Stelle $\hat{z} = \iota$. Damit kommutiert H_A aber mit der Schar der Transfermatrizen (KOREPIN *et al.*, 1993) und (2.35) ist erfüllt. Damit sind alle Voraussetzungen für die Lösung des Eigenwertproblems erfüllt.

2.2.2 Der algebraische Bethe-Ansatz

Die Idee zur Lösung des Eigenwertproblems besteht darin, einen Referenzzustand – auch Pseudovakuum (KOREPIN *et al.*, 1993) oder *highest weight state* (KOREPIN *et al.*, 1993; FADDEEV, 1996) genannt – sowie einen Erzeugungsoperator zu finden, so daß die Eigenzustände der Transfermatrix durch (mehrfache) Anwendung des Erzeugungsoperators auf den Referenzzustand erzeugt werden können. Man geht hierzu von dem bereits in Kapitel 2.1 eingeführten Zustand $|F\rangle$,

$$|F\rangle = |\uparrow \dots \uparrow\rangle = \bigotimes_{i=1}^N |\uparrow\rangle_i, \quad (2.59)$$

aus und zeigt, daß dieser ein Eigenzustand der Transfermatrix (2.53) ist. Da stets $S_i^+ |\uparrow\rangle_i = 0$ gilt, findet man zunächst, daß aufgrund des Aufbaus der Monodromiematrix (2.52) aus Lax-Operatoren, vgl. (2.49), auch stets $C(\hat{z})|F\rangle = 0$ für alle Werte von \hat{z} gilt. Ausgehend von der Darstellung (2.44) für den Lax-Operator und (2.52) für die Monodromie-Matrix kann man nun schließen, daß $L_i(\hat{z})|\uparrow\rangle_i$ und $\mathcal{T}(\hat{z})|F\rangle$ jeweils obere Dreiecksmatrizen sind (FADDEEV, 1996):

$$L_i(\hat{z})|\uparrow\rangle_i = \begin{pmatrix} \hat{z} + \iota & * \\ 0 & \hat{z} - \iota \end{pmatrix} |\uparrow\rangle_i, \quad \mathcal{T}(\hat{z})|F\rangle = \begin{pmatrix} (\hat{z} + \iota)^N & ** \\ 0 & (\hat{z} - \iota)^N \end{pmatrix} |F\rangle. \quad (2.60)$$

Hierbei bezeichnen * und ** Operatorausdrücke, die für die weitere Herleitung irrelevant sind. Mit (2.51) folgt aus (2.60), daß $|F\rangle$ ein Eigenzustand der Transfermatrix ist mit

$$T(\hat{z})|F\rangle = [(\hat{z} + \iota)^N + (\hat{z} - \iota)^N] |F\rangle. \quad (2.61)$$

Als nächstes läßt sich nun zeigen, daß der Operator $B(\hat{z})$ die Rolle des Erzeugungsoperators übernehmen kann (analog hierzu übernimmt $C(\hat{z})$ die Rolle eines Vernichtungsoperators). Dazu betrachtet man einen Zustand der Form

$$|\psi_{\{\hat{z}_i\}}\rangle = B(\hat{z}_1)B(\hat{z}_2) \cdots B(\hat{z}_r)|F\rangle = \prod_{i=1}^r B(\hat{z}_i)|F\rangle, \quad r \leq N. \quad (2.62)$$

Um die Eigenwertgleichung

$$T(\hat{z})|\psi_{\{\hat{z}_i\}}\rangle = \varphi(\hat{z}, \{\hat{z}_i\}) |\psi_{\{\hat{z}_i\}}\rangle \quad (2.63)$$

auswerten zu können, müssen die Vertauschungsrelationen zwischen $A(\hat{z})$, $B(\hat{z})$ und $D(\hat{z})$ bekannt sein. Die benötigten Vertauschungsrelationen folgen aber unmittelbar aus (2.50) (FADDEEV & TAKHTAJAN, 1984; FADDEEV, 1996):

$$[B(\hat{z})B(\hat{z}')] = 0, \quad (2.64)$$

$$A(\hat{z})B(\hat{z}') = \frac{1}{c(\hat{z}' - \hat{z})}B(\hat{z}')A(\hat{z}) - \frac{b(\hat{z}' - \hat{z})}{c(\hat{z}' - \hat{z})}B(\hat{z})A(\hat{z}'), \quad (2.65)$$

$$D(\hat{z})B(\hat{z}') = \frac{1}{c(\hat{z} - \hat{z}')}B(\hat{z}')D(\hat{z}) - \frac{b(\hat{z} - \hat{z}')}{c(\hat{z} - \hat{z}')}B(\hat{z})D(\hat{z}'), \quad (2.66)$$

mit den in (2.47) definierten Funktionen $b(\hat{z})$ und $c(\hat{z})$. Aus (2.64) folgt, daß der Zustand $|\psi_{\{\hat{z}_i\}}\rangle$ symmetrisch in den Parametern \hat{z}_i ist. Ferner folgt aus (2.65) und (2.66), daß $|\psi_{\{\hat{z}_i\}}\rangle$ ein Eigenvektor von $A(\hat{z})$ und $D(\hat{z})$ wäre, sofern jeweils der zweite Summand auf der rechten Seite von (2.65) und (2.66) nicht vorhanden wäre. Fordert man nun, daß diese Terme wegfallen, so führt dies auf ein System von transzendenten Gleichungen, die die Parameter \hat{z}_i , $i = 1, \dots, r$, erfüllen müssen (FADDEEV & TAKHTAJAN, 1984; KOREPIN *et al.*, 1993; FADDEEV, 1996):

$$\left(\frac{\hat{z}_i - \iota}{\hat{z}_i + \iota}\right)^N = \prod_{j \neq i}^r \frac{\hat{z}_i - \hat{z}_j - 2\iota}{\hat{z}_i - \hat{z}_j + 2\iota}, \quad i = 1, \dots, r. \quad (2.67)$$

Sind die Parameter \hat{z}_i Lösungen von (2.67), dann ist $|\psi_{\{\hat{z}_i\}}\rangle$ Eigenzustand der Transfermatrix mit Eigenwert (FADDEEV, 1996)

$$\varphi(\hat{z}, \{\hat{z}_i\}) = (\hat{z} + \iota)^N \prod_{i=1}^r \left(\frac{\hat{z}_i - \hat{z} + 2\iota}{\hat{z}_i - \hat{z}}\right) + (\hat{z} - \iota)^N \prod_{i=1}^r \left(\frac{\hat{z}_i - \hat{z} - 2\iota}{\hat{z}_i - \hat{z}}\right). \quad (2.68)$$

Das im Rahmen der quanteninversen Streutheorie abgeleitete Gleichungssystem (2.67) ist identisch mit den in Kapitel 2.1 gefundenen Bethe-Ansatz-Gleichungen (2.16) für das XXX-Modell. Die jeweiligen Herleitungen unterscheiden sich allerdings grundsätzlich. Im Rahmen von QISM erfolgt die Herleitung von (2.67) mit algebraischen Methoden. Im Mittelpunkt stehen die Transfermatrix und die Vertauschungsrelationen ihrer Elemente. Der ursprünglich 1931 von Bethe vorgestellten Herleitung von (2.16) liegt hingegen ein konkreter Ansatz für die Eigenvektoren zugrunde, in den die Koordinatendarstellungen der lokalen Spin-Operatoren explizit eingehen. Aus diesem Grunde wird mittlerweile zwischen dem Koordinaten-Bethe-Ansatz und dem algebraischen Bethe-Ansatz unterschieden (KOREPIN *et al.*, 1993; FADDEEV, 1996).

Die Eigenwerte des Hamiltonians (2.22) des XXX-Modells folgen aus den Eigenwerten der Transfermatrix, indem man den Zusammenhang (2.58) zwischen der Transfermatrix und dem Hamiltonian ausnutzt (FADDEEV & TAKHTAJAN, 1984). So erhält man (2.23) aus (2.68) via

$$E = J \left[\iota \frac{d}{d\hat{z}} \ln \varphi(\hat{z}, \{\hat{z}_i\}) \Big|_{\hat{z}=\iota} - \frac{N}{4} \right] = J \left[- \sum_{i=1}^r \frac{2}{1 + \hat{z}_i^2} + \frac{N}{4} \right]. \quad (2.69)$$

Den algebraischen Bethe-Ansatz für das in den folgenden Kapiteln diskutierte XXZ-Modell erhält man aus den hier für das XXX-Modell vorgestellten Formeln, indem man die Elemente der Lax-Operatoren und der R -Matrix entsprechend modifiziert (TAKHTADZHAN & FADDEEV, 1979). Insbesondere müssen die in die Matrixelemente eingehenden Funktionen $b(\hat{z})$ und $c(\hat{z})$ angepaßt werden.

3 Die Anwendung des Bethe-Ansatzes auf das XXZ-Modell

Der wichtigste Unterschied zwischen dem XXZ-Modell und dem in Kapitel 2 diskutierten Heisenberg-Modell besteht in der Einführung eines Anisotropieparameters Δ für die Austauschwechselwirkung, der kontinuierlich variiert werden kann, dessen Präsenz aber die Integrabilität des Modells nicht zerstört. Ordnet man die Anisotropie der z -Achse im Spinraum zu, so hat der Hamiltonian des eindimensionalen Spin-1/2 XXZ-Modells in einem äußeren homogenen Magnetfeld der Stärke h' die Gestalt

$$H_{XXZ} = J \sum_{i=1}^N [S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z] - hJS_T^z, \quad J > 0, h = \frac{h'}{J}. \quad (3.1)$$

Für die folgenden Betrachtungen werden gerades N , periodische Randbedingungen sowie ein unbeschränkter Bereich für die Wahl von Δ , d.h. $-\infty < \Delta < \infty$, vorausgesetzt.

Beim XXZ-Modell unterscheidet man zwei sogenannte axiale Parameterbereiche und einen sogenannten planaren Parameterbereich. Die beiden axialen Bereiche, die durch $\Delta < -1$ und $\Delta > 1$ gegeben sind, sind vom planaren Bereich mit $|\Delta| < 1$ durch die beiden Symmetriepunkte $\Delta = \pm 1$ getrennt, an denen jeweils eine isotrope Austauschwechselwirkung vorliegt. Die Austauschwechselwirkung ist antiferromagnetisch für $\Delta > 0$ und ferromagnetisch für $\Delta < 0$ (YANG & YANG, 1966).

Im magnetfeldfreien Fall ($h = 0$) wird der Grundzustand des XXZ-Modells für $\Delta > -1$ durch $S_T^z = 0$ und für $\Delta < -1$ durch $|S_T^z| = \frac{N}{2}$ charakterisiert. Für $h \neq 0$ hängt die Magnetisierung $M_z = S_T^z$ des Grundzustandes von der Stärke des angelegten Magnetfeldes ab, vgl. Kapitel 2.1.

Mit dem XXZ-Modell in einem äußeren homogenen Magnetfeld liegt ein integrables Modell vor, dessen Anregungsspektrum durch die Variation zweier kontinuierlicher Parameter, Δ und h , verändert werden kann.

Im folgenden wird die Anwendung des Bethe-Ansatzes auf das XXZ-Modell mit Hamiltonian (3.1) im planaren Bereich beschrieben. Besonderes Augenmerk liegt dabei auf dem Grenzübergang $\Delta \rightarrow 0$, der das XXZ-Modell in das XX-Modell überführt. Den Ausgangspunkt hierzu bilden die bereits in (BIEGEL, 2000) gewonnenen Resultate, die verallgemeinert und in einen größeren Kontext gestellt werden.

3.1 Die Bethe-Ansatz-Gleichungen für das XXZ-Modell

Durch die Einführung des Anisotropieparameters Δ wird die im Falle des Heisenberg-Modells vorliegende Translationsinvarianz des Hamiltonians und die Rotationsinvarianz bezüglich der z -Achse im Spinraum nicht verletzt, so daß die Gesamtwellenzahl k und die z -Komponente des Gesamtspins, $S_T^z = N/2 - r$, auch im XXZ-Modell als gute Quantenzahlen für die Beschreibung des Systems vorhanden sind.

Das Vorliegen der Translations- und der Rotationsinvarianz erlaubt es, die Anwendung des Bethe-Ansatzes auf das XXZ-Modell analog zum Heisenberg-Modell durchzuführen. Der allgemeine Ansatz (2.10)-(2.12) für die Bethe-Ansatz-Wellenfunktion bleibt gleich. Allerdings führt das Einsetzen des Ansatzes in die Eigenwert-Gleichung auf folgenden Satz von Bethe-Ansatz-Gleichungen (ORBACH, 1958):

$$e^{iNk_i} = \prod_{j \neq i}^r \frac{e^{i(k_i+k_j)} + 1 - 2\Delta e^{ik_i}}{e^{i(k_i+k_j)} + 1 - 2\Delta e^{ik_j}}, \quad i = 1, \dots, r. \quad (3.2)$$

Setzt man hierin $\Delta = 1$, so erhält man (2.14) für das Heisenberg-Modell. Jede Lösung $\{k_j\}$ der Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.2) liefert einen Eigenzustand von H_{XXZ} mit Energie und Wellenzahl

$$\frac{E - E_F}{J} = \sum_{i=1}^r [\cos k_i - \Delta] - hS_T^z, \quad E_F = E_F(\Delta) = \frac{JN}{4} \Delta, \quad (3.3)$$

$$k = \sum_{i=1}^r k_i. \quad (3.4)$$

Mit Hilfe der Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.2) läßt sich unmittelbar eine weitere Symmetrieeigenschaft des XXZ-Modells zeigen, die als Reflexionssymmetrie bezeichnet werden kann. Ist nämlich durch $\{k_i\}$, $i = 1, \dots, r$, eine Lösung der Bethe-Ansatz-Gleichungen mit Gesamtenergie E und Gesamtwellenzahl k gegeben, so erhält man durch die Transformation

$$k_i \rightarrow k'_i = 2\pi - k_i, \quad i = 1, \dots, r, \quad (3.5)$$

ebenfalls eine Lösung der Bethe-Ansatz-Gleichungen, und damit einen Eigenzustand von H_{XXZ} , und zwar mit der gleichen Gesamtenergie E , aber mit dem Gesamtimpuls $k' = 2\pi - k$. Daher sind die Anregungsspektren stets achsensymmetrisch bezüglich der Geraden $k = \pi$. Für eine Diskussion des Spektrums der Energie-Eigenwerte reicht es also aus, nur eine Hälfte der von $k = 0$ bis $k = 2\pi$ reichenden Brillouin-Zone zu betrachten.

Die Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.2) gelten insbesondere auch für den planaren Bereich des XXZ-Modells. Allerdings bietet es sich zum Zwecke der besseren analytischen und numerischen Zugänglichkeit an, für den planaren Bereich des XXZ-Modells analog zu (2.15) für den Heisenberg-Antiferromagneten eine geeignete Variablentransformation vorzunehmen.

Im planaren Bereich verwenden wir (BIEGEL *et al.*, 2003a) als Anisotropieparameter

$$\gamma = \arccos \Delta \quad (0 < \gamma < \pi), \quad (3.6)$$

und führen die neuen Variablen

$$y_i = \tan \frac{\gamma}{2} \cot \frac{k_i}{2}, \quad i = 1, \dots, r. \quad (3.7)$$

ein. Auflösung von (3.7) nach k_i liefert

$$k_i = \pi - 2 \arctan \left(y_i \cot \frac{\gamma}{2} \right). \quad (3.8)$$

Durch die Einführung der neuen Variablen geht (3.2) über in

$$\left(\frac{c_2 y_i - \iota}{c_2 y_i + \iota} \right)^N = \prod_{j \neq i}^r \frac{c_1 (y_i - y_j) - \iota (1 - y_i y_j)}{c_1 (y_i - y_j) + \iota (1 - y_i y_j)}, \quad i = 1, \dots, r. \quad (3.9)$$

Hierin ist

$$c_1 = \cot \gamma, \quad c_2 = \cot \frac{\gamma}{2}. \quad (3.10)$$

Logarithmierung von (3.9) liefert analog zu (2.17) die trigonometrische Form der Bethe-Ansatz-Gleichungen:

$$N \phi(c_2 y_i) = 2\pi I_i + \sum_{j \neq i}^r \phi \left(c_1 \frac{y_i - y_j}{1 - y_i y_j} \right), \quad i = 1, \dots, r, \quad (3.11)$$

in der die ganz- oder halbzahligen Bethe-Quantenzahlen $\{I_i\}$ auftreten ($\phi(x) = 2 \arctan x$). Die Bestimmungsgleichungen (3.3) und (3.4) für Energie und Gesamtwellenzahl eines Eigenzustandes gehen durch die Einführung der neuen Variablen über in:

$$\frac{E - E_F}{J} = -\frac{2}{c_2^{-1} + c_2} \sum_{i=1}^r \frac{y_i^{-1} - y_i}{(c_2 y_i)^{-1} + c_2 y_i} - h S_T^z, \quad (3.12)$$

$$k = \pi r - \frac{2\pi}{N} \sum_{i=1}^r I_i. \quad (3.13)$$

Die Parametrisierung des Bethe-Ansatzes für das XXZ-Modells mit Hilfe der y_i , (3.7), soll im folgenden als trigonometrische Parametrisierung bezeichnet werden.

Des Cloizeaux und Gaudin führen in ihrer Arbeit (DES CLOIZEAUX & GAUDIN, 1966) eine weitere Variablensubstitution durch und setzen

$$y_i = \tanh \frac{z_i}{2}, \quad i = 1, \dots, r. \quad (3.14)$$

Die Einführung der $\{z_i\}$ bewirkt, daß sich die Struktur der Bethe-Ansatz-Gleichungen und die Formel für die Zustandsenergie weiter vereinfachen. Einsetzen von (3.14) in (3.9) und (3.11) ergibt

$$\left(\frac{c_2 \tanh(z_i/2) - \iota}{c_2 \tanh(z_i/2) + \iota} \right)^N = \prod_{j \neq i}^r \frac{c_1 \tanh [(z_i - z_j)/2] - \iota}{c_1 \tanh [(z_i - z_j)/2] + \iota}, \quad i = 1, \dots, r, \quad (3.15)$$

bzw.

$$N\phi(c_2 \tanh(z_i/2)) = 2\pi I_i + \sum_{j \neq i}^r \phi(c_1 \tanh [(z_i - z_j)/2]), \quad i = 1, \dots, r. \quad (3.16)$$

Für die Zustandsenergie ergibt sich

$$\frac{E - E_F}{J} = \sum_{i=1}^r \frac{\sin^2 \gamma}{\cos \gamma - \cosh z_i} - hS_T^z. \quad (3.17)$$

Die Parametrisierung des Bethe-Ansatzes nach des Cloizeaux und Gaudin mit Hilfe der z_i , (3.14), soll im folgenden als hyperbolische Parametrisierung bezeichnet werden.

Aufgrund des Definitionsbereiches des \tanh unterliegen reelle Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.15) bzw. (3.16) der Restriktion $|\tanh(z_i/2)| \leq 1$. Dies führt dazu, daß Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen existieren, für die die Magnon-Wellenzahlen k_i sowie die zugehörigen Lösungen y_i reell sind, während einige der zugehörigen z_i rein imaginär sind (BIEGEL, 2000; BIEGEL *et al.*, 2003a). Daher erleichtert die Verwendung der y_i im allgemeinen die (numerische) Lösung der Bethe-Ansatz-Gleichungen, da zu reellen Wellenzahlen stets reelle Lösungen y_i gehören.

Im planaren Bereich des XXZ-Modells wird der Grundzustand $|\psi_0\rangle$ durch die in (2.31) angegebenen Bethe-Quantenzahlen I_i^0 , $i = 1, \dots, r$, charakterisiert. Entsprechend lassen sich die niedrigliegenden Anregungen als $2m$ -Spinon-Anregungen (für $h = 0$) bzw. $2m$ -Psinon-Anregungen (für $h \neq 0$) interpretieren.

3.2 Der Übergang zum XXX-Modell

Der planare Bereich des XXZ-Modells wird am rechten Rand durch den isotropen Punkt $\Delta = 1$ begrenzt, an dem das XXZ-Modell in das XXX-Modell bzw. den Heisenberg-Antiferromagneten übergeht. Der Grenzübergang vom planaren Bereich des XXZ-Modells zum XXX-Modell wird in den Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.9) und (3.11) bzw. (3.15) und (3.16) durch den kombinierten Limes

$$\gamma \rightarrow 0^+, \quad z_i \rightarrow 0, \quad \hat{z}_i = \frac{z_i}{\gamma} \text{ fest}, \quad i = 1, \dots, r, \quad (3.18)$$

(KARBACH, 1994; BIEGEL *et al.*, 2003b) bzw.

$$\gamma \rightarrow 0^+, \quad y_i \rightarrow 0, \quad \hat{z}_i = \frac{2y_i}{\gamma} \text{ fest}, \quad i = 1, \dots, r, \quad (3.19)$$

beschrieben, der die Bethe-Ansatz-Gleichungen in die Bethe-Ansatz-Gleichungen (2.16) und (2.17) für das XXX-Modell überführt. Ebenso werden durch diesen Limes die entsprechenden Formeln für Zustandsenergie und Gesamtwellenzahl ineinander überführt.

3.3 Der Übergang zum XX-Modell

Der Grenzübergang $\Delta \rightarrow 0$ überführt das XXZ-Modell mit Hamiltonian (3.1) in das XX-Modell mit Hamiltonian

$$H_{XX} = J \sum_{i=1}^N (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) - hJS_T^z, \quad J > 0. \quad (3.20)$$

Dieses Modell läßt sich mit Hilfe der sogenannten Jordan-Wigner-Transformation auf ein System von freien, spinlosen Gitterfermionen abbilden (JORDAN & WIGNER, 1928; LIEB *et al.*, 1961; NIEMEIJER, 1967), und kann dann im Fermion-Bild diskutiert werden. Darauf wird in Kapitel 3.5 noch näher eingegangen.

Um die Eigenwerte und Eigenvektoren des XX-Modells mit Hilfe des Bethe-Ansatzes bestimmen zu können, ist es notwendig, den Grenzwert $\Delta \rightarrow 0$ in den Bethe-Ansatz-Gleichungen für das XXZ-Modell durchzuführen. Wählt man (3.2) als Ausgangspunkt, dann sieht es zunächst so aus, als ob sich die Bethe-Ansatz-Gleichungen im Grenzwert $\Delta \rightarrow 0$ drastisch vereinfachen und sämtliche Magnon-Impulse im XX-Modell auf Lösungen der Gleichungen

$$e^{iNk_i} = (-1)^{r-1}, \quad i = 1, \dots, r, \quad (3.21)$$

eingeschränkt werden. Allerdings zeigt eine genauere Untersuchung der Verhältnisse (BIEGEL, 2000; BIEGEL *et al.*, 2003a), daß beim Übergang zum XX-Modell in der Regel Magnon-Paare auftreten, deren Impulse sich zu π addieren: $k_j + k_{j^*} \rightarrow \pi$ für $\Delta \rightarrow 0$. Magnon-Paare mit dieser Eigenschaft sollen im folgenden als „kritische Paare“ bezeichnet werden. Das Auftreten solcher Paare führt zu nichttrivialen reellen und komplexen Lösungen von (3.2) im Grenzfall $\Delta \rightarrow 0$. Die Existenz dieser nichttrivialen Lösungen hängt eng mit dem Auftreten von Entartungen in den Energieniveaus zusammen, was bei bestimmten Werten von Δ , nicht nur für $\Delta = 0$, zu einem Überkreuzen der Energieniveaus (*level crossing*) führt. Das Auftreten solcher *level crossings* wird in (DEGUCHI *et al.*, 2001; FABRICIUS & MCCOY, 2001a; FABRICIUS & MCCOY, 2001b) auf eine Realisierung der sl_2 -Loop-Algebra für $\Delta = (q + q^{-1})/2 \neq \pm 1$ mit $q^{2N} = 1$ für $N \geq 2$ zurückgeführt.

Begibt man sich unmittelbar in den planaren Bereich des XXZ-Modells und wählt die Parametrisierung (3.6), so wird der Grenzübergang zum XX-Modell durch

$$\Delta \rightarrow 0^\pm \iff \gamma \rightarrow \left(\frac{\pi}{2}\right)^\mp \iff c_1 \rightarrow 0^\pm, c_2 \rightarrow 1^\pm \quad (3.22)$$

beschrieben. Die Definition (3.7) der Variablen y_i geht für $\Delta \rightarrow 0$ über in

$$\tilde{y}_i = \cot \frac{k_i}{2}, \quad i = 1, \dots, r.^3 \quad (3.23)$$

Hieraus folgt, daß das Auftreten eines kritischen Magnon-Paares mit $k_j + k_{j^*} \rightarrow \pi$ für $\Delta \rightarrow 0$ verknüpft ist mit dem Auftreten eines kritischen Lösungspaares $y_j \cdot y_{j^*} \rightarrow 1$ für $\Delta \rightarrow 0$ der Bethe-Ansatz-Gleichungen. Berücksichtigt man dies bei der Durchführung des Grenzwertes $\Delta \rightarrow 0$ in den Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.9) bzw. (3.11), so erkennt man unmittelbar, daß die Diskussion und die Lösung der Bethe-Ansatz-Gleichungen in diesem Falle problematisch werden, was eine sorgfältige Behandlung des Grenzübergangs erfordert.

Im folgenden wird die Durchführung des Grenzübergangs $\Delta \rightarrow 0$ in den Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.11) beschrieben und die Struktur der Lösungen im XX-Modell hergeleitet. Hierzu werden zunächst die möglichen Fälle einzeln unterschieden und am Ende die allgemeine Lösung angegeben (BIEGEL, 2000; BIEGEL *et al.*, 2003a).

³Hier und im folgenden werden Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen, die sich auf das XX-Modell beziehen, mit einer zusätzlichen Tilde „ $\tilde{}$ “ gekennzeichnet.

3.3.1 Nichtkritischer Fall

Der nichtkritische Fall ist dadurch gekennzeichnet, daß kein Lösungspaar mit $\lim_{\Delta \rightarrow 0} y_j y_{j^*} = 1$ vorliegt. In diesem Fall entkoppeln die Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.11) vollständig und liefern unmittelbar folgende Lösungen für das XX-Modell:

$$\tilde{y}_i = \tan\left(\frac{\pi I_i}{N}\right), \quad k_i = \pi - \frac{2\pi}{N} I_i, \quad i = 1, \dots, r. \quad (3.24)$$

Sämtliche Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen sind im nichtkritischen Fall also reell. Ferner erfüllen sie offensichtlich auch (3.21). Die nichtkritischen Lösungen hängen mit den zugehörigen Magnon-Impulsen via (3.23) zusammen.

Ausgehend von (3.12) bzw. (3.3) erhält man mit (3.22) und (3.24) im nichtkritischen Fall für die Energie eines Eigenzustandes

$$\frac{E}{J} + hS_T^z = - \sum_{i=1}^r \frac{y_i^{-1} - y_i}{y_i^{-1} + y_i} = \sum_{i=1}^r \cos k_i = - \sum_{i=1}^r \cos\left(\frac{2\pi}{N} I_i\right). \quad (3.25)$$

3.3.2 Der Übergang beim Auftreten kritischer reeller Paare

Den Ausgangspunkt für die Diskussion des Übergangs vom XXZ- zum XX-Modell beim Auftreten kritischer reeller Paare bildet der Fall, daß unter den Lösungen y_1, \dots, y_r genau ein einziges kritisches reelles Paar

$$\tilde{y}_j \tilde{y}_{j^*} = 1 \quad \iff \quad k_j + k_{j^*} = \pi \pmod{2\pi} \quad (3.26)$$

vorliegt, wobei gemäß (3.23) folgender Zusammenhang zwischen $\tilde{y}_j, \tilde{y}_{j^*}$ und k_j, k_{j^*} besteht:

$$\tilde{y}_j = \cot \frac{k_j}{2}, \quad \tilde{y}_{j^*} = \cot \frac{k_{j^*}}{2} = \cot \frac{\pi - k_j}{2} = \tan \frac{k_j}{2}. \quad (3.27)$$

Die Analyse der numerischen Ergebnisse für Ketten endlicher Längen legt folgenden Ansatz für die Struktur der Lösungen beim Übergang $\Delta = \varepsilon \rightarrow 0$ vom XXZ- zum XX-Modell nahe (BIEGEL, 2000; BIEGEL *et al.*, 2003a):

$$y_i = \tilde{y}_i + \varepsilon \delta_i, \quad i = 1, \dots, r. \quad (3.28)$$

Der Ansatz (3.28) wird in die Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.11) eingesetzt und der Grenzübergang $\Delta \rightarrow 0$ durchgeführt. Dies führt auf eine Entwicklung im Kontrollparameter $\Delta = \varepsilon$. Ein Koeffizientenvergleich für die verschiedenen Ordnungen ermöglicht dann die Ableitung der Bestimmungsgleichungen für die nichtkritischen und kritischen Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen im XX-Modell.

Im ersten Schritt reproduziert man hierbei die Bestimmungsgleichungen (3.24) für die nichtkritischen Lösungen $y_i, i \neq j, j^*$, der Bethe-Ansatz-Gleichungen. Damit liegen diese Lösungen eindeutig fest.

Für das kritische Lösungspaar erhält man die Bestimmungsgleichung

$$\phi(\tilde{y}_j^-) = \frac{2}{N} \phi\left(\left[\frac{\sigma_j \tilde{y}_j^-}{1 - \xi_j}\right]^{\sigma_j}\right). \quad (3.29)$$

Hierin geht die Größe

$$\xi_j = \frac{2}{N} \sum_{i \neq j, j^*}^r \tilde{y}_j^+ \frac{\tilde{y}_j^+ (1 + \tilde{y}_i^2) - 2\tilde{y}_i}{1 + \tilde{y}_i^2 - 2\tilde{y}_i \tilde{y}_j^+} = \frac{2}{N} \sum_{i \neq j, j^*}^r \frac{\tilde{y}_j^+ - \sin k_i}{(\tilde{y}_j^+)^{-1} - \sin k_i} \quad (3.30)$$

mit

$$\text{sgn}\left(\frac{\tilde{y}_j^+}{\xi_j}\right) = -\frac{2}{N} (I_j + I_{j^*}) \quad (3.31)$$

ein. Ferner werden die Abkürzungen

$$\tilde{y}_j^+ = \frac{1}{2}(\tilde{y}_j + \tilde{y}_{j^*}) = \frac{1}{\sin k_j}, \quad \tilde{y}_j^- = \frac{1}{2}(\tilde{y}_j - \tilde{y}_{j^*}) = \cot k_j \quad (3.32)$$

und

$$\sigma_j = (-1)^{I_j - I_{j^*}} \quad (3.33)$$

verwendet. In ξ_j gehen die gemäß (3.24) festgelegten nichtkritischen Lösungen \tilde{y}_i bzw. Magnon-Impulse k_i ein. Die Kritikalitätsbedingung (3.26) für das kritische Paar führt dazu, daß \tilde{y}_j^+ und \tilde{y}_j^- durch die Gleichung

$$(\tilde{y}_j^+)^2 - (\tilde{y}_j^-)^2 = 1 \quad (3.34)$$

miteinander verknüpft sind. Zudem liefert das kritische Lösungspaar wegen $k_j + k_{j^*} = \pi$ im XX-Modell keinen Beitrag zur Zustandsenergie.

Betrachtet man (3.31), so läßt sich ablesen, daß die Bethe-Quantenzahlen für das kritische Paar von Lösungen stets die Bedingung

$$|I_j + I_{j^*}| = \frac{N}{2} \quad (3.35)$$

erfüllen müssen. Umgekehrt kann man sagen, daß ein kritisches Lösungspaar stets durch diese Bedingung an die zugehörigen Bethe-Quantenzahlen gekennzeichnet wird.

Neben (3.29) lassen sich auch explizite Bestimmungsgleichungen für \tilde{y}_j und \tilde{y}_{j^*} angeben (BIEGEL, 2000). Für \tilde{y}_j hat man

$$N\phi(\tilde{y}_j) = 2\pi I_j - \phi \left(\frac{N \cdot \frac{1 - \tilde{y}_j^2}{1 + \tilde{y}_j^2}}{\frac{2N\tilde{y}_j}{1 + \tilde{y}_j^2} - \sum_{i \neq j, j^*}^r \left(\frac{\tilde{y}_i - \tilde{y}_i}{1 - \tilde{y}_j \tilde{y}_i} + \frac{1 - \tilde{y}_i \tilde{y}_i}{\tilde{y}_j - \tilde{y}_i} \right)} \right). \quad (3.36)$$

Ersetzt man in dieser Gleichung j durch j^* , so folgt die entsprechende Bestimmungsgleichung für \tilde{y}_{j^*} . Die Diskussion des Falles, daß s kritische reelle Paare

$$\tilde{y}_{j_l} \tilde{y}_{j_l^*} = 1, \quad |I_{j_l} + I_{j_l^*}| = \frac{N}{2}, \quad l = 1, \dots, s, \quad (3.37)$$

vorliegen, führt auf eine natürliche Verallgemeinerung der bisher vorgestellten Ergebnisse. Die unkritischen Lösungen werden weiterhin durch (3.24) festgelegt. Für die kritischen Paare findet man jetzt ein System von gekoppelten Bestimmungsgleichungen

$$\phi(\tilde{y}_{j_l}^-) = \frac{2}{N} \phi \left(\left[\frac{\sigma_{j_l} \tilde{y}_{j_l}^-}{1 - \xi_{j_l}} \right]^{\sigma_{j_l}} \right), \quad l = 1, \dots, s, \quad (3.38)$$

wobei ξ_{j_l} , $y_{j_l}^\pm$ und σ_{j_l} durch (3.30) - (3.33) gegeben sind, bzw.

$$N\phi(\tilde{y}_{j_l}) = 2\pi I_{j_l} - \phi \left(\frac{N \cdot \frac{1 - \tilde{y}_{j_l}^2}{1 + \tilde{y}_{j_l}^2}}{\frac{2N\tilde{y}_{j_l}}{1 + \tilde{y}_{j_l}^2} - \sum_{i \neq j_l, j_l^*}^r \left(\frac{\tilde{y}_{j_l} - \tilde{y}_i}{1 - \tilde{y}_{j_l} \tilde{y}_i} + \frac{1 - \tilde{y}_{j_l} \tilde{y}_i}{\tilde{y}_{j_l} - \tilde{y}_i} \right)} \right), \quad l = 1, \dots, s. \quad (3.39)$$

Man beachte, daß in ξ_{j_l} neben den nichtkritischen Lösungen nun auch die kritischen Lösungen, die zu den übrigen kritischen Paaren gehören, eingehen.

Da die kritischen Lösungspaare zur Zustandsenergie keinen Beitrag liefern und zur Gesamtwellenzahl jeweils π beitragen, erhält man für Gesamtenergie und -wellenzahl des Eigenzustandes:

$$\frac{E}{J} = - \sum_{i \notin \{j_1, j_1^*, \dots, j_s, j_s^*\}} \cos \left(\frac{2\pi}{N} I_i \right) - h S_T^z, \quad (3.40)$$

$$k = \pi(r - s) - \frac{2\pi}{N} \sum_{i \notin \{j_1, j_1^*, \dots, j_s, j_s^*\}} I_i. \quad (3.41)$$

Einen Spezialfall stellt in diesem Zusammenhang der Fall $r = 2$ dar, falls nur das kritische Paar vorhanden ist, d.h.

$$\tilde{y}_1 \tilde{y}_2 = 1, \quad |I_1 + I_2| = \frac{N}{2}. \quad (3.42)$$

Unter diesen Voraussetzungen werden die Lösungen \tilde{y}_1 und \tilde{y}_2 der Bethe-Ansatz-Gleichungen im XX-Modell durch die beiden Gleichungen

$$\tilde{y}_1 = \tan \left(\pi \frac{I_1(N-1) - I_2}{N(N-2)} \right), \quad (3.43)$$

$$\tilde{y}_2 = \tan \left(\pi \frac{I_2(N-1) - I_1}{N(N-2)} \right) \quad (3.44)$$

festgelegt. Für die Zustandsenergie hat man in diesem Fall $E/J = -hS_T^z$, für die Gesamtwellenzahl erhält man $k = \pi$.

3.3.3 Der Übergang beim Auftreten kritischer komplexer Paare

Die Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.11) können sowohl reell als auch komplex sein, wobei komplexe Lösungen stets in Paaren zueinander komplex konjugierter Lösungen auftreten (BIEGEL, 2000). Im Hinblick auf den Übergang zum XX-Modell zeigen die in den vorangegangenen Kapiteln diskutierten Resultate zu den nichtkritischen Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen bereits, daß eine komplexe Lösung für $\Delta = 0$ nur dann auftreten kann, wenn das komplex konjugierte Lösungspaar zugleich ein kritisches Paar ist.

Es soll daher im folgenden zunächst der Fall diskutiert werden, daß für $\Delta \neq 0$ neben $r - 2$ reellen (nichtkritischen) Lösungen y_3, y_4, \dots, y_r genau ein komplex konjugiertes Lösungspaar

$$y_1 = y_2^* = u + v \quad (3.45)$$

mit der Eigenschaft

$$\tilde{y}_1 \tilde{y}_2 = \tilde{u}^2 + \tilde{v}^2 = 1, \quad |I_1 + I_2| = \frac{N}{2} \quad (3.46)$$

vorliegt. Der Ansatz für den Real- und Imaginärteil des komplexen Lösungspaares hat die gleiche Struktur wie im reellen Fall, vgl. (3.28):

$$u = \tilde{u} + \varepsilon \delta_u, \quad v = \tilde{v} + \varepsilon \delta_v. \quad (3.47)$$

Den Ausgangspunkt für die Diskussion des Grenzübergangs $\Delta \rightarrow 0$ bilden wiederum die Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.11), die in eine reelle Form für die r reellen Unbekannten u, v, y_3, \dots, y_r umgeschrieben werden können (BIEGEL, 2000; BIEGEL *et al.*, 2003a). Man erhält

$$N\phi(c_2 y_i) = 2\pi I_i + \sum_{\substack{j=3 \\ j \neq i}}^r \phi \left(c_1 \frac{y_i - y_j}{1 - y_i y_j} \right) + \phi \left(\frac{2c_1 [(y_i - u)(1 - y_i u) + y_i v^2]}{(1 - y_i u)^2 + y_i^2 v^2 - c_1^2 [(y_i - u)^2 + v^2]} \right) \quad (3.48)$$

für $i = 3, \dots, r$ und

$$N\phi \left(\frac{2c_2 u}{1 - c_2^2 (u^2 + v^2)} \right) = 2\pi \left\{ \frac{I_1 + I_2}{I^{(*)} \pm \frac{N}{2}} \right\} + \sum_{j=3}^r [2\pi I_j - N\phi(c_2 y_j)], \quad (3.49)$$

$$N\varphi \left(\frac{2c_2 v}{1 + c_2^2 (u^2 + v^2)} \right) = \varphi \left(\frac{4c_1 v (1 - u^2 - v^2)}{(1 - u^2 - v^2)^2 + 4c_1^2 v^2} \right) \quad (3.50)$$

$$+ \sum_{j=3}^r \varphi \left(\frac{2c_1 v (1 - y_j^2)}{(1 - y_j u)^2 + y_j^2 v^2 + c_1^2 [(y_j - u)^2 + v^2]} \right)$$

für das kritische Paar. Hierin ist $\phi(x) = 2 \arctan x$ und $\varphi(x) = 2 \operatorname{artanh} x$. In (3.49) bietet es sich an, die auftretende Summe $I_1 + I_2$ der Bethe-Quantenzahlen durch eine gemeinsame Quantenzahl $I^{(*)}$ mit $I_1 + I_2 = I^{(*)} \pm N/2$ zu ersetzen, wie dies beim Auftreten komplex konjugierter Lösungspaare üblich ist (TAKAHASHI, 1999). Dadurch kann den im hier betrachteten Fall auftretenden kritischen komplexen Lösungspaaren einheitlich die Quantenzahl $I^{(*)} = 0$ zugewiesen werden.

Setzt man den Ansatz (3.47) in die Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.48) - (3.50) ein und entwickelt die auftretenden Terme in Ordnungen des Kontrollparameters ε , so erhält man im ersten Schritt für die reellen nichtkritischen Lösungen wiederum die Bestimmungsgleichungen (3.24). Das komplexe Lösungspaar wird durch die beiden Bestimmungsgleichungen

$$\left(\frac{1+\tilde{v}}{1-\tilde{v}}\right)^N = \left(\frac{1-\xi_1+\tilde{v}}{1-\xi_1-\tilde{v}}\right)^2, \quad \tilde{u}^2 + \tilde{v}^2 = 1 \quad (3.51)$$

mit

$$\xi_1 = \frac{2}{N} \sum_{j=3}^r \tilde{u} \frac{\tilde{u}(1+\tilde{y}_j^2) - 2\tilde{y}_j}{1+\tilde{y}_j^2 - 2\tilde{y}_j\tilde{u}} = \frac{2}{N} \sum_{j=3}^r \frac{\tilde{u} - \sin k_j}{\tilde{u}^{-1} - \sin k_j} \quad (3.52)$$

und

$$\operatorname{sgn}\left(\frac{\tilde{u}}{\xi_1}\right) = -\frac{2}{N}(I_1 + I_2) \quad (3.53)$$

festgelegt.⁴ Berücksichtigt man, daß im Falle des kritischen komplexen Paares per Konstruktion $\tilde{y}_1^+ = \tilde{u}$ gilt, so folgen (3.52) und (3.53) unmittelbar aus (3.30) und (3.31).

Die Verallgemeinerung der Ergebnisse auf das Vorliegen von mehreren komplex konjugierten Lösungspaaren erfolgt in ebenso natürlicher Weise wie im Falle mehrerer kritischer reeller Lösungspaare. Daher wird an dieser Stelle auf die Angabe der zugehörigen Resultate verzichtet und direkt zum allgemeinen Fall übergegangen.

3.3.4 Die Bethe-Ansatz-Gleichungen für das XX-Modell: Allgemeiner Fall

Der allgemeine Fall ist dadurch gekennzeichnet, daß t komplex konjugierte Paare von Lösungen

$$y_1 = u_1 + w_1, \dots, y_{2t-1} = u_t + w_t, \quad \tilde{u}_i^2 + \tilde{v}_i^2 = 1, \quad i = 1, \dots, t, \quad (3.54)$$

und s kritische reelle Paare

$$\tilde{y}_{j_l} \tilde{y}_{j_l^*} = 1, \quad \mathcal{J}_l = \{j_l, j_l^*\} \subset \{2t+1, \dots, r\}, \quad l = 1, \dots, s, \quad (3.55)$$

vorliegen. Dann sind die nichtkritischen reellen Lösungen nach dem Grenzübergang $\Delta \rightarrow 0$ durch die Bestimmungsgleichungen

$$\tilde{y}_i = \tan\left(\frac{\pi I_i}{N}\right), \quad i \notin \{1, \dots, 2t\} \cup \bigcup_{l=1}^s \mathcal{J}_l, \quad (3.56)$$

festgelegt. Für die kritischen reellen Paare gehen die Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.11) über in

$$\phi(\tilde{y}_{j_l}^-) = \frac{2}{N} \phi\left(\left[\frac{\sigma_{j_l} \tilde{y}_{j_l}^-}{1 - \xi_{j_l}}\right]^{\sigma_{j_l}}\right), \quad l = 1, \dots, s, \quad (3.57)$$

mit

$$\xi_{j_l} = \frac{2}{N} \left[\sum_{\substack{i=2t+1 \\ i \neq j_l, j_l^*}}^r \frac{\tilde{y}_{j_l}^+ - \sin k_i}{(\tilde{y}_{j_l}^+)^{-1} - \sin k_i} + 2 \sum_{i=1}^t \frac{\tilde{y}_{j_l}^+ - \tilde{u}_i^{-1}}{(\tilde{y}_{j_l}^+)^{-1} - \tilde{u}_i^{-1}} \right]. \quad (3.58)$$

⁴Mittlerweile hat sich herausgestellt, daß die in (BIEGEL, 2000) angegebene Darstellung von (3.51) mit Hilfe des artanh numerisch kaum zugänglich ist, was zu Fehlinterpretationen der Ergebnisse führen kann.

Für die komplexen Lösungen hat man dementsprechend

$$\left(\frac{1+\tilde{v}_i}{1-\tilde{v}_i}\right)^N = \left(\frac{1-\xi_i+\tilde{v}_i}{1-\xi_i-\tilde{v}_i}\right)^2, \quad \tilde{u}_i^2 + \tilde{v}_i^2 = 1, \quad i = 1, \dots, t, \quad (3.59)$$

mit

$$\xi_i = \frac{2}{N} \left[\sum_{j=2t+1}^r \frac{\tilde{u}_i - \sin k_j}{\tilde{u}_i^{-1} - \sin k_j} + 2 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^t \frac{\tilde{u}_i - \tilde{u}_j^{-1}}{\tilde{u}_i^{-1} - \tilde{u}_j^{-1}} \right]. \quad (3.60)$$

Man beachte, daß der hier angegebene Satz von Gleichungen offensichtlich alle in den vorhergehenden Kapiteln diskutierten Fälle als Spezialfälle enthält. Energie und Gesamtwellenzahl eines Zustandes werden ausschließlich durch die nichtkritischen Lösungen festgelegt:

$$\frac{E}{J} = - \sum_{\substack{i=2t+1 \\ i \neq j_1, \dots, j_t^*}}^r \cos\left(\frac{2\pi}{N} I_i\right) - h S_T^z, \quad (3.61)$$

$$k = \pi(r - s - t) - \frac{2\pi}{N} \sum_{\substack{i=2t+1 \\ i \neq j_1, \dots, j_t^*}}^r I_i \pmod{2\pi}. \quad (3.62)$$

Der Vorteil dieser Behandlung der Bethe-Ansatz-Gleichungen und ihrer Lösungen im Grenzfall $\Delta \rightarrow 0$ besteht vor allem darin, daß man die Entwicklung sämtlicher Eigenzustände des XXZ-Modells bei Variation von Δ über den Punkt $\Delta = 0$ hinweg verfolgen kann. Dies wird im folgenden am Beispiel der 2-Spinon-Anregungen einer Kette der Länge $N = 8$ demonstriert.

3.4 Evolution der 2-Spinon-Anregungen der Achterkette bei Variation des Anisotropieparameters Δ

Im Rahmen dieses Kapitels werden die 2-Spinon-Anregungen im XXX-Modell und dem planaren Bereich des XXZ-Modells für eine Kette der Länge $N = 8$ diskutiert. Insbesondere wird der Frage nachgegangen, wie sich die Anregungszustände verändern, wenn der Anisotropieparameter Δ zwischen $+1$ und -1 variiert wird. Die gezeigten Resultate schließen an die Resultate aus (BIEGEL, 2000) an. Im XXX-Modell ohne äußeres Magnetfeld mit Hamiltonian (2.22) lassen sich die 2-Spinon-Anregungen aufgrund der Isotropie im Spinraum in Triplet-Anregungen und Singulett-Anregungen unterteilen, vgl. Kapitel 2.1. Für die folgenden Betrachtungen ist es sinnvoll, die Triplet-Anregungen in insgesamt drei Klassen zu unterteilen. Die Klasse A umfaßt die 2-Spinon-Triplet-Anregungen mit $S_T^z = 1$, die Klasse B die 2-Spinon-Triplet-Anregungen mit $S_T^z = 0$ und die Klasse C schließlich die 2-Spinon-Singulett-Anregungen. Die 2-Spinon-Triplet-Anregungen mit $S_T^z = -1$ werden im folgenden nicht separat betrachtet, da sie sich unmittelbar aus den Zuständen der Klasse A durch eine Spinflip-Transformation gewinnen lassen. Für eine Kette der Länge $N = 8$ umfassen die Klassen A und B jeweils zehn Zustände und die Klasse C sechs Zustände. Tabelle 3.1 gibt einen Überblick über die Impulse, Energien und Bethe-Quantenzahlen der Zustände der Klasse A, Tabelle 3.2 und Tabelle 3.3 zeigen entsprechende Daten für die Zustände der Klassen B und C. Die Einträge in den Tabellen spiegeln die in Kapitel 3.1 beschriebene Reflexionssymmetrie für das XXZ-Modell wider.

Die die jeweiligen Anregungszustände beschreibenden Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen (2.17) für das XXX-Modell lassen sich mit den in (KARBACH & MÜLLER, 1997; KARBACH *et al.*, 1998; BIEGEL, 2000) diskutierten numerischen und analytischen Verfahren bestimmen.

Führt man in (2.17) für ein festes i den Grenzwert $\hat{z}_i \rightarrow \pm\infty$ durch, so erkennt man, daß die Bethe-Quantenzahlen, die auf eine endliche reelle Lösung der Bethe-Ansatz-Gleichungen führen, auf den Bereich

$$|I_i| < \frac{N - r + 1}{2}, \quad i = 1, \dots, r, \quad (3.63)$$

| Nr. | $\frac{Nk}{2\pi}$ | $\frac{E-E_A}{J}$ | I_1 | I_2 | I_3 |
|-----|-------------------|-------------------|-------|-------|-------|
| A1 | 1 | 1.19235 | 0 | 1 | 2 |
| A2 | 2 | 1.79646 | -1 | 1 | 2 |
| A3 | 3 | 1.50595 | -1 | 0 | 2 |
| A4 | 3 | 2.79217 | -2 | 1 | 2 |
| A5 | 4 | 0.52267 | -1 | 0 | 1 |
| A6 | 4 | 2.44945 | -2 | 0 | 2 |
| A7 | 5 | 1.50595 | -2 | 0 | 1 |
| A8 | 5 | 2.79217 | -2 | -1 | 2 |
| A9 | 6 | 1.79646 | -2 | -1 | 1 |
| A10 | 7 | 1.19235 | -2 | -1 | 0 |

Tabelle 3.1: 2-Spinon-Triplett-Zustände mit $S_7^z = 1$ im XXX-Modell für $N = 8$ (BIEGEL, 2000)

| Nr. | $\frac{Nk}{2\pi}$ | $\frac{E-E_A}{J}$ | I_1 | I_2 | I_3 | I_4 |
|-----|-------------------|-------------------|-------|-------|-------|-------|
| G | 0 | 0 | -1.5 | -0.5 | 0.5 | 1.5 |
| B1 | 1 | 1.19235 | -2.5 | -0.5 | 0.5 | 1.5 |
| B2 | 2 | 1.79646 | -2.5 | -1.5 | 0.5 | 1.5 |
| B3 | 3 | 1.50595 | -2.5 | -1.5 | -0.5 | 1.5 |
| B4 | 3 | 2.79217 | -2.5 | -2.5 | 0.5 | 1.5 |
| B5 | 4 | 0.52267 | -2.5 | -1.5 | -0.5 | 0.5 |
| | 4 | 0.52267 | -0.5 | 0.5 | 1.5 | 2.5 |
| B6 | 4 | 2.44945 | -2.5 | -2.5 | -0.5 | 1.5 |
| | 4 | 2.44945 | -1.5 | 0.5 | 2.5 | 2.5 |
| B7 | 5 | 1.50595 | -1.5 | 0.5 | 1.5 | 2.5 |
| B8 | 5 | 2.79217 | -1.5 | -0.5 | 2.5 | 2.5 |
| B9 | 6 | 1.79646 | -1.5 | -0.5 | 1.5 | 2.5 |
| B10 | 7 | 1.19235 | -1.5 | -0.5 | 0.5 | 2.5 |

Tabelle 3.2: Grundzustand und 2-Spinon-Triplett-Zustände mit $S_7^z = 0$ im XXX-Modell für $N = 8$ (BIEGEL, 2000)

| Nr. | $\frac{Nk}{2\pi}$ | $\frac{E-E_A}{J}$ | $I^{(*)}$ | I_3 | I_4 |
|-----|-------------------|-------------------|-----------|-------|-------|
| C1 | 2 | 2.03306 | -1 | 0.5 | 2.5 |
| C2 | 3 | 1.94399 | 0 | -0.5 | 1.5 |
| C3 | 4 | 0.95147 | 0 | -0.5 | 0.5 |
| C4 | 4 | 2.89022 | 0 | -1.5 | 1.5 |
| C5 | 5 | 1.94399 | 0 | -1.5 | 0.5 |
| C6 | 6 | 2.03306 | 1 | -2.5 | -0.5 |

Tabelle 3.3: 2-Spinon-Singulett-Zustände im XXX-Modell für $N = 8$ (BIEGEL, 2000)

beschränkt sind, vgl. auch (FADDEEV, 1995). Die Bethe-Quantenzahl $I_i = \pm(N - r + 1)/2$ führt stets auf die Lösung $\hat{z}_i = \pm\infty$ (BIEGEL, 2000).

Für den planaren Bereich des XXZ-Modells wurden in Kapitel 3.1 zwei mögliche Parametrisierungen vorgestellt: die hyperbolische Parametrisierung, gegeben durch (3.6) und (3.14), sowie die trigonometrische Parametrisierung, gegeben durch (3.6) und (3.7).

In der hyperbolischen Parametrisierung verkleinert sich der Bereich für reelle endliche Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen in Abhängigkeit von $\gamma = \arccos \Delta$ auf

$$|I_i| < \left(1 - \frac{\gamma}{\pi}\right) \frac{N - r + 1}{2}, \quad i = 1, \dots, r. \quad (3.64)$$

In der trigonometrischen Parametrisierung lassen sich solche allgemeingültigen Abschätzungen nicht mehr angeben, da der Grenzübergang $y_i \rightarrow \pm\infty$ in (3.11) im Term

$$\phi\left(c_1 \frac{y_i - y_j}{1 - y_i y_j}\right) \quad (3.65)$$

in Abhängigkeit vom Vorzeichen von y_j zu unterschiedlichen Vorzeichen führt. Für die 2-Spinon-Triplett-Anregungen mit $S_T^z = 0$ der Achterkette läßt sich allerdings beobachten, daß aufgrund ihrer Lösungsstruktur endliche reelle Lösungen im Bereich

$$|I_i| < \frac{N - r + 3}{2}, \quad i = 1, \dots, r, \quad (3.66)$$

möglich sind (BIEGEL, 2000). Dieser Bereich ist größer als der korrespondierende durch (3.64) gegebene Bereich für die hyperbolische Parametrisierung. Da endliche reelle Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen numerisch einfacher zu bestimmen sind als komplexe, bietet es sich also an, im planaren Bereich des XXZ-Modells die trigonometrische Parametrisierung zu wählen.

Auf den folgenden Seiten sind einige Ergebnisse analytischer und numerischer Rechnungen für die 2-Spinon-Anregungen, unterteilt in die drei Klassen A, B und C, zusammengestellt. Die Abbildungen 3.1, 3.2 und 3.5 zeigen das Verhalten der Magnonimpulse k_i bei Variation des Parameters Δ . Die Abbildungen 3.3, 3.4 und 3.6 zeigen die Veränderung der jeweiligen Zustandsenergien.

Den Ergebnissen liegen die Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen (2.17) für das XXX-Modell und (3.11) für den planaren Bereich des XXZ-Modells zugrunde. Ferner gehen für $\Delta = 0$ (XX-Modell) die in Kapitel 3.3 hergeleiteten Formeln ein. Die verwendeten numerischen Verfahren zur Lösung der Bethe-Ansatz-Gleichungen sind in (BIEGEL, 2000) beschrieben.

In den Abbildungen 3.1, 3.2 und 3.5 sind zusätzlich die jeweiligen Sätze von Bethe-Quantenzahlen eingetragen, die in den angegebenen Parameterbereichen zur Lösung der Bethe-Ansatz-Gleichungen verwendet wurden. Insgesamt läßt sich folgern, daß es im Rahmen des Bethe-Ansatzes möglich ist, die Entwicklung eines Zustandes ausgehend von $\Delta = 1$ über $\Delta = 0$ bis hin zu $\Delta = -1$ zu verfolgen. Allerdings kann es hierbei notwendig werden, aus Stetigkeitsgründen die Bethe-Quantenzahlen zu modifizieren, um in (3.11) den richtigen Zweig des arctan zu wählen (BIEGEL, 2000). Oder man beobachtet für einen bestimmten Wert des Parameters Δ einen Übergang, bei dem zwei vorher ungebundene Magnonen einen gebundenen Zustand bilden, was sich durch das Auftreten eines komplexen Lösungspaares in den Bethe-Ansatz-Gleichungen niederschlägt. In einem solchen Punkt werden die beiden zugehörigen Bethe-Quantenzahlen von einer gemeinsamen Bethe-Quantenzahl für den gebundenen Zustand abgelöst, vgl. Kapitel 3.3.3. Wegen (3.13) bleibt bei allen Modifikationen der Bethe-Quantenzahlen ihre Summe jeweils konstant.

Wie man Abb. 3.1 entnehmen kann, zerfällt die Klasse A in zwei Unterklassen: Die Zustände A3, A5 und A6 werden im gesamten planaren Bereich des XXZ-Modells ausschließlich durch reelle Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen beschrieben, während bei den Zuständen A1, A2 und A4 für $\Delta \leq -0.5$ ein gebundener Zustand aus zwei Magnonen auftritt. Für A3 und A5 ist allerdings ein solcher Übergang von einem reinen Magnonen-Streuzustand zu einem gebundenen Zustand bei $\Delta = -1$ ebenfalls zu erwarten. Bei den Zustandsenergien (vgl. Abb. 3.3) beobachtet man zwei *level crossings*: für die Zustände A1 und A3 bei $\Delta = 0$ und für die Zustände A1 und A2 bei $\Delta \simeq -0.7275$.

Im Falle der Klasse B gehen alle Zustände bei Annäherung an $\Delta = -1$ von reinen Magnon-Streuzuständen in Zustände mit zwei gebundenen Magnonen über, die Zustände B1, B2, B4 und B6 allerdings erst bei $\Delta = -1$ (vgl. Abb. 3.2).

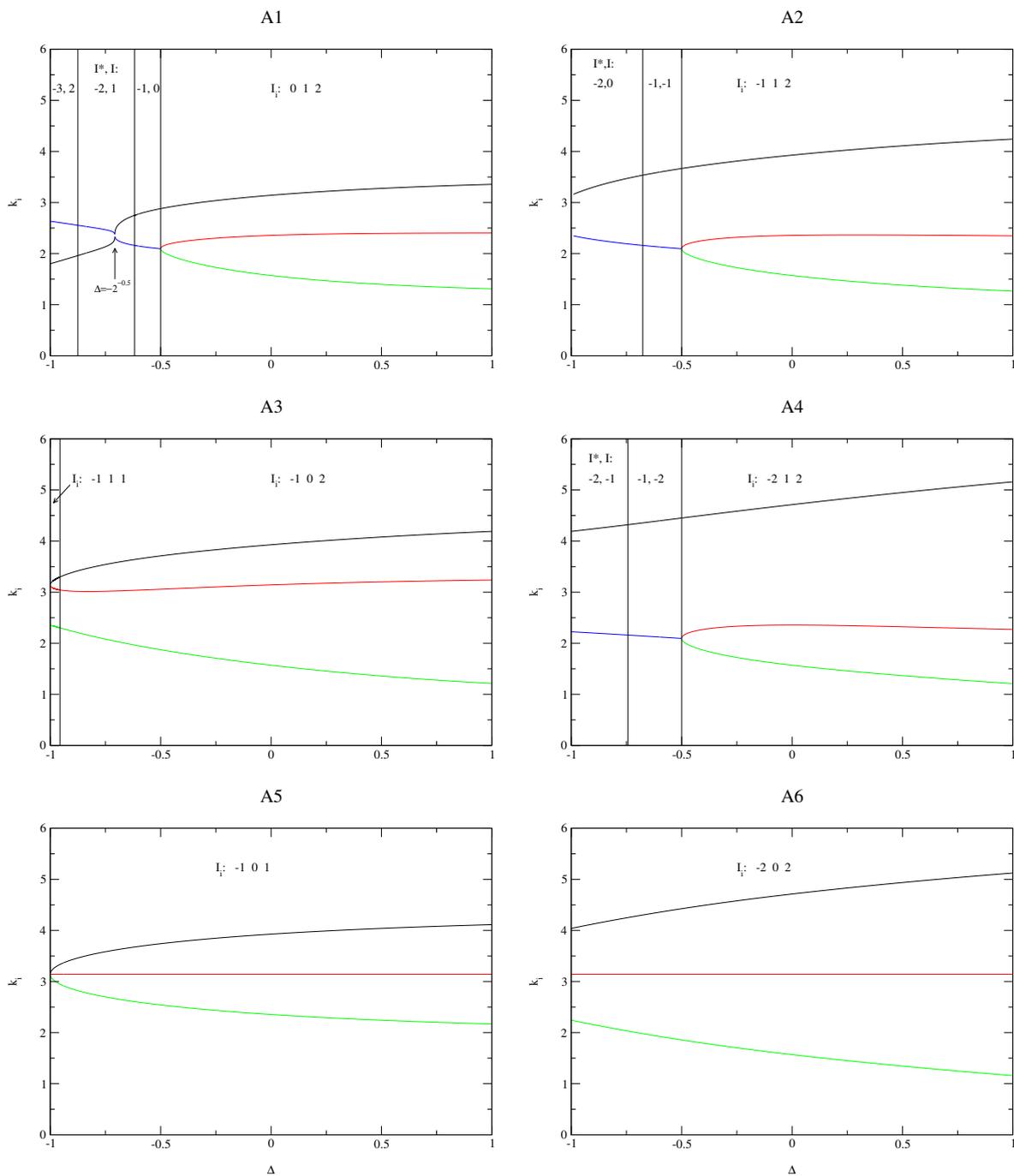


Abbildung 3.1: Verhalten der Magnon-Impulse $\{k_i\}$ für $1 \geq \Delta > -1$ für die 2-Spinon-Anregungen mit $S_T^z = 1$ (Klasse A) und $k \leq \pi$ ($N = 8$)

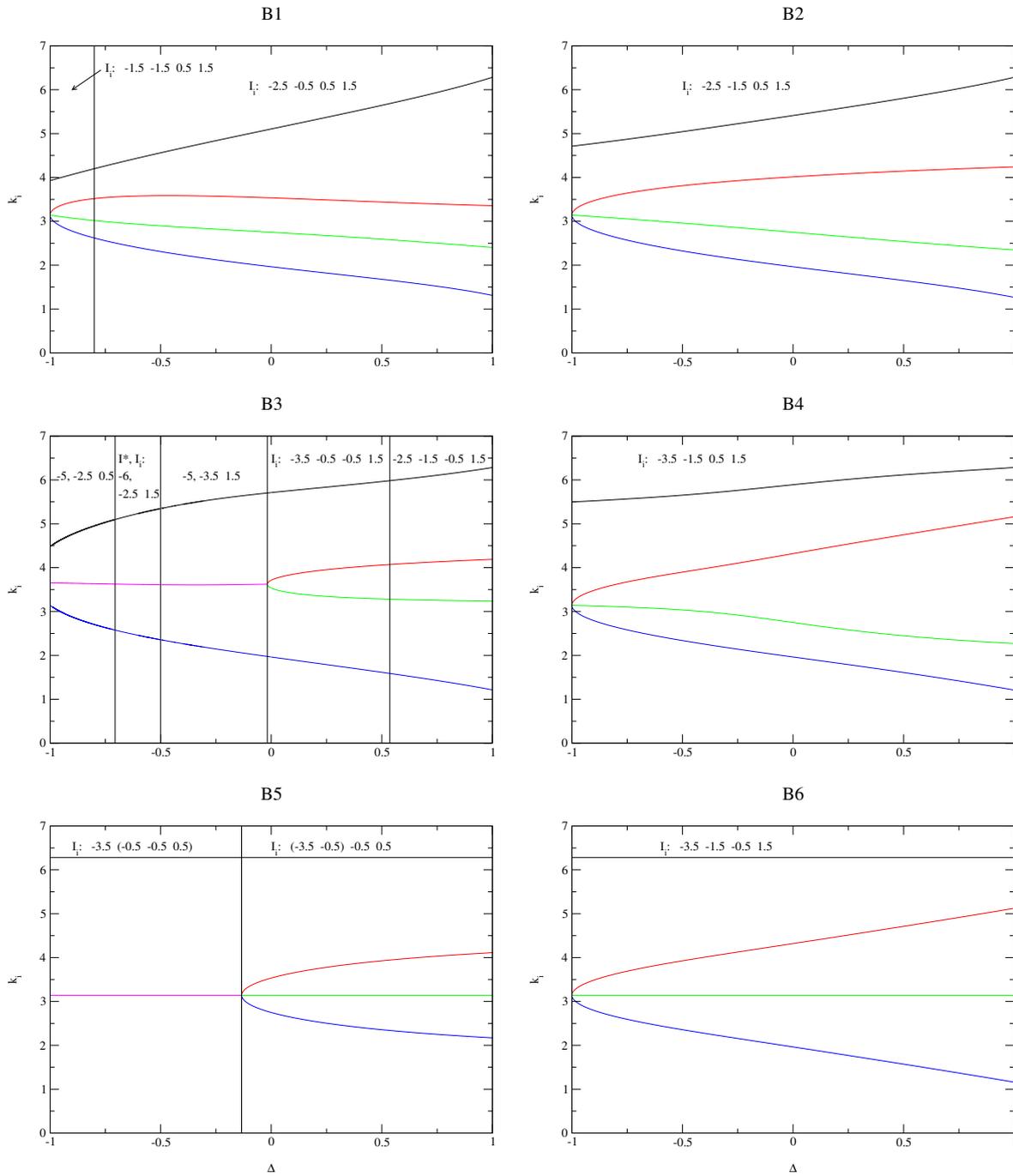


Abbildung 3.2: Verhalten der Magnon-Impulse $\{k_i\}$ für $1 \geq \Delta > -1$ für die 2-Spinon-Anregungen mit $S_T^z = 0$ (Klasse B) und $k \leq \pi$ ($N = 8$)

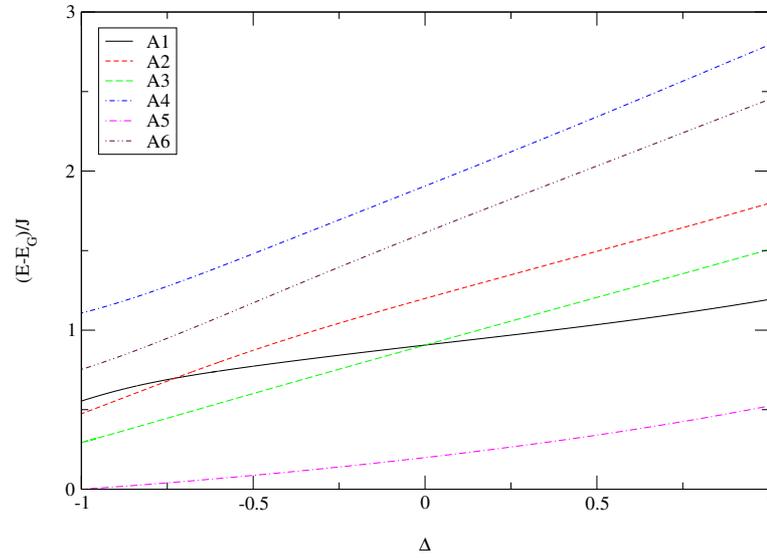


Abbildung 3.3: Verhalten der Zustandsenergie $\frac{E-E_G}{J}$ für $1 \geq \Delta > -1$ für die 2-Spinon-Anregungen der Klasse A mit $S_T^z = 1$ und $k \leq \pi$ ($N = 8$)

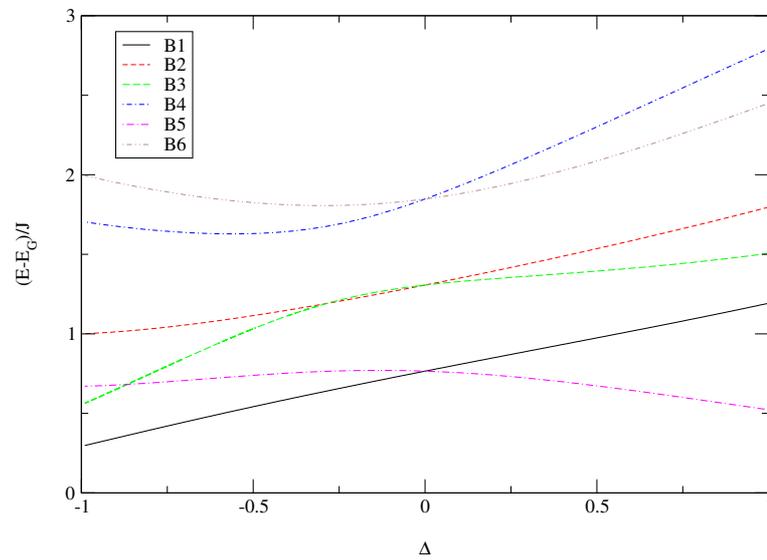


Abbildung 3.4: Verhalten der Zustandsenergie $\frac{E-E_G}{J}$ für $1 \geq \Delta > -1$ für die 2-Spinon-Anregungen mit $S_T^z = 0$ (Klasse B) und $k \leq \pi$ ($N = 8$)

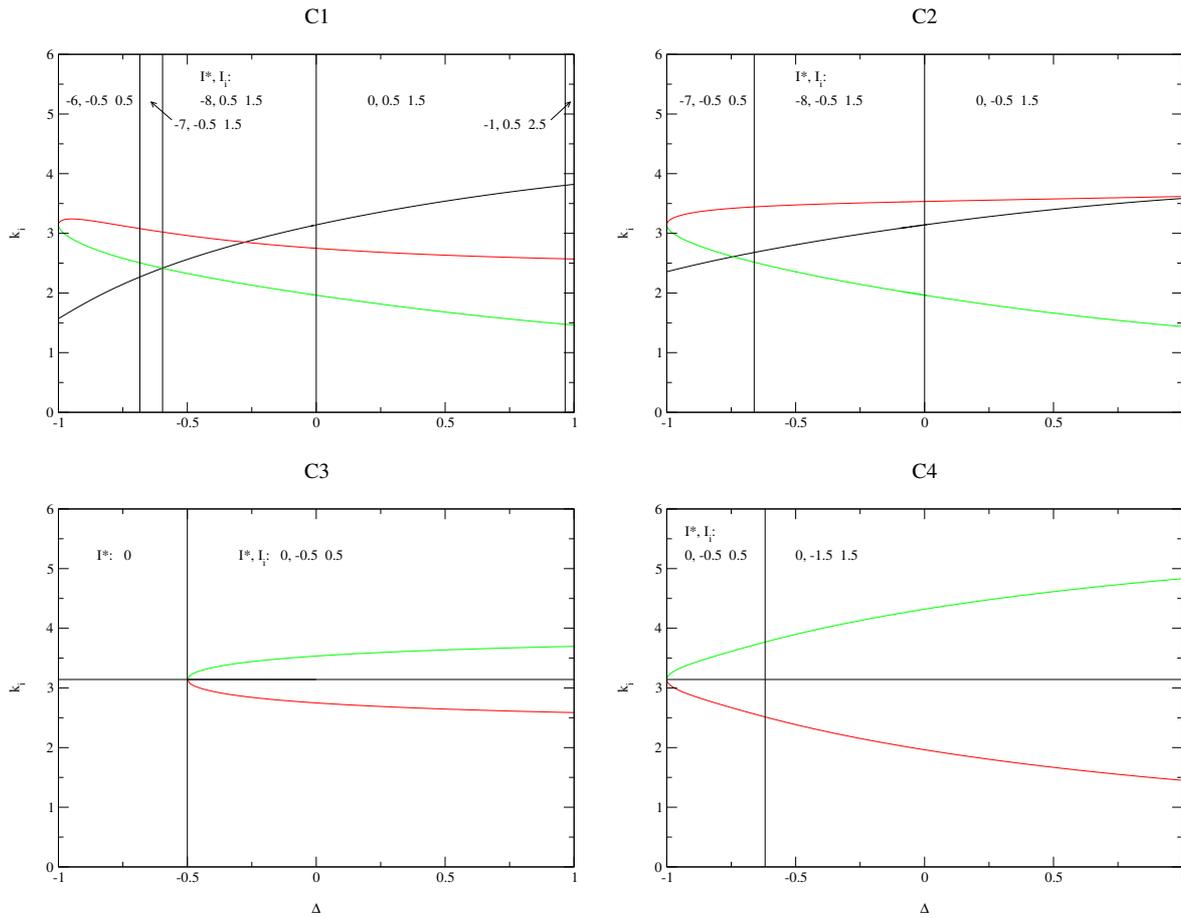


Abbildung 3.5: Verhalten der Magnon-Impulse $\{k^{(*)}, k_i\}$ für $1 \geq \Delta > -1$ für die 2-Spinon-Anregungen mit $S_T^z = 0$ (Klasse C) und $k \leq \pi$ ($N = 8$)

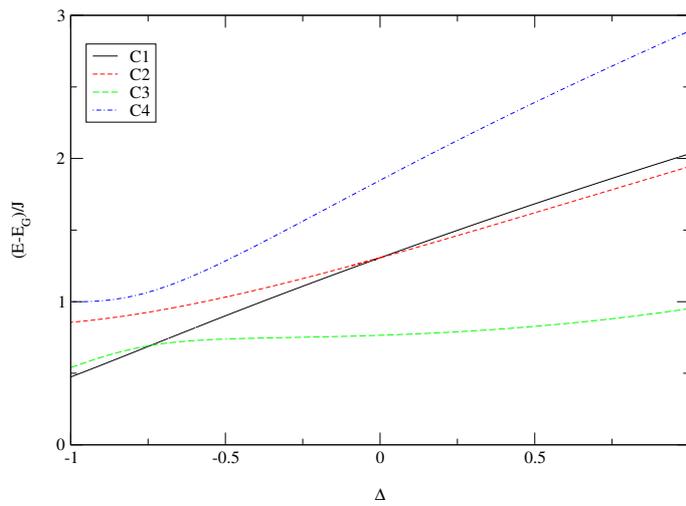


Abbildung 3.6: Verhalten der Zustandsenergie $\frac{E-E_G}{J}$ für $1 \geq \Delta > -1$ für die 2-Spinon-Anregungen mit $S_T^z = 0$ (Klasse C) und $k \leq \pi$ ($N = 8$)

Der Zustand B5 mit $k = \pi$ zeichnet sich – genauso wie B6 – durch eine besondere Lösungsstruktur aus (BIEGEL, 2000). Für $\Delta > -0.134$ haben die vier reellen Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.11) die folgende Gestalt:

$$y_1 = \pm\infty, \quad y_2 = 0, \quad y_3 = -y_4 =: y < \infty. \quad (3.67)$$

Man stellt nun fest, daß y bei Annäherung an den Übergangspunkt von einem Streuzustand in einen gebundenen Zustand gegen Null geht. Die Ergebnisse zu den übrigen Zuständen der Klassen A und B zeigen, daß der Übergang von einem Streuzustand in einen gebundenen Zustand in allen Größen, d.h. in den Energien, Impulsen und Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen, stetig erfolgt. Damit ist zu erwarten, daß die besondere Lösungsstruktur von B5 auch für $\Delta \leq -0.134$ erhalten bleibt. Man findet in der Tat, daß die Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.48) - (3.50), die in Kapitel 3.3.3 für den Fall des Auftretens eines komplex konjugierten Lösungspaares angegeben wurden, eine Lösung der Form

$$y_1 = \pm\infty, \quad y_2 = 0, \quad y_3 = +iv, \quad y_4 = -iv \quad (3.68)$$

zulassen, wobei die Bethe-Quantenzahlen weiterhin durch

$$I_1 = \pm 3.5, \quad I_2 = \pm 0.5 \quad I_3 + I_4 = 0 \pmod{N} \quad (3.69)$$

gegeben sind. Offenbar liegt hier also für $\Delta \leq -0.134$ ein exakter 3-String mit Zentrum 0 vor (TAKAHASHI, 1971; WOYNAROVICH, 1982). Für den Imaginärteil v läßt sich ausgehend von (3.48) - (3.50) folgende Bestimmungsgleichung ableiten:

$$\mathcal{F}(v) = N\varphi\left(\frac{2c_2v}{1+c_2^2v^2}\right) - \varphi\left(\frac{4c_1v(1-v^2)}{(1-v^2)^2+4c_1^2v^2}\right) - \varphi\left(\frac{2c_1v}{1+c_1^2v^2}\right) + \varphi\left(\frac{2c_1v}{v^2+c_1^2}\right) = 0 \quad (3.70)$$

mit $\varphi(x) = 2 \operatorname{artanh} x$, $c_1 = \cot \gamma$, $c_2 = \cot \frac{\gamma}{2}$. v ist also für $\Delta \leq -0.134$ als Nullstelle der Funktion \mathcal{F} gegeben. Für die Zustandsenergie findet man:

$$\frac{E}{J} = \frac{2(v^2+1)(1-\Delta^2)}{v^2-1+(v^2+1)\Delta}. \quad (3.71)$$

Bei den Zustandsenergien (vgl. Abb. 3.4) beobachtet man drei *level crossings* bei $\Delta = 0$ und zwei weitere für $\Delta < 0$.

Die Zustände der Klasse C zeichnen sich dadurch aus, daß (mindestens) ein komplex konjugiertes Lösungspaar der Bethe-Ansatz-Gleichungen auftritt, vgl. Kapitel 2.1. Damit diese Lösungsstruktur beim Übergang zum XX-Modell ($\Delta = 0$) erhalten bleibt, muß es sich gemäß den in Kapitel 3.3.3 gewonnenen Resultaten in allen Fällen um ein kritisches Lösungspaar handeln, das im Punkt $\Delta = 0$ den Impuls $k^{(*)} = \pi$ beiträgt. Wie man Tabelle 3.3 und Abb. 3.5 entnehmen kann, ist dies in allen Fällen auch erfüllt. Darüber hinaus zeichnen sich die Zustände C3 und C4 dadurch aus, daß sich das für $\Delta > 0$ auftretende komplexe Lösungspaar in Form eines exakten 2-Strings mit Zentrum 0 anordnet (KARBACH *et al.*, 1998; BIEGEL, 2000). Diese Struktur bleibt für $\Delta < 0$ auch zunächst erhalten. Allerdings ordnen sich die Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen im Falle von C3 für $\Delta \leq -0.5$ sogar in Form eines exakten 4-Strings mit Zentrum 0 an. Die Lösungsstruktur sieht dann wie folgt aus:

$$y_1 = 0 + it, \quad y_2 = 0 - it, \quad y_3 = 0 + iv, \quad y_4 = 0 - iv \quad (3.72)$$

mit $t = \tan(\gamma/2)$. Ausgehend von (3.48) - (3.50) findet man folgende Bestimmungsgleichung für v :

$$\mathcal{G}(\eta) = N\varphi\left(\frac{2\eta}{1+\eta^2}\right) - \varphi\left(\frac{2a_1(\eta)}{1+a_1^2(\eta)}\right) - \varphi\left(\frac{2a_2(\eta)}{1+a_2^2(\eta)}\right) = 0, \quad (3.73)$$

wobei $\eta = v/t$ und

$$a_1(\eta) = \frac{(1-t^2)\eta}{1-\eta^2 t^2}, \quad (3.74)$$

$$a_2(\eta) = \frac{(1-t^4)\eta}{1-\eta^2 t^4 - \left(\frac{1-t^2}{2}\right)^2 (1-\eta^2)}. \quad (3.75)$$

Für $\Delta \leq -0.5$ ist η bzw. v also als Nullstelle der Funktion $\mathcal{G}(\eta)$ gegeben. Für die Zustandsenergie findet man:

$$\frac{E}{J} = \Delta + \frac{2(v^2 + 1)(1 - \Delta^2)}{v^2 - 1 + (v^2 + 1)\Delta}. \quad (3.76)$$

Für den Zustand C4 kann das Auftreten eines 4-Strings erst für $\Delta = -1$ beobachtet werden. Bei den Zustandsenergien der Anregungen der Klasse C (vgl. Abb. 3.6) beobachtet man zwei *level crossings*: eines bei $\Delta = 0$ und ein weiteres für $\Delta < 0$.

Damit ist beispielhaft gezeigt, daß sich die Evolution von Anregungszuständen bei Variation von Δ im Rahmen des Bethe-Ansatzes beobachten läßt. Die Grundlage hierfür bildet die Charakterisierung der Anregungszustände durch einen Satz von Bethe-Quantenzahlen. Für alle betrachteten Fälle erfolgt die Evolution stetig in den Magnonimpulsen und Zustandsenergien sowie den Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen, vgl. auch (BIEGEL, 2000), wie es aufgrund der Struktur der zugrunde liegenden Formeln und ihrer Herleitung – insbesondere für den Übergang vom XXZ- zum XX-Modell – auch zu erwarten ist.

Anhand der gewonnenen Daten läßt sich feststellen, daß die Zahl der Zustände mit gebundenen Magnonen bei Annäherung an $\Delta = -1$ deutlich zunimmt. So beobachtet man beispielsweise bei allen Zuständen der Klasse B Übergänge von reinen Magnonen-Streuzuständen zu gebundenen Zuständen. Auch nehmen Zahl bzw. Länge der beobachteten Strings für $\Delta < 0$ zu. Anders ausgedrückt: Die Zahl der komplexen Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen nimmt bei Annäherung an $\Delta = -1$ zu.

Darüber hinaus läßt sich beobachten, daß sich im Hinblick auf die Zustandsenergien die *level crossings* im Punkt $\Delta = 0$ häufen. Das Auftreten dieser *level crossings* wird in (DEGUCHI *et al.*, 2001; FABRICIUS & MCCOY, 2001a; FABRICIUS & MCCOY, 2001b) auf eine Realisierung der sl_2 -Loop-Algebra zurückgeführt, vgl. auch Kapitel 3.3.

3.5 Spinonen vs. Fermionen im XX-Modell

Das gesamte Spektrum des XXZ-Modells läßt sich, wie bereits diskutiert, in Form kollektiver Anregungen miteinander wechselwirkender Spinonen beschreiben. Spinonen sind Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen, die dem Pauli-Prinzip für Teilchen mit halbzahligen Spin unterliegen (HALDANE, 1991). An der Stelle $\Delta = 0$ geht das XXZ-Modell in das XX-Modell mit Hamiltonian (3.20) über. Das XX-Modell läßt sich mit Hilfe einer Jordan-Wigner-Transformation (JORDAN & WIGNER, 1928) auf ein System von freien, spinlosen Gitterfermionen abbilden (LIEB *et al.*, 1961; NIEMEIJER, 1967). Es stellt sich somit die Frage, wie diese beiden Beschreibungen zusammenhängen.

Durch die Anwendung der Jordan-Wigner-Transformation wird der Hamiltonian (3.20) diagonalisiert und nimmt für $h = 0$ die folgende Gestalt an (LIEB *et al.*, 1961):

$$H_{XX}^f = J \sum_{i=1}^{\mathcal{N}_f} \cos(p_i) \eta_{p_i}^+ \eta_{p_i}, \quad J > 0. \quad (3.77)$$

Hierin bezeichnen p_i den Impuls des i -ten Fermions und $\eta_{p_i}^+ \eta_{p_i}$ den zugehörigen Besetzungszahloperator. Die Werte, die die Fermion-Impulse p_i annehmen können, hängen davon ab, ob die Gesamtzahl \mathcal{N}_f der im System befindlichen Fermionen gerade oder ungerade ist:

$$\{p_i\} = \begin{cases} \{p^z\} \text{ mit } p^z = \frac{\pi}{N} 2m & : \mathcal{N}_f \text{ ungerade,} \\ \{p^a\} \text{ mit } p^a = \frac{\pi}{N} (2m + 1) & : \mathcal{N}_f \text{ gerade,} \end{cases} \quad m = 0, 1, \dots, N - 1. \quad (3.78)$$

\mathcal{N}_f kann Werte zwischen 0 und N annehmen, d.h. es gibt stets N Einzelzustände, die von jeweils einem Fermion besetzt werden können. Dies führt auf insgesamt 2^N mögliche Eigenzustände des Hamiltonians mit Energie und Gesamtwellenzahl

$$E = J \sum_{i=1}^{\mathcal{N}_f} \cos p_i, \quad k = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}_f} p_i. \quad (3.79)$$

Die gleiche Zahl von Zuständen liefert die Betrachtung in der Spin-Darstellung (vgl. Kapitel 2.1). Die Gesamt-Besetzungszahl \mathcal{N}_f hängt mit der in der Spin-Darstellung zur Beschreibung der Zustände verwendeten Quantenzahl S_T^z wie folgt zusammen (LIEB *et al.*, 1961):

$$S_T^z = \mathcal{N}_f - \frac{N}{2}. \quad (3.80)$$

Vergleicht man (3.80) mit (2.5), so besteht bei gegebenem S_T^z folgender Zusammenhang zwischen der Gesamtzahl \mathcal{N}_f der Fermionen und der Gesamtzahl r der Magnonen:

$$\mathcal{N}_f = N - r. \quad (3.81)$$

Berücksichtigt man nun, daß in der Spin-Darstellung Zustände mit $-S_T^z$ aus den korrespondierenden Zuständen mit $+S_T^z$ durch eine Spinflip-Transformation hervorgehen (vgl. Kapitel 2.1), so läßt sich folgern, daß bei gegebenem $S_T^z \geq 0$ Bethe-Ansatz-Zustände mit r Magnonen im gleichen Unterraum liegen wie Zustände im Fermion-Bild mit der gleichen Gesamtzahl von Fermionen. Allerdings ist die Identifizierung eines Bethe-Ansatz-Zustandes mit einem Fermion-Zustand nur bis auf Ausnahmen möglich.

Diese Ausnahmen liegen bei entarteten Energieniveaus vor und hängen (in der Spin-Darstellung) mit dem Auftreten der in Kapitel 3.3 beschriebenen kritischen Paare zusammen (BIEGEL, 2000). Kritische Paare treten nur in Eigenzuständen auf, die zu entarteten Energieniveaus gehören und liefern keinen Beitrag zur Zustandsenergie (vgl. Kapitel 3.3.2). Liegt ein kritisches Paar vor, so weichen in den betreffenden Unterräumen die Eigenbasen in der Spin-Darstellung und im Fermion-Bild voneinander ab (BIEGEL, 2000; BIEGEL *et al.*, 2003a).

Sofern keine kritischen Paare auftreten, läßt sich unmittelbar der Zusammenhang

$$\frac{2\pi}{N} I_i = \pi - p_i, \quad i = 1, \dots, r = \mathcal{N}_f, \quad (3.82)$$

zwischen den die Bethe-Ansatz-Zustände charakterisierenden Bethe-Quantenzahlen I_i und den Fermion-Impulsen p_i angeben (BIEGEL *et al.*, 2003a). Dies vereinfacht das Auffinden der Sätze von Bethe-Quantenzahlen, die einen Eigenzustand in der Spin-Darstellung charakterisieren, sofern die entsprechenden Fermion-Impulse bekannt sind, und umgekehrt. Im Falle reeller kritischer Paare ist (3.82) nicht erfüllt. Vielmehr sind die Bethe-Quantenzahlen I_i gegenüber den Vorhersagen aus dem Fermion-Bild verschoben. Komplexe kritische Paare werden zudem durch die gemeinsame Bethe-Quantenzahl $I^{(*)} = 0$ beschrieben (vgl. Kapitel 3.3.3 und 3.4).

Für eine ausführliche Diskussion der Zusammenhänge sei auf (BIEGEL, 2000; BIEGEL *et al.*, 2003a) verwiesen.

4 Determinantendarstellung von Matrixelementen

Neben der Bestimmung des Anregungsspektrums ist vor allem auch die Untersuchung der dynamischen Eigenschaften von Quantenspinsystemen, wie sie beispielsweise in Experimenten an entsprechenden Materialien zutage treten, von hohem Interesse. Informationen über die dynamischen Eigenschaften sind insbesondere in den dynamischen Strukturfaktoren, die den Kern der Formeln zur Bestimmung von Wirkungsquerschnitten bei Streuexperimenten bilden, enthalten. Diese Strukturfaktoren bilden damit eine natürliche Schnittstelle zwischen Theorie und Experiment: Sie können experimentell gemessen werden und – sofern entsprechende Modelle und Verfahren zur Verfügung stehen – theoretisch berechnet werden. Dies wird in Anhang A genauer erläutert.

Mit den Fortschritten auf dem Gebiet der Kristallzüchtung stehen Experimentatoren mittlerweile immer mehr Materialien zur Verfügung, bei denen die magnetischen Eigenschaften von quasi-eindimensionalen Strukturen bestimmt werden. Beispiele hierfür sind Kalium-Trifluorocuprat, KCuF_3 (NAGLER *et al.*, 1991; TENNANT *et al.*, 1993; TENNANT *et al.*, 1995a), Kupferbenzoat (*copper benzoate*), $\text{Cu}(\text{C}_6\text{D}_5\text{COO})_2 \cdot 3\text{D}_2\text{O}$ (DENDER *et al.*, 1996), oder Kupferpyrazindinitrat (*copper pyrazine dinitrate*), CuPzN (STONE *et al.*, 2003) bzw. $\text{Cu}(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{NO}_3)_2$ (HAMMAR *et al.*, 1999). Bei allen diesen Beispielen kann zur Interpretation der gewonnenen Daten der Heisenberg-Antiferromagnet (XXX-Modell) bzw. das XXZ-Modell herangezogen werden.

Im Rahmen des Bethe-Ansatzes stehen für die diesem Lösungsverfahren zugänglichen Modelle mit den Bethe-Ansatz-Wellenfunktionen die exakten Eigenzustände zur Verfügung. Damit ist es grundsätzlich möglich, die in die Strukturfaktoren eingehenden Übergangsmatrixelemente (vgl. Anhang A) explizit auszurechnen. Aufgrund des hohen numerischen Aufwandes bleibt man hier allerdings auf kleine Systemgrößen, d.h. im Falle der Spinketten auf kleine Kettenlängen N , beschränkt (KARBACH *et al.*, 2000; KARBACH & MÜLLER, 2000; KARBACH *et al.*, 2002).

Kitanine, Maillet und Terras zeigen in ihrer Arbeit (KITANINE *et al.*, 1999) einen Weg, die Berechnung von Übergangsmatrixelementen für die lokalen Spinoperatoren $\tilde{S}_{(i)}$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf die Berechnung von Determinanten zurückzuführen. In diese Determinanten gehen nicht mehr die Bethe-Ansatz-Wellenfunktionen als Ganzes, sondern nur noch die Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen – quasi als Parameter – ein.

In (KITANINE *et al.*, 1999) analysieren Kitanine et al. den Zugang zu Übergangsmatrixelementen und Korrelationsfunktionen via Bethe-Ansatz von einem einheitlichen algebraischen Standpunkt aus. Es gelingt ihnen, im Rahmen der quanteninversen Streutheorie bzw. des algebraischen Bethe-Ansatzes (vgl. Kapitel 2.2) durch einen geschickten Basiswechsel – zur Basis der sogenannten faktorisierenden F -Matrizen (MAILLET & DE SANTOS, 1996) – eine vergleichsweise einfache Darstellung für die in der Monodromie-Matrix (2.52) auftretenden Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren B und C anzugeben, in der die lokalen Spin-Operatoren unmittelbar auftreten.

Der Basiswechsel für einen Operator $\mathbb{O}(z)$ von der ursprünglichen Basis zur Basis der F -Matrizen ist in diesem Zusammenhang durch

$$\bar{\mathbb{O}}(z; \xi_1, \dots, \xi_N) = F(z; \xi_1, \dots, \xi_N) \cdot \mathbb{O}(z; \xi_1, \dots, \xi_N) \cdot F^{-1}(z; \xi_1, \dots, \xi_N) \quad (4.1)$$

mit

$$F(z; \xi_1, \dots, \xi_N) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ C(z; \xi_1, \dots, \xi_N) & D(z; \xi_1, \dots, \xi_N) \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

gegeben (MAILLET & DE SANTOS, 1996; KITANINE *et al.*, 1999). Hierbei sind alle Notationen wie in Kapitel 2.2 gewählt, F bezeichnet die hier zusätzlich auftretenden F -Matrizen. Die Parameter ξ_i , $i = 1, \dots, N$, werden von Kitanine et al. eingeführt, um einen ausreichend großen Parameterraum zur Verfügung zu haben. Jedem der N lokalen Quantenräume h_i wird ein Parameter ξ_i zugeordnet.⁵

Nach dem Basiswechsel (4.1) läßt sich der Operator D in der folgenden Form schreiben:

⁵Um die in (KITANINE *et al.*, 1999) angegebenen Resultate auf das XXX- und das XXZ-Modell anwenden zu können, ist stets $\xi_i = 0$, $i = 1, \dots, N$, zu setzen.

$$\bar{D}(z; \xi_1, \dots, \xi_N) = \bigotimes_{j=1}^N \left(\begin{array}{cc} b(z, \xi_j) & 0 \\ 0 & 1 \end{array} \right)_{[j]}. \quad (4.3)$$

Die Operatoren B und C lassen sich nach dem Basiswechsel (4.1) wie folgt angeben:

$$\bar{B}(z; \xi_1, \dots, \xi_N) = \sum_{i=1}^N \left[S_i^- c(z, \xi_i) \bigotimes_{j \neq i} \left(\begin{array}{cc} b(z, \xi_j) & 0 \\ 0 & b^{-1}(\xi_j, \xi_i) \end{array} \right)_{[j]} \right], \quad (4.4)$$

$$\bar{C}(z; \xi_1, \dots, \xi_N) = \sum_{i=1}^N \left[S_i^+ c(z, \xi_i) \bigotimes_{j \neq i} \left(\begin{array}{cc} b(z, \xi_j) b^{-1}(\xi_i, \xi_j) & 0 \\ 0 & 1 \end{array} \right)_{[j]} \right]. \quad (4.5)$$

Diese Darstellung ermöglicht es, die lokalen Spinoperatoren an jedem Ort i der Spinkette durch die Elemente der Monodromiematrix auszudrücken (KITANINE *et al.*, 1999):

$$S_i^- = \prod_{j=1}^{i-1} [A(\xi_j) + D(\xi_j)] \cdot B(\xi_i) \cdot \prod_{j=i+1}^N [A(\xi_j) + D(\xi_j)], \quad (4.6)$$

$$S_i^+ = \prod_{j=1}^{i-1} [A(\xi_j) + D(\xi_j)] \cdot C(\xi_i) \cdot \prod_{j=i+1}^N [A(\xi_j) + D(\xi_j)], \quad (4.7)$$

$$S_i^z = \prod_{j=1}^{i-1} [A(\xi_j) + D(\xi_j)] \cdot (A(\xi_i) - D(\xi_i)) \cdot \prod_{j=i+1}^N [A(\xi_j) + D(\xi_j)]. \quad (4.8)$$

So läßt sich schließlich die Berechnung von Skalarprodukten zwischen zwei Bethe-Ansatz-Wellenfunktionen auf die Berechnung von Determinanten zurückführen, in die ausschließlich elementare Funktionen der jeweiligen Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen eingehen.

Diese Überlegungen bilden den Ausgangspunkt für die im folgenden gezeigten Resultate zur Determinantendarstellung von Matrixelementen im XXX-, XXZ- und XX-Modell. Diskutiert wird die Determinantendarstellung für die Übergangsmatrixelemente

$$M_\lambda^\mu(q) = \frac{|\langle \psi_0 | S_q^\mu | \psi_\lambda \rangle|^2}{\|\psi_0\|^2 \|\psi_\lambda\|^2}, \quad \mu = z, +, -, \quad (4.9)$$

des Spin-Fluktuationsoperators

$$S_q^\mu = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{iqn} S_n^\mu, \quad \mu = z, +, -, \quad (4.10)$$

der die zu einer ausgezeichneten Richtung parallelen ($\mu = z$) bzw. senkrechten ($\mu = +, -$) Spin-Fluktuationen bei der Temperatur $T = 0$ beschreibt (vgl. Anhang A). Der Zustand $|\psi_0\rangle$ bezeichnet den jeweiligen Grundzustand des Modells zu einer fest vorgegebenen Magnetisierung M_z (vgl. Kapitel 2.1). Der Zustand $|\psi_\lambda\rangle$ bezeichnet entsprechend einen angeregten Zustand. Der Grundzustand soll durch den Satz $\{I_i^0\}_r$ von r Bethe-Quantenzahlen charakterisiert werden, der angeregte Zustand entsprechend durch $\{I_i\}_{r'}$. r und r' kennzeichnen hierbei den jeweiligen invarianten Unterraum, in dem die Zustände liegen (vgl. Kapitel 2.1).

Da Zustände aus Unterräumen zu verschiedenem r senkrecht aufeinanderstehen, müssen $|\psi_0\rangle$ und $S_q^\mu |\psi_\lambda\rangle$ notwendig im gleichen Unterraum liegen, damit $M_\lambda^\mu(q)$ nicht verschwindet. Da S_q^μ für $\mu = \pm$ wie ein Auf- bzw. Absteigeoperator wirkt, nicht aber für $\mu = z$, bedeutet dies, daß nichtverschwindende Beiträge zu M_λ^z für $r' = r$, zu M_λ^+ für $r' = r + 1$ und zu M_λ^- für $r' = r - 1$ auftreten (vgl. auch Kapitel 2.1). Dies ist bei den im folgenden angegebenen Formeln stets schon berücksichtigt.

4.1 Matrixelemente im XXX-Modell

Im XXX-Modell mit Hamiltonian (2.22) bzw. (2.29) erhält man ausgehend von [(KITANINE *et al.*, 1999), (5.12)]⁶ zunächst folgenden Ausdruck für die Matrixelemente des Spin-Fluktuationsoperators S_q^z (BIEGEL *et al.*, 2002):

$$M_\lambda^z(q) = \frac{N}{4} \frac{|\hat{\Omega}^z|^2}{\|\psi_0\|^2 \|\psi_\lambda\|^2}, \quad (4.11)$$

wobei

$$\hat{\Omega}^z = \hat{\Omega}^z(\{\hat{z}_j^0\}_r, \{\hat{z}_j\}_r) = \left(\prod_{j=1}^r \frac{\hat{z}_j^0 + \iota}{\hat{z}_j + \iota} \right) \frac{2^r}{\prod_{i<j}^r (\hat{z}_i^0 - \hat{z}_j^0) \prod_{i>j}^r (\hat{z}_i - \hat{z}_j)} \det(\hat{H} - 2\hat{P}) \quad (4.12)$$

mit

$$\hat{H}_{a,b} = \frac{1}{\hat{z}_a^0 - \hat{z}_b} \left(\prod_{j \neq a}^r (\hat{z}_j^0 - \hat{z}_b + 2\iota) - \hat{d}(\hat{z}_b) \prod_{j \neq a}^r (\hat{z}_j^0 - \hat{z}_b - 2\iota) \right), \quad (4.13)$$

$$\hat{P}_{a,b} = \frac{1}{(\hat{z}_a^0)^2 + 1} \prod_{j=1}^r (\hat{z}_j - \hat{z}_b + 2\iota), \quad a, b = 1, \dots, r, \quad (4.14)$$

und

$$\hat{d}(\hat{z}_i) = \left(\frac{\hat{z}_i - \iota}{\hat{z}_i + \iota} \right)^N. \quad (4.15)$$

Hierbei bezeichnet $\{\hat{z}_i^0\}_r$ bzw. $\{\hat{z}_i\}_r$ den jeweiligen Satz von Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen (2.16) oder (2.17), der zum Grundzustand $|\psi_0\rangle$ bzw. zum angeregten Zustand $|\psi_\lambda\rangle$ gehört.

Weiterhin gehen in (4.11) die Normen der Bethe-Ansatz-Wellenfunktionen ein (KOREPIN, 1982). In der hier verwendeten Notation mit den Parametern \hat{z}_i nimmt die Normformel für die Bethe-Ansatz-Wellenfunktionen – die „Formel von Gaudin“ (KITANINE *et al.*, 1999) – folgende Gestalt an (KOREPIN, 1982; SLAVNOV, 1989; IZERGIN *et al.*, 1999):

$$\|\psi_\lambda\|^2 = \left(\prod_{i \neq j}^r \frac{\hat{z}_i - \hat{z}_j - 2\iota}{\hat{z}_i - \hat{z}_j} \right) \det \mathcal{N}(\{\hat{z}_i\}) \quad (4.16)$$

mit

$$\mathcal{N}_{a,b} = 2\iota \frac{\partial}{\partial \hat{z}_b} \ln \left\{ \left(\frac{\hat{z}_a + \iota}{\hat{z}_a - \iota} \right)^N \prod_{k \neq a}^r \frac{\hat{z}_a - \hat{z}_k - 2\iota}{\hat{z}_a - \hat{z}_k + 2\iota} \right\}, \quad a, b = 1, \dots, r. \quad (4.17)$$

Führt man die in (4.17) auftretende partielle Ableitung aus, so läßt sich schließlich folgende kompakte Form für das Normquadrat angeben:

$$\|\psi_\lambda\|^2 = 2^{r^2} \left(\prod_{i<j}^r \frac{1}{\hat{K}(\hat{z}_i - \hat{z}_j) \cdot (\hat{z}_i - \hat{z}_j)^2} \right) \det \mathcal{N}'(\{\hat{z}_i\}), \quad (4.18)$$

vgl. auch (GAUDIN *et al.*, 1981), mit

⁶Der Zusammenhang zwischen den hier verwendeten Variablen \hat{z}_i und den in (KITANINE *et al.*, 1999) verwendeten Variablen λ_i ist durch $\lambda_i = (\hat{z}_i - \iota)/2$ gegeben.

$$\mathcal{N}'_{a,b} = \left[N\hat{\kappa}(\hat{z}_a) - \sum_{j=1}^r \hat{K}(\hat{z}_a - \hat{z}_j) \right] \delta_{a,b} + \hat{K}(\hat{z}_a - \hat{z}_b). \quad (4.19)$$

Allerdings vereinfacht eine Reskalierung von \mathcal{N}' bezüglich der Kettenlänge N die numerische Zugänglichkeit. Man hat in diesem Fall:

$$\|\psi_\lambda\|^2 = 2^{r^2} N^r \left(\prod_{i<j}^r \frac{1}{\hat{K}(\hat{z}_i - \hat{z}_j) \cdot (\hat{z}_i - \hat{z}_j)^2} \right) \left(\prod_{i=1}^r \hat{\kappa}(\hat{z}_i) \right) \det \hat{N}(\{\hat{z}_i\}) \quad (4.20)$$

mit

$$\hat{N}_{a,b} = \left[1 - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^r \frac{\hat{K}(\hat{z}_a - \hat{z}_j)}{\hat{\kappa}(\hat{z}_a)} \right] \delta_{a,b} + \frac{1}{N} \frac{\hat{K}(\hat{z}_a - \hat{z}_b)}{\hat{\kappa}(\hat{z}_a)}. \quad (4.21)$$

$\delta_{a,b}$ meint das Kroneckersymbol. Die beiden Hilfsfunktionen $\hat{\kappa}(\hat{z})$ und $\hat{K}(\hat{z})$ sind wie folgt definiert:

$$\hat{\kappa}(\hat{z}) = \frac{2}{1 + \hat{z}^2}, \quad \hat{K}(\hat{z}) = \frac{4}{4 + \hat{z}^2}. \quad (4.22)$$

Sofern alle Lösungen \hat{z}_i der Bethe-Ansatz-Gleichungen für den angeregten Zustand reell sind, läßt sich folgender Ausdruck für das Betragsquadrat von (4.12) ableiten:

$$|\Omega^z|^2 = 2^{2r} \frac{\prod_{i=1}^r \frac{\hat{\kappa}(\hat{z}_i)}{\hat{\kappa}(\hat{z}_i^0)}}{\prod_{i<j}^r (\hat{z}_i^0 - \hat{z}_j^0)^2 \prod_{i<j}^r (\hat{z}_i - \hat{z}_j)^2} \left| \det(\hat{H} - 2\hat{P}) \right|^2. \quad (4.23)$$

Eine Reskalierung von \hat{H} und \hat{P} bezüglich auftretender Potenzen von 2 und der Kettenlänge N erlaubt es nun weiter, (4.13), (4.14), (4.20) und (4.23) in eine einheitliche Form zu bringen. Gleichzeitig vereinfacht sich dadurch wie im Falle der Normformel (4.20) die numerische Zugänglichkeit. Letztendlich wird die Berechnung des Matrixelementes (4.11) auf die Berechnung dreier $r \times r$ -Determinanten reduziert:

$$M_\lambda^z(q) = \frac{N}{4} \frac{\hat{\mathcal{K}}_r(\{\hat{z}_i^0\})}{\hat{\mathcal{K}}_r(\{\hat{z}_i\})} \frac{|\det(\hat{H} - \frac{2}{N}\mathbf{1})|^2}{\det \hat{N}(\{\hat{z}_i\}) \det \hat{N}(\{\hat{z}_i^0\})} \quad (4.24)$$

mit

$$\hat{H}_{a,b} = \hat{F}_N(\hat{z}_a^0, \hat{z}_b) \left(\prod_{j=1}^r \frac{1}{\hat{G}(\hat{z}_j - \hat{z}_b)} \right) \left[\prod_{j \neq a}^r \hat{G}(\hat{z}_j^0 - \hat{z}_b) - \hat{d}(\hat{z}_b) \prod_{j \neq a}^r \hat{G}^*(\hat{z}_j^0 - \hat{z}_b) \right], \quad (4.25)$$

$a, b = 1, \dots, r.$

Die hierin auftretenden Hilfsfunktionen sind wie folgt definiert:

$$\hat{\mathcal{K}}_r(\{\hat{z}_i\}) = \prod_{i<j}^r \hat{K}(\hat{z}_i - \hat{z}_j), \quad \hat{G}(\hat{z}) = \frac{\hat{z}}{2} + \iota, \quad \hat{G}^*(\hat{z}) = \frac{\hat{z}}{2} - \iota \quad (4.26)$$

sowie

$$\hat{F}_N(\hat{z}, \hat{z}') = \frac{1}{N \cdot (\hat{z} - \hat{z}') \cdot \hat{\kappa}(\hat{z})} = \frac{1}{2N} \frac{1 + \hat{z}^2}{\hat{z} - \hat{z}'}. \quad (4.27)$$

Die beiden Funktionen $\hat{K}(\hat{z})$ und $\hat{G}(\hat{z})$ hängen via

$$\hat{K}(\hat{z}) = |\hat{G}(\hat{z})|^{-2} \quad (4.28)$$

zusammen. Ferner ist

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

Berücksichtigt man, daß sich die algebraischen Bethe-Ansatz-Gleichungen (2.16) im hier diskutierten Rahmen in der Form

$$\hat{d}(\hat{z}_i) = \prod_{j \neq i}^r \frac{\hat{G}^*(\hat{z}_i - \hat{z}_j)}{\hat{G}(\hat{z}_i - \hat{z}_j)} = - \prod_{j=1}^r \frac{\hat{G}(\hat{z}_j - \hat{z}_i)}{\hat{G}^*(\hat{z}_j - \hat{z}_i)} \quad (4.30)$$

schreiben lassen, so kann man die Matrixelemente $\hat{H}_{a,b}$ in eine symmetrische Gestalt überführen. Man erhält so nach Umbenennung der Matrix \hat{H} in $\hat{\Gamma}$ zur besseren Unterscheidung:

$$M_\lambda^z(q) = \frac{N \hat{\mathcal{K}}_r(\{\hat{z}_i^0\})}{4 \hat{\mathcal{K}}_r(\{\hat{z}_i\})} \frac{|\det(\hat{\Gamma} - \frac{2}{N}\mathbf{1})|^2}{\det \hat{N}(\{\hat{z}_i\}) \det \hat{N}(\{\hat{z}_i^0\})} \quad (4.31)$$

mit

$$\hat{\Gamma}_{a,b} = \hat{F}_N(\hat{z}_a^0, \hat{z}_b) \left[\frac{1}{\hat{G}(\hat{z}_a^0 - \hat{z}_b)} \prod_{j=1}^r \frac{\hat{G}(\hat{z}_j^0 - \hat{z}_b)}{\hat{G}(\hat{z}_j - \hat{z}_b)} + \frac{1}{\hat{G}^*(\hat{z}_a^0 - \hat{z}_b)} \prod_{j=1}^r \frac{\hat{G}^*(\hat{z}_j^0 - \hat{z}_b)}{\hat{G}^*(\hat{z}_j - \hat{z}_b)} \right], \quad (4.32)$$

$a, b = 1, \dots, r.$

Durch analoge Betrachtungen findet man ausgehend von [(KITANINE *et al.*, 1999), (5.3)] zunächst folgenden Ausdruck für $M_\lambda^+(q)$:

$$M_\lambda^+(q) = N \frac{|\hat{\Omega}^+|^2}{\|\psi_0\|^2 \|\psi_\lambda\|^2}, \quad (4.33)$$

wobei

$$\hat{\Omega}^+ = \hat{\Omega}^+(\{\hat{z}_j^0\}_r, \{\hat{z}_j\}_{r+1}) = \left(\frac{\prod_{j=1}^{r+1} \hat{z}_j + \iota}{\prod_{j=1}^r \hat{z}_j^0 + \iota} \right) \frac{2^{r+1}}{\prod_{i < j} (\hat{z}_i^0 - \hat{z}_j^0) \prod_{i > j} (\hat{z}_i - \hat{z}_j)} \det \hat{H}^+ \quad (4.34)$$

mit

$$\hat{H}_{a,b}^+ = \frac{1}{\hat{z}_a - \hat{z}_b^0} \left(\prod_{j \neq a}^{r+1} (\hat{z}_j - \hat{z}_b^0 + 2\iota) - \hat{d}(\hat{z}_b^0) \prod_{j \neq a}^{r+1} (\hat{z}_j - \hat{z}_b^0 - 2\iota) \right), \quad (4.35)$$

$$\hat{H}_{a,r+1}^+ = \frac{1}{\hat{z}_a^2 + 1}, \quad a = 1, \dots, r+1, \quad b = 1, \dots, r.$$

Ausgehend von [(KITANINE *et al.*, 1999), (5.7)] erhält man für $M_\lambda^-(q)$ zunächst:

$$M_\lambda^-(q) = N \frac{|\hat{\Omega}^-|^2}{\|\psi_0\|^2 \|\psi_\lambda\|^2}, \quad (4.36)$$

wobei

$$\hat{\Omega}^- = \hat{\Omega}^-(\{\hat{z}_j^0\}_r, \{\hat{z}_j\}_{r-1}) = \left(\frac{\prod_{j=1}^r \hat{z}_j^0 + \iota}{\prod_{j=1}^{r-1} \hat{z}_j + \iota} \right) \frac{2^r}{\prod_{i<j}^{r-1} (\hat{z}_i - \hat{z}_j) \prod_{i>j}^r (\hat{z}_i^0 - \hat{z}_j^0)} \det \hat{H}^- \quad (4.37)$$

mit

$$\begin{aligned} \hat{H}_{a,b}^- &= \frac{1}{\hat{z}_a^0 - \hat{z}_b} \left(\prod_{j \neq a}^r (\hat{z}_j^0 - \hat{z}_b + 2\iota) - \hat{d}(\hat{z}_b) \prod_{j \neq a}^r (\hat{z}_j^0 - \hat{z}_b - 2\iota) \right), \\ \hat{H}_{a,r}^- &= \frac{1}{(\hat{z}_a^0)^2 + 1}, \quad a = 1, \dots, r, \quad b = 1, \dots, r-1. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Sofern alle Lösungen \hat{z}_i der Bethe-Ansatz-Gleichungen für den jeweils angeregten Zustand reell sind, läßt sich auch hier eine kompakte Form für die Berechnung der Matrixelemente analog zu (4.24) ableiten:

$$M_\lambda^\pm(q) = \left(\frac{\hat{\mathcal{K}}_{r \pm 1}(\{\hat{z}_i\})}{\hat{\mathcal{K}}_r(\{\hat{z}_i^0\})} \right)^{\pm 1} \frac{|\det \hat{H}^\pm|^2}{\det \hat{N}(\{\hat{z}_i\}) \det \hat{N}(\{\hat{z}_i^0\})}, \quad (4.39)$$

wobei

$$\begin{aligned} \hat{H}_{a,b}^+ &= \hat{F}_N(\hat{z}_a, \hat{z}_b^0) \left(\prod_{j=1}^r \frac{1}{\hat{G}(\hat{z}_j^0 - \hat{z}_b^0)} \right) \left[\prod_{j \neq a}^{r+1} \hat{G}(\hat{z}_j - \hat{z}_b^0) - \hat{d}(\hat{z}_b^0) \prod_{j \neq a}^{r+1} \hat{G}^*(\hat{z}_j - \hat{z}_b^0) \right], \\ \hat{H}_{a,r+1}^+ &= 1, \quad a = 1, \dots, r+1, \quad b = 1, \dots, r, \end{aligned} \quad (4.40)$$

bzw.

$$\begin{aligned} \hat{H}_{a,b}^- &= \hat{F}_N(\hat{z}_a^0, \hat{z}_b) \left(\prod_{j=1}^{r-1} \frac{1}{\hat{G}(\hat{z}_j - \hat{z}_b)} \right) \left[\prod_{j \neq a}^r \hat{G}(\hat{z}_j^0 - \hat{z}_b) - \hat{d}(\hat{z}_b) \prod_{j \neq a}^r \hat{G}^*(\hat{z}_j^0 - \hat{z}_b) \right], \\ \hat{H}_{a,r}^- &= 1, \quad a = 1, \dots, r, \quad b = 1, \dots, r-1. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Die hierzu korrespondierenden Matrizen $\hat{\Gamma}^\pm$ sind wie folgt gegeben:

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}_{a,b}^+ &= \hat{F}_N(\hat{z}_a, \hat{z}_b^0) \left[\frac{\hat{G}(\hat{z}_{r+1} - \hat{z}_b^0)}{\hat{G}(\hat{z}_a - \hat{z}_b^0)} \prod_{j=1}^r \frac{\hat{G}(\hat{z}_j - \hat{z}_b^0)}{\hat{G}(\hat{z}_j^0 - \hat{z}_b^0)} + \frac{\hat{G}^*(\hat{z}_{r+1} - \hat{z}_b^0)}{\hat{G}^*(\hat{z}_a - \hat{z}_b^0)} \prod_{j=1}^r \frac{\hat{G}^*(\hat{z}_j - \hat{z}_b^0)}{\hat{G}^*(\hat{z}_j^0 - \hat{z}_b^0)} \right], \\ \hat{\Gamma}_{a,r+1}^+ &= 1, \quad a = 1, \dots, r+1, \quad b = 1, \dots, r, \end{aligned} \quad (4.42)$$

bzw.

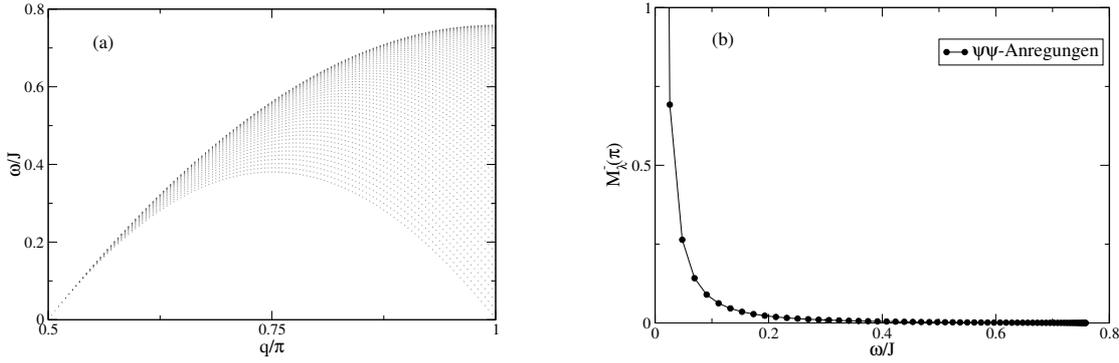


Abbildung 4.1: Spektrum der $\psi\psi$ -Anregungen mit $q \leq \pi$ (a) und zugehörige Matrixelemente $M_\lambda^-(\pi)$ (b) im XXX-Modell für eine Kette der Länge $N = 512$ bei Magnetisierung $M_z = N/4$

$$\hat{\Gamma}_{a,b}^- = \hat{F}_N(\hat{z}_a^0, \hat{z}_b) \left[\frac{\hat{G}(\hat{z}_r^0 - \hat{z}_b)}{\hat{G}(\hat{z}_a^0 - \hat{z}_b)} \prod_{j=1}^{r-1} \frac{\hat{G}(\hat{z}_j^0 - \hat{z}_b)}{\hat{G}(\hat{z}_j - \hat{z}_b)} + \frac{\hat{G}^*(\hat{z}_r^0 - \hat{z}_b)}{\hat{G}^*(\hat{z}_a^0 - \hat{z}_b)} \prod_{j=1}^{r-1} \frac{\hat{G}^*(\hat{z}_j^0 - \hat{z}_b)}{\hat{G}^*(\hat{z}_j - \hat{z}_b)} \right], \quad (4.43)$$

$$\hat{\Gamma}_{a,r}^- = 1, \quad a = 1, \dots, r, \quad b = 1, \dots, r-1.$$

In dieser Darstellung ist die (numerische) Berechnung von Übergangsmatrixelementen für große Kettenlängen N möglich. Abb. 4.1(a) zeigt das Spektrum der $\psi\psi$ -Anregungen mit $q \leq \pi$ bei Magnetisierung $M_z = N/4$ für eine Kette der Länge $N = 512$ (vgl. Kapitel 5). In Abb. 4.1(b) sind die zugehörigen Matrixelemente $M_\lambda^-(q)$ für $q = \pi$ dargestellt. Diese haben wir numerisch mit Hilfe einer Implementation von (4.39) und (4.43) gewonnen. Bei den Energiedifferenzen $\omega = \omega_\lambda = (E_\lambda - E_0)/\hbar$ (vgl. Anhang A.3), ist die Größe des gemäß (2.30) eingehenden Magnetfeldes h entsprechend berücksichtigt, vgl. hierzu auch Kapitel 5.2.

Man beobachtet, daß die Größe der Übergangsmatrixelemente am unteren Ende des Spektrums zunimmt. Deutlich von Null verschiedene Matrixelemente lassen sich erst für $\omega/J < 0.4$ erkennen. Das mit Abstand größte Matrixelement trägt der Übergang zwischen der niedrigsten $\psi\psi$ -Anregung (die gleichzeitig die Rolle des Psinon-Vakuums im durch $r = N/4 - 1$ gekennzeichneten Unterraum übernimmt, vgl. Kapitel 5.1) und dem Grundzustand ($r = N/4$) bei. Für diesen Übergang mit $\omega = 0.003651\dots$ ist $M_\lambda^-(\pi) = 6.459711\dots$; der zugehörige Datenpunkt fehlt aus Gründen der Übersichtlichkeit in Abb. 4.1(b).

Die sich in Abb. 4.1(b) durch die Verbindung der Datenpunkte für $N \rightarrow \infty$ abzeichnende stetige Kurve ist ein Beispiel für eine sogenannte Isoimpulslinie (*Lineshape*). Hierauf wird in Kapitel 5 noch näher eingegangen.

4.2 Matrixelemente im planaren Bereich des XXZ-Modells

Für den planaren Bereich des XXZ-Modells mit Hamiltonian (3.1) wurden in Kapitel 3.1 zwei mögliche Parametrisierungen des Bethe-Ansatzes vorgestellt: die trigonometrische Parametrisierung, gegeben durch (3.6) und (3.7), sowie die hyperbolische Parametrisierung, gegeben durch (3.6) und (3.14). Im folgenden werden beide Parametrisierungen betrachtet.

4.2.1 Hyperbolische Parametrisierung

In der hyperbolischen Parametrisierung hat das Analogon zu (4.11) für die Matrixelemente des Spin-Fluktuationsoperators S_q^z folgende Gestalt:⁷

⁷Der Zusammenhang zwischen den hier verwendeten Variablen z_i und den in (KITANINE *et al.*, 1999) verwendeten Variablen λ_i ist durch $\lambda_i = (z_i - \nu\gamma)/2$ gegeben.

$$M_\lambda^z(q) = \frac{N}{4} \frac{|\Omega^z|^2}{\|\psi_0\|^2 \|\psi_\lambda\|^2}, \quad (4.44)$$

wobei

$$\Omega^z = \left[\prod_{j=1}^r \frac{\sinh\left(\frac{z_j^0}{2} + \iota \frac{\gamma}{2}\right)}{\sinh\left(\frac{z_j}{2} + \iota \frac{\gamma}{2}\right)} \right] \frac{1}{\prod_{i<j}^r \sinh \frac{z_i^0 - z_j^0}{2} \prod_{i>j}^r \sinh \frac{z_i - z_j}{2}} \det(H - 2P) \quad (4.45)$$

mit

$$H_{a,b} = \frac{\sin \gamma}{\sinh \frac{z_a^0 - z_b}{2}} \left[\prod_{j \neq a}^r \sinh \left(\frac{z_j^0 - z_b}{2} + \iota \gamma \right) - d(z_b) \prod_{j \neq a}^r \sinh \left(\frac{z_j^0 - z_b}{2} - \iota \gamma \right) \right], \quad (4.46)$$

$$P_{a,b} = \frac{\sin \gamma}{\sinh\left(\frac{z_a^0}{2} + \iota \frac{\gamma}{2}\right) \sinh\left(\frac{z_b^0}{2} - \iota \frac{\gamma}{2}\right)} \prod_{j=1}^r \sinh \left(\frac{z_j - z_b}{2} + \iota \gamma \right), \quad a, b = 1, \dots, r, \quad (4.47)$$

und

$$d(z_i) = \left(\frac{c_2 \tanh(z_i/2) - \iota}{c_2 \tanh(z_i/2) + \iota} \right)^N, \quad (4.48)$$

vgl. (3.15). Hierbei bezeichnet $\{z_i^0\}$ bzw. $\{z_i\}$ den jeweiligen Satz von Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.15) oder (3.16), der zum Grundzustand $|\psi_0\rangle$ bzw. zum angeregten Zustand $|\psi_\lambda\rangle$ gehört. Für die Normformel findet man in diesem Fall:

$$\|\psi_\lambda\|^2 = (2N)^r \left(\prod_{i<j}^r \frac{\sin^2 \gamma}{K(z_i - z_j) \cdot \sinh^2 \frac{z_i - z_j}{2}} \right) \left(\prod_{i=1}^r \kappa(z_i) \right) \det \mathbf{N}(\{z_i\}) \quad (4.49)$$

mit

$$\mathbf{N}_{a,b} = \left[1 - \frac{\cos \gamma}{N} \sum_{j=1}^r \frac{K(z_a - z_j)}{\kappa(z_a)} \right] \delta_{a,b} + \frac{\cos \gamma}{N} \frac{K(z_a - z_b)}{\kappa(z_a)}. \quad (4.50)$$

Hier gehen die beiden Hilfsfunktionen

$$\kappa(z) = \frac{1}{2} \frac{\sin^2 \gamma}{\sinh^2 \frac{z}{2} + \sin^2 \frac{\gamma}{2}}, \quad K(z) = \frac{\sin^2 \gamma}{\sinh^2 \frac{z}{2} + \sin^2 \gamma} \quad (4.51)$$

ein. Führt man in (4.44) - (4.51) den durch (3.18) beschriebenen Grenzübergang zum XXX-Modell durch, so reproduziert man die in Kapitel 4.1 vorgestellten Resultate (4.11) - (4.22). Man hat insbesondere:

$$\kappa(z) \xrightarrow{(3.18)} \hat{\kappa}(\hat{z}), \quad K(z) \xrightarrow{(3.18)} \hat{K}(\hat{z}). \quad (4.52)$$

Auch hier läßt sich für den Fall, daß alle Lösungen z_i reell sind, eine kompakte Berechnungsformel für $M_\lambda^z(q)$ angeben. Diese ist strukturgleich mit (4.24) (BIEGEL *et al.*, 2003b):

$$M_\lambda^z(q) = \frac{N}{4} \frac{\mathcal{K}_r(\{z_i^0\})}{\mathcal{K}_r(\{z_i\})} \frac{|\det(\mathbf{H} - \frac{2}{N} \mathbf{1})|^2}{\det \mathbf{N}(\{z_i\}) \det \mathbf{N}(\{z_i^0\})} \quad (4.53)$$

mit

$$H_{a,b} = F_N(z_a^0, z_b) \left(\prod_{j=1}^r \frac{1}{G(z_j - z_b)} \right) \left[\prod_{j \neq a}^r G(z_j^0 - z_b) - d(z_b) \prod_{j \neq a}^r G^*(z_j^0 - z_b) \right], \quad (4.54)$$

$a, b = 1, \dots, r.$

Hierin treten die Hilfsfunktionen

$$\mathcal{K}_r(\{z_i\}) = \prod_{i < j}^r K(z_i - z_j), \quad G(z) = c_1 \sinh \frac{z}{2} + \iota \cosh \frac{z}{2}, \quad G^*(z) = c_1 \sinh \frac{z}{2} - \iota \cosh \frac{z}{2} \quad (4.55)$$

mit $c_1 = \cot \gamma$, vgl. (3.10), sowie

$$F_N(z, z') = \frac{1}{2N \cdot \sinh \left(\frac{z-z'}{2} \right) \cdot \kappa(z)} = \frac{\sin^2 \frac{\gamma}{2} + \sinh^2 \frac{z}{2}}{N \sin \gamma \cdot \sinh \left(\frac{z-z'}{2} \right)} \quad (4.56)$$

auf. Führt man in (4.53) - (4.56) den Grenzübergang zum XXX-Modell durch, so erhält man die korrespondierenden Resultate (4.24) - (4.27) für den XXX-Fall termweise wieder. Insbesondere sind auch die Definitionen der Hilfsfunktionen $G^{(*)}$ und F_N so gewählt, daß gilt:

$$G^{(*)}(z) \xrightarrow{(3.18)} \hat{G}^{(*)}(\hat{z}), \quad F_N(z, z') \xrightarrow{(3.18)} \hat{F}_N(\hat{z}, \hat{z}'), \quad (4.57)$$

vgl. (4.52). Daher folgt die H entsprechende Matrix Γ unmittelbar aus (4.32), indem man die in (4.32) auftretenden Größen $\{\hat{z}_i^{(0)}\}$, \hat{F}_N und $\hat{G}^{(*)}$ jeweils durch $\{z_i^{(0)}\}$, F_N und $G^{(*)}$ ersetzt.

Analoge Rechnungen für $M_\lambda^+(q)$ und $M_\lambda^-(q)$ führen zunächst wieder auf

$$M_\lambda^\pm(q) = N \frac{|\Omega^\pm|^2}{\|\psi_0\|^2 \|\psi_\lambda\|^2}, \quad (4.58)$$

wobei

$$\Omega^+ = \frac{\left[\prod_{j=1}^{r+1} \sinh \left(\frac{z_j}{2} + \iota \frac{\gamma}{2} \right) \right]}{\left[\prod_{j=1}^r \sinh \left(\frac{z_j^0}{2} + \iota \frac{\gamma}{2} \right) \right]} \frac{1}{\prod_{i < j}^r \sinh \frac{z_i^0 - z_j^0}{2} \prod_{i > j}^{r+1} \sinh \frac{z_i - z_j}{2}} \det H^+ \quad (4.59)$$

mit

$$H_{a,b}^+ = \frac{\sin \gamma}{\sinh \frac{z_a - z_b^0}{2}} \left[\prod_{j \neq a}^{r+1} \sinh \left(\frac{z_j - z_b^0}{2} + \iota \gamma \right) - d(z_b^0) \prod_{j \neq a}^{r+1} \left(\frac{z_j - z_b^0}{2} - \iota \gamma \right) \right], \quad (4.60)$$

$$H_{a,r+1}^+ = \frac{\sin \gamma}{\sinh \left(\frac{z_a}{2} + \iota \frac{\gamma}{2} \right) \sinh \left(\frac{z_a}{2} - \iota \frac{\gamma}{2} \right)}, \quad a = 1, \dots, r+1, \quad b = 1, \dots, r,$$

und

$$\Omega^- = \frac{\left[\prod_{j=1}^r \sinh \left(\frac{z_j^0}{2} + \iota \frac{\gamma}{2} \right) \right]}{\left[\prod_{j=1}^{r-1} \sinh \left(\frac{z_j}{2} + \iota \frac{\gamma}{2} \right) \right]} \frac{1}{\prod_{i < j}^{r-1} \sinh \frac{z_i - z_j}{2} \prod_{i > j}^r \sinh \frac{z_i^0 - z_j^0}{2}} \det H^- \quad (4.61)$$

mit

$$H_{a,b}^- = \frac{\sin \gamma}{\sinh \frac{z_a^0 - z_b}{2}} \left[\prod_{j \neq a}^r \sinh \left(\frac{z_j^0 - z_b}{2} + \iota \gamma \right) - d(z_b) \prod_{j \neq a}^{r+1} \left(\frac{z_j^0 - z_b}{2} - \iota \gamma \right) \right], \quad (4.62)$$

$$H_{a,r}^- = \frac{\sin \gamma}{\sinh \left(\frac{z_a^0}{2} + \iota \frac{\gamma}{2} \right) \sinh \left(\frac{z_a^0}{2} - \iota \frac{\gamma}{2} \right)}, \quad a = 1, \dots, r, \quad b = 1, \dots, r-1.$$

Auch hier ist die kompakte Berechnungsformel für den Fall, daß sämtliche Lösungen z_i reell sind, strukturgleich mit der aus dem XXX-Modell bekannten:

$$M_\lambda^\pm(q) = \left(\frac{\mathcal{K}_{r \pm 1}(\{z_i\})}{\mathcal{K}_r(\{z_i^0\})} \right)^{\pm 1} \frac{|\det \mathbf{H}^\pm|^2}{\det \mathbf{N}(\{z_i\}) \det \mathbf{N}(\{z_i^0\})}, \quad (4.63)$$

wobei

$$H_{a,b}^+ = F_N(z_a, z_b^0) \left(\prod_{j=1}^r \frac{1}{G(z_j^0 - z_b^0)} \right) \left[\prod_{j \neq a}^{r+1} G(z_j - z_b^0) - d(z_b^0) \prod_{j \neq a}^{r+1} G^*(z_j - z_b^0) \right], \quad (4.64)$$

$$H_{a,r+1}^+ = 1, \quad a = 1, \dots, r+1, \quad b = 1, \dots, r,$$

bzw.

$$H_{a,b}^- = F_N(z_a^0, z_b) \left(\prod_{j=1}^{r-1} \frac{1}{G(z_j - z_b)} \right) \left[\prod_{j \neq a}^r G(z_j^0 - z_b) - d(z_b) \prod_{j \neq a}^r G^*(z_j^0 - z_b) \right], \quad (4.65)$$

$$H_{a,r}^- = 1, \quad a = 1, \dots, r, \quad b = 1, \dots, r-1.$$

Alle im Zusammenhang mit $M_\lambda^z(q)$ gemachten Aussagen zum Grenzübergang zum XXX-Modell gelten für $M_\lambda^\pm(q)$ in gleicher Weise. Insbesondere erhält man die zu \mathbf{H}^\pm korrespondierenden Matrizen Γ^\pm indem man in (4.42) und (4.43) die dort auftretenden Größen $\{\hat{z}_i^{(0)}\}$, \hat{F}_N und $\hat{G}^{(*)}$ jeweils durch $\{z_i^{(0)}\}$, F_N und $G^{(*)}$ ersetzt.

4.2.2 Trigonometrische Parametrisierung

In der trigonometrischen Parametrisierung wird der Grundzustand $|\psi_0\rangle$ durch den Satz $\{y_i^0\}$ von Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.9) bzw. (3.11) beschrieben, der angeregte Zustand entsprechend durch $\{y_i\}$. Zwischen den Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen in trigonometrischer Parametrisierung und in hyperbolischer Parametrisierung besteht der Zusammenhang

$$y_i = \tanh \frac{z_i}{2}, \quad i = 1, \dots, r, \quad (4.66)$$

vgl. (3.14). Dementsprechend lassen sich die Berechnungsformeln für die Matricelemente $M_\lambda^z(q)$ und $M_\lambda^\pm(q)$ aus den in Kapitel 4.2.1 angegebenen Resultaten für die hyperbolische Parametrisierung unmittelbar ableiten, indem man dort die durch (4.66) beschriebene Substitution der z_i durch die y_i vornimmt.

Sofern alle Lösungen y_i der Bethe-Ansatz-Gleichungen für den angeregten Zustand reell sind, folgt so insbesondere (BIEGEL *et al.*, 2003a):

$$M_\lambda^z(q) = \frac{N \mathcal{K}_r(\{y_i^0\})}{4 \mathcal{K}_r(\{y_i\})} \frac{|\det(\mathbf{H} - \frac{2}{N}\mathbf{1})|^2}{\det \mathbf{N}(\{y_i^0\}) \det \mathbf{N}(\{y_i\})}, \quad (4.67)$$

$$M_\lambda^\pm(q) = \left(\frac{\mathcal{K}_{r\pm 1}(\{y_i\})}{\mathcal{K}_r(\{y_i^0\})} \right)^{\pm 1} \frac{|\det \mathbf{H}^\pm|^2}{\det \mathbf{N}(\{y_i^0\}) \det \mathbf{N}(\{y_i\})}. \quad (4.68)$$

Offensichtlich sind (4.67) und (4.68) wiederum strukturgleich mit den in den vorangegangenen Kapiteln vorgestellten entsprechenden Resultaten zum XXX-Modell bzw. zum XXZ-Modell in hyperbolischer Parametrisierung. Darüber hinaus kann man die Definitionen aller in (4.67) und (4.68) auftretenden Größen sowie für die zu \mathbf{H} , \mathbf{H}^\pm korrespondierenden Matrizen Γ , Γ^\pm unmittelbar aus den bereits bekannten Resultaten übernehmen, sofern man die Hilfsfunktionen entsprechend anpaßt:

$$\mathcal{K}_r(\{y_i\}) = \prod_{i < j}^r |K(y_i, y_j)|, \quad K(y, y') = \frac{(1-y^2)(1-y'^2)\sin^2\gamma}{(y-y')^2 + (1-y^2)(1-y'^2)\sin^2\gamma}, \quad (4.69)$$

$$\kappa(y) = \frac{(1-y^2)\sin^2\gamma}{1+y^2 - \cos\gamma(1-y^2)}, \quad (4.70)$$

$$G(y, y') = \frac{(y-y')\cot\gamma + i(1-yy')}{\sqrt{1-y^2} \cdot \sqrt{1-y'^2}}, \quad G^*(y, y') = \frac{(y-y')\cot\gamma - i(1-yy')}{\sqrt{1-y^2} \cdot \sqrt{1-y'^2}} \quad (4.71)$$

sowie

$$F_N(y, y') = \frac{1}{2N} \frac{\sqrt{1-y'^2}}{\sqrt{1-y^2}} \frac{1+y^2 + (y^2-1)\cos\gamma}{(y-y')\sin\gamma}. \quad (4.72)$$

Auch in dieser Parametrisierung besteht der Zusammenhang

$$K(y, y') = |G(y, y')|^{-2}, \quad (4.73)$$

vgl. (4.28). Ferner ist $d(z_i)$ zu ersetzen durch

$$d(y_i) = \left(\frac{c_2 y_i - i}{c_2 y_i + i} \right)^N, \quad (4.74)$$

vgl. (3.9). So erhält man:

$$\mathbf{H}_{a,b} = F_N(y_a^0, y_b) \left(\prod_{j=1}^r \frac{1}{G(y_j, y_b)} \right) \left[\prod_{j \neq a}^r G(y_j^0, y_b) - d(y_b) \prod_{j \neq a}^r G^*(y_j^0, y_b) \right], \quad (4.75)$$

$a, b = 1, \dots, r,$

bzw.

$$\Gamma_{a,b} = F_N(y_a^0, y_b) \left[\frac{1}{G(y_a^0, y_b)} \prod_{j=1}^r \frac{G(y_j^0, y_b)}{G(y_j, y_b)} + \frac{1}{G^*(y_a^0, y_b)} \prod_{j=1}^r \frac{G^*(y_j^0, y_b)}{G^*(y_j, y_b)} \right], \quad (4.76)$$

$a, b = 1, \dots, r,$

sowie

$$\mathbf{H}_{a,b}^+ = F_N(y_a, y_b^0) \left(\prod_{j=1}^r \frac{1}{G(y_j^0, y_b^0)} \right) \left[\prod_{j \neq a}^{r+1} G(y_j, y_b^0) - d(y_b^0) \prod_{j \neq a}^{r+1} G^*(y_j, y_b^0) \right], \quad (4.77)$$

$$\mathbf{H}_{a,r+1}^+ = 1, \quad a = 1, \dots, r+1, \quad b = 1, \dots, r,$$

bzw.

$$\Gamma_{a,b}^+ = F_N(y_a, y_b^0) \left[\frac{G(y_{r+1}, y_b^0)}{G(y_a, y_b^0)} \prod_{j=1}^r \frac{G(y_j, y_b^0)}{G(y_j^0, y_b^0)} + \frac{G^*(y_{r+1}, y_b^0)}{G^*(y_a, y_b^0)} \prod_{j=1}^r \frac{G^*(y_j, y_b^0)}{G^*(y_j^0, y_b^0)} \right], \quad (4.78)$$

$$\Gamma_{a,r+1}^+ = 1, \quad a = 1, \dots, r+1, \quad b = 1, \dots, r,$$

und

$$H_{a,b}^- = F_N(y_a^0, y_b) \left(\prod_{j=1}^{r-1} \frac{1}{G(y_j, y_b)} \right) \left[\prod_{j \neq a}^r G(y_j^0, y_b) - d(y_b) \prod_{j \neq a}^r G^*(y_j^0, y_b) \right], \quad (4.79)$$

$$H_{a,r}^- = 1, \quad a = 1, \dots, r, \quad b = 1, \dots, r-1,$$

bzw.

$$\Gamma_{a,b}^- = F_N(y_a^0, y_b) \left[\frac{G(y_r^0, y_b)}{G(y_a^0, y_b)} \prod_{j=1}^{r-1} \frac{G(y_j^0, y_b)}{G(y_j, y_b)} + \frac{G^*(y_r^0, y_b)}{G^*(y_a^0, y_b)} \prod_{j=1}^{r-1} \frac{G^*(y_j^0, y_b)}{G^*(y_j, y_b)} \right], \quad (4.80)$$

$$\Gamma_{a,r}^- = 1, \quad a = 1, \dots, r, \quad b = 1, \dots, r-1,$$

und schließlich

$$N_{a,b} = \left[1 - \frac{\cos \gamma}{N} \sum_{j=1}^r \frac{K(y_a, y_j)}{\kappa(y_a)} \right] \delta_{a,b} + \frac{\cos \gamma}{N} \frac{K(y_a, y_b)}{\kappa(y_a)}. \quad (4.81)$$

4.3 Der Übergang zum XX-Modell

Bei der Diskussion des Übergangs vom XXZ- zum XX-Modell sind wie bei der Herleitung der Bethe-Ansatz-Gleichungen für das XX-Modell in Kapitel 3.3 wieder grundsätzlich zwei Fälle zu unterscheiden:

Der nichtkritische Fall zeichnet sich dadurch aus, daß für den angeregten Zustand $|\psi_\lambda\rangle$ kein Lösungspaar y_j, y_{j^*} der Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.11) mit $\lim_{\Delta \rightarrow 0} y_j y_{j^*} = 1$ (vgl. Kapitel 3.3.1) auftritt. In diesem Fall sind sämtliche Lösungen \tilde{y}_i der Bethe-Ansatz-Gleichungen für das XX-Modell reell und durch (3.24) gegeben. Für den Grundzustand $|\psi_0\rangle$ sind stets alle Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen nichtkritisch.

Der kritische Fall ist dadurch gekennzeichnet, daß mindestens ein kritisches reelles oder komplexes Lösungspaar auftritt. Hier treten die in Kapitel 3.3.2 ff. beschriebenen Besonderheiten auf.

Im folgenden wird zunächst der nichtkritische Fall behandelt (Kapitel 4.3.1). Anschließend wird der Übergang beim Auftreten kritischer Paare diskutiert. Hierbei konzentrieren sich die Ausführungen in Kapitel 4.3.2 und Anhang B auf die Untersuchung des Matrixelementes $M_\lambda^z(q)$ im Falle des Vorliegens eines einzigen kritischen reellen Paares. Weitere Ergebnisse sind in (WIELE, 2004) zusammengestellt.

4.3.1 Nichtkritischer Fall

Den Ausgangspunkt für die Diskussion des nichtkritischen Falles bilden die in (4.69) - (4.72) zusammengestellten Hilfsfunktionen. Bei Abwesenheit eines kritischen Paares läßt sich der Grenzübergang $\Delta \rightarrow 0$, d.h. $\gamma \rightarrow \pi/2$, in diesen Funktionen problemlos durchführen und man erhält:

$$\tilde{\mathcal{K}}_r(\{\tilde{y}_i\}) = \prod_{i < j}^r |\tilde{K}(\tilde{y}_i, \tilde{y}_j)|, \quad \tilde{K}(\tilde{y}, \tilde{y}') = \frac{(1 - \tilde{y}^2)(1 - \tilde{y}'^2)}{(1 - \tilde{y}\tilde{y}')^2}, \quad (4.82)$$

$$\tilde{\kappa}(\tilde{y}) = \frac{1 - \tilde{y}^2}{1 + \tilde{y}^2}, \quad (4.83)$$

$$\tilde{G}(\tilde{y}, \tilde{y}') = \iota \frac{1 - \tilde{y}\tilde{y}'}{\sqrt{1 - \tilde{y}^2} \cdot \sqrt{1 - \tilde{y}'^2}}, \quad \tilde{G}^*(\tilde{y}, \tilde{y}') = -\iota \frac{1 - \tilde{y}\tilde{y}'}{\sqrt{1 - \tilde{y}^2} \cdot \sqrt{1 - \tilde{y}'^2}} \quad (4.84)$$

sowie

$$\tilde{F}_N(\tilde{y}, \tilde{y}') = \frac{1}{2N} \frac{\sqrt{1 - \tilde{y}'^2}}{\sqrt{1 - \tilde{y}^2}} \frac{1 + \tilde{y}^2}{\tilde{y} - \tilde{y}'}. \quad (4.85)$$

Ferner folgt mit (3.24) und den Ausführungen im Anschluß an (2.17) für (4.74):

$$\tilde{d}(\tilde{y}_i) = \left(\frac{\tan \frac{\pi I_i}{N} - \iota}{\tan \frac{\pi I_i}{N} + \iota} \right)^N = (-1)^N \cdot e^{\iota 2\pi I_i} = (-1)^{2I_i} = \begin{cases} +1 & : r \text{ ungerade,} \\ -1 & : r \text{ gerade} \end{cases} \quad (4.86)$$

(man beachte, daß hier zusätzlich die zu Beginn von Kapitel 3 gemachte Voraussetzung, daß die Kettenlänge N gerade ist, eingeht).

Führt man den Grenzübergang $\Delta \rightarrow 0$ in (4.81) durch, so erhält man $\tilde{N}_{a,b} = \delta_{a,b}$, so daß für den Wert der Determinante von \tilde{N} folgt:

$$\det \tilde{N}(\{\tilde{y}_i^{(0)}\}) = 1. \quad (4.87)$$

Weiterhin bietet es sich aufgrund der einfachen Struktur von $\tilde{d}(\tilde{y})$ im nichtkritischen Fall an, mit $\mathbf{H}^{(\pm)}$ anstatt mit $\Gamma^{(\pm)}$ zu arbeiten. Setzt man (4.82) - (4.86) in (4.68) ein, so ergibt sich nach kurzer Rechnung für die Matrixelemente $\tilde{M}_\lambda^\pm(q)$:

$$\tilde{M}_\lambda^+(q) = \frac{\prod_{i=1}^{r+1} \prod_{j=1}^r (1 - \tilde{y}_i \tilde{y}_j^0)^2}{\prod_{i < j}^{r+1} (1 - \tilde{y}_i \tilde{y}_j)^2 \prod_{i < j}^r (1 - \tilde{y}_i^0 \tilde{y}_j^0)^2} (\det \mathbf{S}^+)^2 \quad (4.88)$$

mit

$$\mathbf{S}_{a,b}^+ = \frac{1}{N} \frac{1 + \tilde{y}_a^2}{(\tilde{y}_a - \tilde{y}_b^0)(1 - \tilde{y}_a \tilde{y}_b^0)}, \quad (4.89)$$

$$\mathbf{S}_{a,r+1}^+ = 1, \quad a = 1, \dots, r+1, \quad b = 1, \dots, r,$$

sowie

$$\tilde{M}_\lambda^-(q) = \frac{\prod_{i=1}^r \prod_{j=1}^{r-1} (1 - \tilde{y}_i^0 \tilde{y}_j)^2}{\prod_{i < j}^r (1 - \tilde{y}_i^0 \tilde{y}_j^0)^2 \prod_{i < j}^{r-1} (1 - \tilde{y}_i \tilde{y}_j)^2} (\det \mathbf{S}^-)^2 \quad (4.90)$$

mit

$$\mathcal{S}_{a,b}^- = \frac{1}{N} \frac{1 + (\tilde{y}_a^0)^2}{(\tilde{y}_a^0 - \tilde{y}_b)(1 - \tilde{y}_a^0 \tilde{y}_b)}, \quad (4.91)$$

$$\mathcal{S}_{a,r}^- = 1, \quad a = 1, \dots, r, \quad b = 1, \dots, r-1.$$

Der Zusammenhang (3.23) zwischen den nichtkritischen Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen und den zugehörigen Magnon-Impulsen erlaubt es, (4.88) - (4.91) durch die Magnon-Impulse k_i bzw. k_i^0 auszudrücken:

$$\tilde{M}_\lambda^+(q) = \frac{\prod_{i=1}^{r+1} \prod_{j=1}^r \cos^2 \frac{k_i + k_j^0}{2}}{\prod_{i<j}^{r+1} \cos^2 \frac{k_i + k_j}{2} \prod_{i<j}^r \cos^2 \frac{k_i^0 + k_j^0}{2}} (\det \mathcal{S}^+)^2 \quad (4.92)$$

mit

$$\mathcal{S}_{a,b}^+ = \frac{2}{N} \frac{1}{\sin k_a - \sin k_b^0}, \quad (4.93)$$

$$\mathcal{S}_{a,r+1}^+ = 1, \quad a = 1, \dots, r+1, \quad b = 1, \dots, r,$$

sowie

$$\tilde{M}_\lambda^-(q) = \frac{\prod_{i=1}^r \prod_{j=1}^{r-1} \cos^2 \frac{k_i^0 + k_j}{2}}{\prod_{i<j}^r \cos^2 \frac{k_i^0 + k_j^0}{2} \prod_{i<j}^{r-1} \cos^2 \frac{k_i + k_j}{2}} (\det \mathcal{S}^-)^2 \quad (4.94)$$

mit

$$\mathcal{S}_{a,b}^- = \frac{2}{N} \frac{1}{\sin k_a^0 - \sin k_b}, \quad (4.95)$$

$$\mathcal{S}_{a,r}^- = 1, \quad a = 1, \dots, r, \quad b = 1, \dots, r-1.$$

Die beiden Matrizen \mathcal{S}^+ und \mathcal{S}^- sind Matrizen vom verallgemeinerten Cauchy-Typ (MUIR, 1960; DAVIS, 1975), deren Determinanten explizit ausgerechnet werden können (BIEGEL *et al.*, 2003a; WIELE, 2004):

$$(\det \mathcal{S}^+)^2 = \left(\frac{2}{N}\right)^{2r} \frac{\prod_{i<j}^{r+1} (\sin k_i - \sin k_j)^2 \prod_{i<j}^r (\sin k_i^0 - \sin k_j^0)^2}{\prod_{i=1}^{r+1} \prod_{j=1}^r (\sin k_i - \sin k_j^0)^2}, \quad (4.96)$$

$$(\det \mathcal{S}^-)^2 = \left(\frac{2}{N}\right)^{2(r-1)} \frac{\prod_{i<j}^r (\sin k_i^0 - \sin k_j^0)^2 \prod_{i<j}^{r-1} (\sin k_i - \sin k_j)^2}{\prod_{i=1}^r \prod_{j=1}^{r-1} (\sin k_i^0 - \sin k_j)^2}. \quad (4.97)$$

Damit lassen sich im nichtkritischen Fall die Ausdrücke für die transversalen Spin-Fluktuationen (vgl. Anhang A.3) jeweils in eine reine Produktform überführen:

$$\tilde{M}_\lambda^+(q) = \frac{1}{N^{2r}} \frac{\prod_{i<j}^{r+1} \sin^2 \frac{k_i - k_j}{2} \prod_{i<j}^r \sin^2 \frac{k_i^0 - k_j^0}{2}}{\prod_{i=1}^{r+1} \prod_{j=1}^r \sin^2 \frac{k_i - k_j^0}{2}}, \quad (4.98)$$

$$\tilde{M}_\lambda^-(q) = \frac{1}{N^{2(r-1)}} \frac{\prod_{i<j}^r \sin^2 \frac{k_i^0 - k_j^0}{2} \prod_{i<j}^{r-1} \sin^2 \frac{k_i - k_j}{2}}{\prod_{i=1}^r \prod_{j=1}^{r-1} \sin^2 \frac{k_i^0 - k_j}{2}}. \quad (4.99)$$

Im Falle der parallelen Spin-Fluktuationen liegen der angeregte Zustand $|\psi_\lambda\rangle$ und der Grundzustand $|\psi_0\rangle$ im gleichen durch r gekennzeichneten Unterraum (vgl. Kapitel 2.1). Da im nichtkritischen Fall die Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen für das XX-Modell sowohl für den angeregten Zustand als auch für den Grundzustand durch (3.24) beschrieben werden, stimmen eine Lösung \tilde{y}_i und eine Lösung \tilde{y}_j^0 immer dann überein, wenn die zugehörigen Bethe-Quantenzahlen I_i und I_j^0 übereinstimmen. In diesen Fällen treten in den Matrixelementen $H_{a,b}$ unbestimmte Ausdrücke auf, deren Behebung allerdings mit elementaren aus der Analysis bekannten Methoden möglich ist (vgl. Anhang B.3.2). Dies führt dazu, daß beim Übergang zum XX-Modell in (4.75) nur in denjenigen Fällen von Null verschiedene Matrixelemente vorliegen, in denen eine Grundzustandslösung und eine Lösung des angeregten Zustandes übereinstimmen:

$$\tilde{H}_{a,b} = \left[\frac{|1 - \tilde{y}_b^2|}{1 + \tilde{y}_b^2} \frac{1 + (\tilde{y}_a^0)^2}{1 - \tilde{y}_a^0 \tilde{y}_b} \left(\prod_{j=1}^r \frac{\sqrt{1 - \tilde{y}_j^2}}{\sqrt{1 - (\tilde{y}_j^0)^2}} \frac{1 - \tilde{y}_j^0 \tilde{y}_b}{1 - \tilde{y}_j \tilde{y}_b} \right) \right] \delta_{I_a^0, I_b}. \quad (4.100)$$

Unterscheiden sich nun $\{I_i\}_r$ und $\{I_i^0\}_r$ in mehr als einem Element, so sind in der Matrix $\tilde{H} - \frac{2}{N}\mathbf{1}$ mindestens zwei Spalten gleich, da alle Matrixelemente in den entsprechenden Spalten von \tilde{H} den Wert 0 haben. Folglich verschwindet $\det(\tilde{H} - \frac{2}{N}\mathbf{1})$ in diesem Fall. Also tragen zum dynamischen Strukturfaktor $S_{zz}(q)$, der die parallelen Spin-Fluktuationen beschreibt (vgl. Anhang A.3), nur solche Anregungszustände ohne kritische Paare bei, die sich in genau einer Bethe-Quantenzahl vom Grundzustand unterscheiden.

Betrachtet man einen solchen Anregungszustand, d.h. $I_1 \neq I_1^0$ ($\tilde{y}_1 \neq \tilde{y}_1^0$) und $I_j = I_j^0$ ($\tilde{y}_j = \tilde{y}_j^0$), $j = 2, \dots, r$, so findet man:

$$\left[\det \left(\tilde{H} - \frac{2}{N}\mathbf{1} \right) \right]^2 = \frac{4}{N^2} \frac{\tilde{\mathcal{K}}_r(\{\tilde{y}_i\})}{\tilde{\mathcal{K}}_r(\{\tilde{y}_i^0\})}. \quad (4.101)$$

Setzt man dies in (4.67) ein, so ergibt sich schließlich

$$\tilde{M}_\lambda^z(q) = \begin{cases} \frac{1}{N} & : \{I_i\}_r, \{I_i^0\}_r \text{ unterscheiden sich in genau einer Bethe-Quantenzahl,} \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases} \quad (4.102)$$

in Übereinstimmung mit einem bereits bekannten Resultat, das in (KATSURA *et al.*, 1970) im Fermionbild hergeleitet wird.

Die hier und in Kapitel 4.2 hergeleiteten Formeln ermöglichen die Beobachtung der Evolution von Matrixelementen beim Übergang vom XXZ- zum XX-Modell. So läßt sich überprüfen, ob Matrixelemente $M_\lambda^z(q)$, die die in (4.102) genannte Bedingung erfüllen, für $\Delta \rightarrow 0$ gegen den in (4.102) angegebenen Wert $1/N$ gehen.

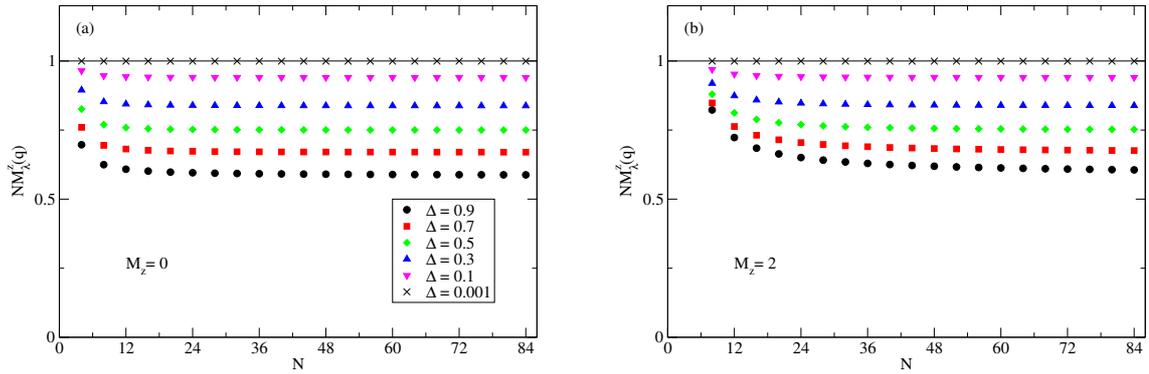


Abbildung 4.2: Evolution der skalierten Matrixelemente $N \cdot M_\lambda^z(q)$ bei Variation von N und Δ im XXZ-Modell bei $M_z = 0$ (a) und $M_z = 2$ (b). Bei dem angeregten Zustand handelt es sich jeweils um eine 2-Spinon-Anregung mit $S_T^z = 0$ (a) bzw. eine 2-Psinon-Anregung mit $S_T^z = 2$ (b), für die die Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen kein kritisches reelles Paar aufweisen.

Abb. 4.2(a) zeigt das Verhalten der skalierten Matrixelemente $N \cdot M_\lambda^z(q)$ bei Variation von Δ für verschiedene Kettenlängen ($4 \leq N \leq 84$) bei Magnetisierung $M_z = 0$. Die Datenpunkte gehören jeweils zu einem Übergang zwischen dem Grundzustand und einer 2-Spinon-Anregung mit $S_T^z = 0$ ($r = N/2$) und

$$\frac{Nk}{2\pi} = 1 \quad (4.103)$$

(vgl. Kapitel 2.1). In Bezug auf die Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.11) liegt stets der nichtkritische Fall vor, d.h. es gibt keine zwei Lösungen, die ein kritisches Paar bilden. Wird der Grundzustand $|\psi_0\rangle$ durch den Satz $\{I_i^0\}$ von Bethe-Quantenzahlen und der angeregte Zustand $|\psi_\lambda\rangle$ durch $\{I_i\}$ charakterisiert, so erhält man $\{I_i\}$ aus $\{I_i^0\}$, indem man in $\{I_i^0\}$ die Bethe-Quantenzahl $-(r-1)/2$ durch $-(r+1)/2$ ersetzt. Für $N = 8$ ist $|\psi_\lambda\rangle$ der in Kapitel 3.4 betrachtete Zustand B1 (vgl. Tabelle 3.2). Die Bethe-Quantenzahlen $\{I_i^0\}$ folgen aus (2.31) für $M_z = 0$.

Abb. 4.2(b) zeigt die analoge Situation bei Magnetisierung $M_z = 2$ für $8 \leq N \leq 84$. Bei dem angeregten Zustand handelt es sich jetzt jeweils um eine 6-Spinon- bzw. 2-Psinon-Anregung (vgl. Kapitel 2.1) mit $S_T^z = 2$ ($r = N/2 - 2$). Auch hier erhält man $\{I_i\}$ aus $\{I_i^0\}$, indem man in $\{I_i^0\}$ die Bethe-Quantenzahl $-(r-1)/2$ durch $-(r+1)/2$ ersetzt. Die Bethe-Quantenzahlen $\{I_i^0\}$ folgen aus (2.31) für $M_z = 2$.

Wie man Abb. 4.2 entnehmen kann, gehen die skalierten Matrixelemente $N \cdot M_\lambda^z(q)$ für $\Delta \rightarrow 0$ in Übereinstimmung mit (4.102) unabhängig von N und M_z gegen den Wert 1.

4.3.2 Der Übergang für $M_\lambda^z(q)$ beim Auftreten eines kritischen reellen Paares

Tritt beim Übergang vom XXZ- zum XX-Modell ein kritisches reelles Paar auf, so läßt sich der Grenzübergang $\Delta \rightarrow 0$ in (4.69) - (4.74) sowie den daraus aufgebauten Determinanten $\det(\mathbf{H} - \frac{2}{N}\mathbf{1})$ und $\det \mathbf{N}(\{y_i\})$ nicht mehr problemlos durchführen. Vielmehr treten Divergenzen und unbestimmte Ausdrücke auf, was entsprechend berücksichtigt werden muß.

Hierzu geht man analog zur Herleitung der Bethe-Ansatz-Gleichungen für das XX-Modell beim Auftreten kritischer reeller Paare in Kapitel 3.3.2 vor. Für sämtliche Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen macht man den Ansatz (3.28),

$$y_i = \tilde{y}_i + \varepsilon \delta_i, \quad i = 1, \dots, r. \quad (4.104)$$

Diesen Ansatz setzt man in die Berechnungsformel für $M_\lambda^z(q)$, (4.67), ein und führt den Grenzübergang $\Delta = \varepsilon \rightarrow 0$ durch. Dadurch erhält man eine Entwicklung im Kontrollparameter ε , deren führende Terme die Berechnungsformel für $M_\lambda^z(q)$ im XX-Modell festlegen. Diese ε -Entwicklung wird ausführlich

in Anhang B vorgeführt. Um die Notationen zu vereinfachen, wird dort und hier im folgenden o.B.d.A. davon ausgegangen, daß die beiden Lösungen y_1 und y_2 das kritische Paar bilden, d.h.

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} y_1 y_2 = 1 = \tilde{y}_1 \tilde{y}_2. \quad (4.105)$$

Der angeregte Zustand wird also durch das kritische Paar y_1, y_2 und $r - 2$ nichtkritische Lösungen y_3, \dots, y_r der Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.11) beschrieben, der Grundzustand entsprechend durch den Satz $\{y_i^0\}_r$ nichtkritischer Lösungen.

Die in Anhang B durchgeführte ε -Entwicklung liefert folgende Resultate: Das Matrixelement $\tilde{M}_\lambda^z(q)$ verschwindet nur dann nicht, wenn sich $r - 2$ Grundzustandslösungen \tilde{y}_i^0 finden lassen, die mit den $r - 2$ nichtkritischen Lösungen $\tilde{y}_i, i = 3, \dots, r$, für den angeregten Zustand, jeweils gegeben durch (3.24), übereinstimmen. Läßt sich zu mindestens einer nichtkritischen Lösung für den angeregten Zustand keine korrespondierende Grundzustandslösung finden, so verschwindet $\tilde{M}_\lambda^z(q)$. Anders ausgedrückt:

$$\tilde{M}_\lambda^z(q) \begin{cases} \neq 0 & : \quad \exists \{I_i^0\}_{r-2} \subset \{I_i^0\}_r, \text{ so daß } \{I_i^0\}_{r-2} = \{I_3, I_4, \dots, I_r\}_{r-2}, \\ = 0 & : \quad \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.106)$$

Die Bedingung, daß das Matrixelement nicht verschwindet, läßt sich – eventuell nach Ummumerierung – in der Form

$$\tilde{y}_3 = \tilde{y}_3^0, \tilde{y}_4 = \tilde{y}_4^0, \dots, \tilde{y}_r = \tilde{y}_r^0 \quad (4.107)$$

angeben. Unter dieser Voraussetzung läßt sich $\tilde{M}_\lambda^z(q)$ wie folgt berechnen, vgl. (B.60):

$$\begin{aligned} \tilde{M}_\lambda^z(q) &= \frac{16}{N^2(1 - \tilde{y}_1^0 \tilde{y}_2^0)^2} \left(\frac{\tilde{y}_1^+ \tilde{y}_1^- [\tilde{y}_1^0(1 + (\tilde{y}_2^0)^2) - \tilde{y}_2^0(1 + (\tilde{y}_1^0)^2)]}{[1 + (\tilde{y}_1^0)^2 - 2\tilde{y}_1^0 \tilde{y}_1^+] \cdot [1 + (\tilde{y}_2^0)^2 - 2\tilde{y}_2^0 \tilde{y}_1^+]} \right)^2 \times \\ &\times \frac{[\tilde{y}_1^0 + \tilde{y}_2^0 - \tilde{y}_1^+(1 + \tilde{y}_1^0 \tilde{y}_2^0)]^2}{N [(\tilde{y}_1^-)^2(1 - \zeta_1) + (1 - \xi_1)^2] - 2 [(\tilde{y}_1^-)^2 + 1 - \xi_1]}. \end{aligned} \quad (4.108)$$

Die Größe ξ_1 ist durch (3.30) gegeben, ζ_1 wird wie folgt definiert, vgl. (B.17):

$$\xi_1 = \frac{2}{N} \sum_{i=3}^r \tilde{y}_1^+ \frac{\tilde{y}_1^+(1 + \tilde{y}_i^2) - 2\tilde{y}_i}{1 + \tilde{y}_i^2 - 2\tilde{y}_i \tilde{y}_1^+}, \quad \zeta_1 = \frac{4}{N^2} \sum_{i=3}^r (\tilde{y}_1^+)^2 \frac{(1 - \tilde{y}_i^2)^2}{(1 + \tilde{y}_i^2 - 2\tilde{y}_i \tilde{y}_1^+)^2}. \quad (4.109)$$

Die Hilfsgrößen \tilde{y}_1^+ und \tilde{y}_1^- sind durch (3.32) gegeben:

$$\tilde{y}_1^+ = \frac{1}{2}(\tilde{y}_1 + \tilde{y}_2) = \frac{1}{\sin k_1}, \quad \tilde{y}_1^- = \frac{1}{2}(\tilde{y}_1 - \tilde{y}_2) = \cot k_1. \quad (4.110)$$

Die beiden Lösungen \tilde{y}_1 und \tilde{y}_2 , die das kritische Paar bilden, lassen sich mit Hilfe von (3.29) bzw. (3.36) bestimmen, die unkritischen Lösungen (sowie die Grundzustandslösungen) sind durch (3.24) festgelegt.

Mittels (3.23) und (4.110) läßt sich $\tilde{M}_\lambda^z(q)$ ausgehend von (4.108) durch die Magnon-Impulse k_i bzw. k_i^0 ausdrücken:

$$\begin{aligned} \tilde{M}_\lambda^z(q) &= \frac{4}{N^2 \cos^2 \frac{k_1^0 + k_2^0}{2}} \frac{(\sin k_1^0 - \sin k_2^0)^2}{(\sin k_1 - \sin k_1^0)^2 (\sin k_1 - \sin k_2^0)^2} \left[\sin k_1 \sin \frac{k_1^0 + k_2^0}{2} - \cos \frac{k_1^0 - k_2^0}{2} \right]^2 \times \\ &\times \frac{1}{N [1 - \zeta_1 + (1 - \xi_1)^2 \cdot \tan^2 k_1] - 2 [1 + (1 - \xi_1) \cdot \tan^2 k_1]} \end{aligned} \quad (4.111)$$

mit

$$\xi_1 = \frac{2}{N} \sum_{i=3}^r \frac{(\sin k_1)^{-1} - \sin k_i}{\sin k_1 - \sin k_i}, \quad \zeta_1 = \frac{4}{N^2} \sum_{i=3}^r \frac{\cos^2 k_i}{(\sin k_1 - \sin k_i)^2}, \quad (4.112)$$

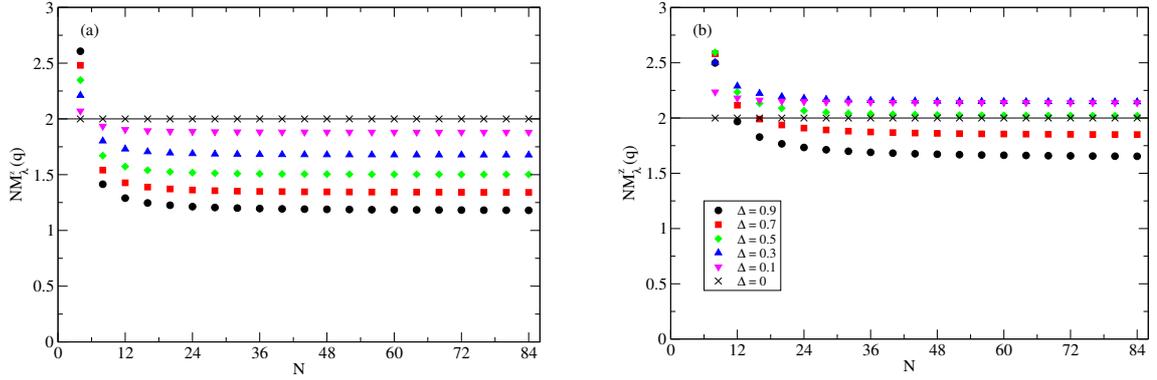


Abbildung 4.3: Evolution der skalierten Matrixelemente $N \cdot M_\lambda^z(q)$ bei Variation von N und Δ im XXZ-Modell bei $M_z = 0$. Bei dem angeregten Zustand handelt es sich jeweils um eine 2-Spinon-Anregung mit $S_T^z = 0$ und $Nk/(2\pi) = 2$ (a) bzw. $Nk/(2\pi) = 3$ (b), für die zwei Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen ein kritisches reelles Paar bilden.

vgl. auch (3.30).

Für den Fall $r = 2$, bei dem der angeregte Zustand nur aus dem einen kritischen Paar besteht, vereinfachen sich (4.108) und (4.111) erheblich. Zum einen gilt hier $\xi_1 = 0 = \zeta_1$. Zum anderen ist die Grundzustandskonfiguration in diesem Fall stets durch $I_1^0 = -0.5 = -I_2^0$ gegeben, d.h.

$$\tilde{y}^0 = \tilde{y}_1^0 = -\tan\left(\frac{\pi}{2N}\right) = -\tilde{y}_2^0 \quad (4.113)$$

bzw.

$$k_1^0 = \pi + \frac{\pi}{N}, \quad k_2^0 = \pi - \frac{\pi}{N} = 2\pi - k_1^0, \quad (4.114)$$

vgl. (3.24). Unter diesen Voraussetzungen gehen (4.108) und (4.111) über in:

$$\tilde{M}_\lambda^z(q)\Big|_{r=2} = \frac{64}{N^2(N-2)} \left(\frac{\tilde{y}_1^+ \tilde{y}_1^- \tilde{y}^0 (1 - (\tilde{y}^0)^2)}{(1 + (\tilde{y}^0)^2)^2 - (2\tilde{y}^0 \tilde{y}_1^+)^2} \right)^2 \quad (4.115)$$

bzw.

$$\tilde{M}_\lambda^z(q)\Big|_{r=2} = \frac{16}{N^2(N-2)} \left(\frac{\sin k_1^0 \cos k_1^0 \cos k_1}{\sin^2 k_1 - \sin^2 k_1^0} \right)^2. \quad (4.116)$$

Hierbei sind die Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen für das kritische Paar $(\tilde{y}_1, \tilde{y}_2)$ durch (3.43) und (3.44) gegeben. Wegen (3.43), (3.44), (4.113) und (4.114) wird $\tilde{M}_\lambda^z(q)\Big|_{r=2}$ durch die Angabe von N , I_1 und I_2 vollständig festgelegt.

Mit den hier und in Kapitel 4.2 hergeleiteten Formeln ist es nun auch möglich, die Evolution von Übergangsmatrixelementen beim Übergang vom XXZ- zum XX-Modell zu beobachten, wenn zwei Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.11) ein kritisches reelles Paar bilden.

Abb. 4.3(a) zeigt dies analog zu Abb. 4.2(a) für die skalierten Matrixelemente $N \cdot M_\lambda^z(q)$ für verschiedene Kettenlängen ($4 \leq N \leq 84$) bei Magnetisierung $M_z = 0$. Die Datenpunkte gehören jeweils zu einem Übergang zwischen dem Grundzustand und einer 2-Spinon-Anregung mit $S_T^z = 0$ ($r = N/2$) und

$$\frac{Nk}{2\pi} = 2 \quad (4.117)$$

(vgl. Kapitel 2.1). Wird der Grundzustand $|\psi_0\rangle$ durch den Satz $\{I_i^0\}$ von Bethe-Quantenzahlen und der angeregte Zustand $|\psi_\lambda\rangle$ durch $\{I_i\}$ charakterisiert, so erhält man $\{I_i\}$ aus $\{I_i^0\}$, indem man in $\{I_i^0\}$ die Bethe-Quantenzahl $-(r-3)/2$ durch $-(r+1)/2$ ersetzt. So erfüllen für den angeregten Zustand

die beiden Bethe-Quantenzahlen $-(r+1)/2$ und $-(r-1)/2$ die Kritikalitätsbedingung (3.35). Die beiden zugehörigen Lösungen, die das kritische Paar bilden, werden für $\Delta = 0$ durch (3.29) bzw. (3.36) festgelegt. Für $N = 8$ ist $|\psi_\lambda\rangle$ der in Kapitel 3.4 betrachtete Zustand B2 (vgl. Tabelle 3.2).

Abb. 4.3(b) zeigt die gleiche Situation für Übergänge zwischen dem Grundzustand und einer 2-Spinon-Anregung mit

$$\frac{Nk}{2\pi} = 3. \quad (4.118)$$

Hier folgt $\{I_i\}$ aus $\{I_i^0\}$, indem man in $\{I_i^0\}$ die Bethe-Quantenzahl $-(r-5)/2$ durch $-(r+1)/2$ ersetzt. Für $N = 8$ erhält man so den in Kapitel 3.4 betrachteten Zustand B3 (vgl. Tabelle 3.2).

Wie man Abb. 4.3 entnehmen kann, gehen die skalierten Matrixelemente $N \cdot M_\lambda^z(q)$ unabhängig von N gegen den Wert 2. Dieser Wert ist damit genau doppelt so groß wie derjenige Wert, der sich für Anregungszustände ohne kritisches Paar von Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen ergibt, vgl. (4.102).

Für andere Magnetisierungen ist ein solches Verhalten bei vergleichbaren Übergängen nicht zu beobachten. Dies legt die Vermutung nahe, daß es sich bei der Annäherung an den Wert $\tilde{M}_\lambda^z(q) = 2/N$ um eine charakteristische Eigenschaft der 2-Spinon-Anregungen bei $M_z = 0$ handelt.

Weitere Anwendungen der Determinantendarstellung von Übergangsmatrixelementen werden im nächsten Kapitel diskutiert.

5 Berechnung von Isoimpulslinien (*Lineshapes*)

Die in Kapitel 4 hergeleitete Determinantendarstellung von Übergangsmatrixelementen erlaubt als eine wichtige Anwendung die Berechnung von Isoimpulslinien (*Lineshapes*) im Rahmen des Bethe-Ansatzes für das XXZ-Modell. Der Vorteil gegenüber bisherigen Bethe-Ansatz-Rechnungen (KARBACH *et al.*, 2000; KARBACH & MÜLLER, 2000; KARBACH *et al.*, 2002) besteht vor allem darin, daß durch die Determinantendarstellung wesentlich größere Kettenlängen zugänglich sind (BIEGEL *et al.*, 2002; BIEGEL *et al.*, 2003a; BIEGEL *et al.*, 2003b).

Isoimpulslinien (*Lineshapes*) ergeben sich, wenn man (für hinreichend großes N) den dynamischen Strukturfaktor $S_{\mu\mu}(q, \omega)$ bzw. die Übergangsmatrixelemente $M_{\lambda}^{\mu}(q)$ zu einem festen Impuls $q = \bar{q}$ gegen die Energie $\hbar\omega$ ($= \hbar\omega_{\lambda}$) aufträgt:

$$\omega \mapsto S_{\mu\mu}(\bar{q}, \omega), \quad \omega \mapsto M_{\lambda}^{\mu}(\bar{q}), \quad \mu = z, +, -. \quad (5.1)$$

Bei der Temperatur $T = 0$ hängen $S_{\mu\mu}(q, \omega)$ und $M_{\lambda}^{\mu}(q)$ via

$$S_{zz}(q, \omega) = 2\pi \sum_{\lambda} M_{\lambda}^z(q) \delta(\omega - \omega_{\lambda}) \quad (5.2)$$

für die parallelen Spinfluktuationen und via

$$S_{\pm\mp}(q, \omega) = 2\pi \sum_{\lambda} M_{\lambda}^{\pm}(q) \delta(\omega - \omega_{\lambda}), \quad (5.3)$$

für die transversalen Spinfluktuationen zusammen, vgl. (A.30)-(A.32).

In (inelastischen) Neutronen-Streuexperimenten an quasi-eindimensionalen Materialien werden solche *Lineshapes* mit Hilfe von sogenannten *fixed-q-scans* gemessen, bei denen die experimentelle Anordnung so eingerichtet wird, daß der Impulsübertrag q fixiert ist, vgl. z.B. (BROHOLM *et al.*, 2002; STONE *et al.*, 2003).

Legt man (5.1) als Definition für *Lineshapes* zugrunde, so werden die zu berücksichtigenden Anregungszustände $|\psi_{\lambda}\rangle$ zunächst nicht eingeschränkt, d.h. bei der Berechnung von Isoimpulslinien müssen in Strenge alle dem System unter der Nebenbedingung $q = \bar{q}$ zugänglichen Anregungszustände berücksichtigt werden. Allerdings kann man – wie theoretische Überlegungen, vgl. z.B. (MÜLLER *et al.*, 1981; KARBACH *et al.*, 1997; KARBACH *et al.*, 2002), und experimentelle Untersuchungen, vgl. z.B. (NAGLER *et al.*, 1991; TENNANT *et al.*, 1993; DENDER *et al.*, 1996; HAMMAR *et al.*, 1999; STONE *et al.*, 2003) zeigen – oftmals Klassen von Anregungszuständen bestimmen, deren Beiträge den dynamischen Strukturfaktor dominieren.

Ist es möglich, solche dominanten Anregungsklassen zu finden und geeignet zu parametrisieren, so vereinfacht dies die Diskussion des dynamischen Strukturfaktors und die Berechnung von *Lineshapes* erheblich, da man sich auf die Beiträge der dominanten Klassen beschränken kann, ohne wesentliche Informationen über die dynamischen Eigenschaften des untersuchten Modells zu verlieren. Dies wird im folgenden am Beispiel des XXX-Modells sowie des XXZ-Modells im planaren Bereich demonstriert. Im Zentrum stehen hierbei die Beschreibung der dominanten Anregungsklassen (Kapitel 5.1) sowie die Berechnung von *Lineshapes* und die Beobachtung ihrer Evolution bei Variation des Anisotropieparameters Δ im XXZ-Modell (Kapitel 5.2). Die Beschreibung der Anregungszustände im Teilchenbild knüpft an die in Kapitel 2.1 zusammengestellten Grundlagen an.

5.1 Dominante Anregungsklassen

Die Bestimmung der dominanten Anregungsklassen läßt sich in drei Schritten durchführen (KARBACH *et al.*, 2002): Im ersten Schritt engt man den Kreis der Kandidaten durch die Anwendung von Auswahlregeln ein, die sich aus den Symmetrieeigenschaften des Hamiltonians und der Fluktuationsoperatoren S_q^z , S_q^{\pm} ergeben. Solche Auswahlregeln sind für beliebige Systemgrößen, d.h. beliebiges N , gültig. Als nächstes nimmt man Auswahlregeln hinzu, die nur im thermodynamischen Limes, d.h. für $N \rightarrow \infty$, gültig sind. Im letzten Schritt wählt man schließlich diejenigen Anregungen aus, die aufgrund ihrer hohen Übergangsraten, d.h. großen Übergangsmatrixelemente, die übrigen noch verbliebenen Anregungen dominieren.

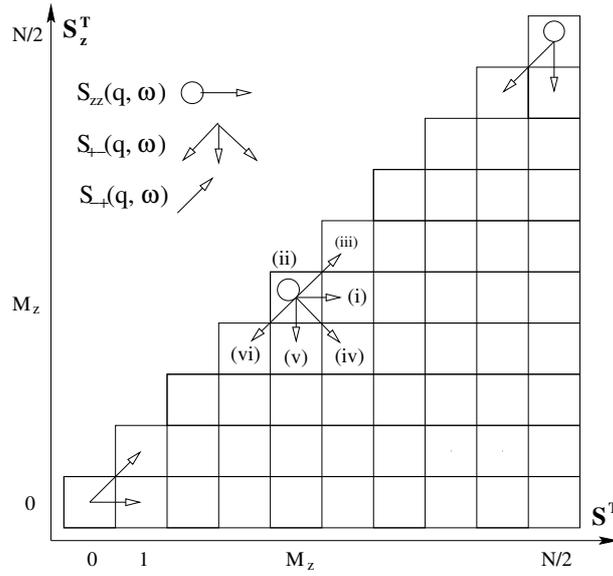


Abbildung 5.1: Überblick über die gemäß Auswahlregeln im XXX-Modell erlaubten Übergänge zwischen dem Grundzustand $|\psi_0\rangle$ mit $S_T = S_T^z = M_z$ und sechs Klassen von Anregungszuständen. Jede der Klassen trägt zu genau einem der dynamischen Strukturfaktoren $S_{zz}(q, \omega)$, $S_{+-}(q, \omega)$ bzw. $S_{-+}(q, \omega)$ bei. Man beachte, daß für $M_z = 0$ ($h = 0$) und $M_z = N/2$ ($h = h_S$) weniger Klassen erlaubter Übergänge vorhanden sind. (MÜLLER *et al.*, 1981; KARBACH *et al.*, 2002)

Für das XXX-Modell in einem homogenen äußeren Magnetfeld mit Hamiltonian (2.29) sind der Gesamtspin \vec{S}_T^2 und dessen z -Komponente S_T^z erhalten (vgl. Kapitel 2.1).

Aus der Invarianz des Hamiltonians gegenüber Rotationen im Spinraum folgt zunächst, daß sämtliche Nichtdiagonalelemente von $S_{\mu\mu}(q, \omega)$, $\mu = x, y, z$, verschwinden. Nichtverschwindende Beiträge treten somit nur für $S_{zz}(q, \omega)$ sowie $S_{xx}(q, \omega)$ und $S_{yy}(q, \omega)$ bzw. $S_{+-}(q, \omega)$ und $S_{-+}(q, \omega)$ auf (MÜLLER *et al.*, 1981).

Ferner führt die Erhaltung von \vec{S}_T^2 und S_T^z dazu, daß Übergänge zwischen dem Grundzustand $|\psi_0\rangle$ mit $S_T = S_T^z = N/2 - R = M_z$ und einem angeregten Zustand $|\psi_\lambda\rangle$, die durch den Spin-Fluktuationsoperator (4.10) induziert werden, strikten Auswahlregeln unterworfen sind (MÜLLER *et al.*, 1981; LEFMANN & RISCHEL, 1996). Dies wurde bereits bei der Herleitung der Berechnungsformeln für die Übergangsmatrixelemente in Kapitel 4 berücksichtigt. Tabelle 5.1 zeigt einen Überblick über die sechs Klassen von Anregungen, die gemäß den Auswahlregeln nichtverschwindende Übergangsraten haben. Die Position dieser Anregungsklassen relativ zum Grundzustand in der (S_T, S_T^z) -Ebene zeigt Abb. 5.1. Man beachte, daß die Klassen (ii), (iii) und (vi) mit den in Kapitel 2.1 beschriebenen Klassen K_r von Anregungszuständen für $r = R$, $r = R - 1$ bzw. $r = R + 1$ übereinstimmen. In einer Klasse K_r sind Psinon-Anregungen zusammengefaßt, die durch die via (2.32) gegebenen Sätze von Bethe-Quantenzahlen charakterisiert werden.

Die verbleibenden drei Klassen (i), (iv) und (v) umfassen Zustände, die zu den gleichen S_T -Multipletts wie die Zustände der Klassen K_R bzw. K_{R+1} gehören. Dies führt dazu, daß die Bethe-Quantenzahlen und Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen (2.17) für korrespondierende Zustände auseinander hervorgehen (vgl. die Spalten 5 und 6 in Tabelle 5.1).

Liegt kein äußeres Magnetfeld an ($h = 0$), so sind die erlaubten Übergänge auf Triplet-Anregungen mit $S_T = 1$ (vgl. Kapitel 2.1) beschränkt (MÜLLER *et al.*, 1981).

Im Gegensatz zum XXX-Modell ist der Gesamtspin \vec{S}_T^2 im XXZ-Modell nicht erhalten, wohl aber die z -Komponente, S_T^z . Daher bleiben die Auswahlregeln in der oben geschilderten Form gültig. Allerdings sind jetzt im magnetfeldfreien Fall auch Beiträge von Zuständen mit $S_T = 0$ möglich (MÜLLER *et al.*, 1981).

Die bislang vorgestellten Auswahlregeln sind für beliebiges N gültig. Weitere Auswahlregeln, die nur im

| Klasse | S_T S_T^z | $S_{\mu\mu}(q, \omega)$ | r | Bethe-Quantenzahlen | Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen (2.17) | dominante Anregungsklassen |
|--------|------------------------|-------------------------|-------|---|---|----------------------------|
| (i) | $M_z + 1$ M_z | $S_{zz}(q, \omega)$ | R | $I_i^{(i)} = I_i^{(iii)} + \frac{1}{2}, i = 1, \dots, R-1$ $I_R^{(i)} = \frac{1}{2}(N - R + 1)$ | $z_i^{(i)} = z_i^{(iii)}, i = 1, \dots, R-1$ $z_R^{(i)} = \infty$ | |
| (ii) | M_z M_z | $S_{zz}(q, \omega)$ | R | $I_i^{(ii)}, i = 1, \dots, R$ gemäß (2.32) für $r = R$ (K_R) | $z_i^{(ii)}, i = 1, \dots, R$ | $\psi\psi^*$ (P2) |
| (iii) | $M_z + 1$ $M_z + 1$ | $S_{-+}(q, \omega)$ | $R-1$ | $I_i^{(iii)}, i = 1, \dots, R-1$ gemäß (2.32) für $r = R-1$ (K_{R-1}) | $z_i^{(iii)}, i = 1, \dots, R-1$ | $\psi\psi$ (P3) |
| (iv) | $M_z + 1$ $M_z - 1$ | $S_{+-}(q, \omega)$ | $R+1$ | $I_i^{(iv)} = I_i^{(iii)} + 1, i = 1, \dots, R-1$ $I_R^{(iv)} = I_{R+1}^{(iv)} = \frac{1}{2}(N - R)$ | $z_i^{(iv)} = z_i^{(iii)}, i = 1, \dots, R-1$ $z_R^{(iv)} = z_{R+1}^{(iv)} = \infty$ | |
| (v) | M_z $M_z - 1$ | $S_{+-}(q, \omega)$ | $R+1$ | $I_i^{(v)} = I_i^{(ii)} + \frac{1}{2}, i = 1, \dots, R$ $I_{R+1}^{(v)} = \frac{1}{2}(N - R)$ | $z_i^{(v)} = z_i^{(ii)}, i = 1, \dots, R$ $z_{R+1}^{(v)} = \infty$ | |
| (vi) | $M_z - 1$ $M_z - 1$ | $S_{+-}(q, \omega)$ | $R+1$ | $I_i^{(vi)}, i = 1, \dots, R+1$ gemäß (2.32) für $r = R+1$ (K_{R+1}) | $z_i^{(vi)}, i = 1, \dots, R+1$ | $\psi\psi^*$ (P6) |

Tabelle 5.1: Überblick über die Anregungszustände der Klassen K_r , $r = R, R+1, R-1$, bzw. dazu äquivalenter Klassen, die gemäß den Auswahlregeln Beiträge zum dynamischen Strukturfaktor $S_{\mu\mu}(q, \omega)$ liefern. Alle Angaben beziehen sich auf einen gegebenen Grundzustand mit $S_T = S_T^z = N/2 - R = M_z$ (M_z : Magnetisierung). In der letzten Spalte sind die drei Anregungsklassen angegeben, die die Spinfluktuationen für $N \rightarrow \infty$ dominieren.

thermodynamischen Limes gültig sind, lassen sich ebenfalls mit Symmetrieüberlegungen finden. Dazu nutzt man aus, daß sich die Übergangsmatrixelemente für Zustände, die zu verschiedenen Klassen, aber zum gleichen Spin-Multiplett gehören, aufgrund der Rotationssymmetrie des Hamiltonians (2.29) und des Vektorcharakters des Spin-Fluktuationsoperators, $\vec{S}_q = (S_q^x, S_q^y, S_q^z)$, miteinander in Beziehung setzen lassen (MÜLLER *et al.*, 1981):

$$|\langle \psi_0 | S_q^z | \psi_\lambda^{(i)} \rangle|^2 = \frac{|\langle \psi_0 | S_q^- | \psi_\lambda^{(iii)} \rangle|^2}{2(M_z + 1)}, \quad (5.4)$$

$$|\langle \psi_0 | S_q^+ | \psi_\lambda^{(iv)} \rangle|^2 = \frac{|\langle \psi_0 | S_q^- | \psi_\lambda^{(iii)} \rangle|^2}{(M_z + 1)(2M_z + 1)}, \quad (5.5)$$

$$|\langle \psi_0 | S_q^+ | \psi_\lambda^{(v)} \rangle|^2 = \frac{2|\langle \psi_0 | S_q^z | \psi_\lambda^{(ii)} \rangle|^2}{M_z}. \quad (5.6)$$

Da die Magnetisierung eine extensive Größe ist, d.h. $M_z \propto N$ für $h \neq 0$, werden somit alle Übergangsmatrixelemente für Übergänge der Klassen (i), (iv) und (v) im thermodynamischen Limes durch Faktoren N bzw. N^2 im Vergleich zu den Matrixelementen für Übergänge der Klassen (ii) und (iii) unterdrückt (KARBACH *et al.*, 2002). Folglich sind in einem makroskopischen System die Beiträge der Klassen (i), (iv) und (v) zum dynamischen Strukturfaktor $S_{\mu\mu}(q, \omega)$ bei der Temperatur $T = 0$ vernachlässigbar klein.⁸

Damit sind die ersten beiden Schritte auf dem Weg zur Bestimmung der dominanten Anregungsklassen für den dynamischen Strukturfaktor $S_{\mu\mu}(q, \omega)$ im XXX-Modell abgeschlossen. Was nun noch verbleibt, ist in den Klassen (ii), (iii) und (vi) diejenigen Anregungszustände zu identifizieren, die den dynamischen Strukturfaktor jeweils dominieren. Dies soll im folgenden für die beiden Fälle $M_z = 0$ ($h = 0$) und $M_z = N/4$ (halbe Sättigung) geschehen.

Für $h = 0$ ist im XXX-Modell keine Richtung im Spinraum mehr ausgezeichnet. Daher gilt hier zusätzlich, daß $S_{xx}(q, \omega) = S_{yy}(q, \omega) = S_{zz}(q, \omega)$ (MÜLLER *et al.*, 1981). Aus den Untersuchungen in (KARBACH *et al.*, 1997) weiß man, daß der dynamische Strukturfaktor in diesem Fall von den in Kapitel 2.1 vorgestellten 2-Spinon-Triplett-Anregungen dominiert wird, die einen Anteil von etwa 73 % beitragen. Dieser Anteil steigt beim Übergang zum Ising-Modell ($\Delta \rightarrow \infty$) für $S_{xx}(q, \omega)$ auf 100 % an (BOUGOURZI *et al.*, 1998).

Für $M_z = N/4$ kommen hingegen die in Kapitel 2.1 vorgestellten Psinonen ins Spiel. Mit ihrer Hilfe können die in Tabelle 5.1 in der letzten Spalte angegebenen dominanten Anregungsklassen (P2) für die parallelen Spinfluktuationen sowie (P3) bzw. (P6) für die transversalen Spinfluktuationen identifiziert und beschrieben werden.

In (KARBACH *et al.*, 2002) werden die 2-Psinon-Anregungen für $r = R - 1$ ($\psi\psi$ -Anregungen) als dominante Anregungszustände für $S_{-+}(q, \omega)$ im XXX-Modell identifiziert. Abb. 5.2 zeigt die zugehörigen Konfigurationen der Bethe-Quantenzahlen für eine Kette der Länge $N = 16$.⁹ Die oberste Reihe zeigt die Konfiguration des Grundzustandes bei Viertelmagnetisierung ($r = R = 4$, $M_z = 4$). Der Grundzustand für $R = 4$ ist gleichzeitig das Psinon-Vakuum in dem durch $R = 4$ gekennzeichneten invarianten Unterraum. Die zweite Reihe in Abb. 5.2 zeigt die 2-Psinon-Anregung mit der niedrigsten Energie im durch $r = R - 1 = 3$ gekennzeichneten Unterraum. Sie ist gleichzeitig das Psinon-Vakuum in diesem Raum.

Bei den 2-Psinon-Anregungen übernehmen die beiden innersten Spinonen die Rolle von Psinonen (blaue bzw. graue Kreise). Durch eine systematische Modifikation der in der zweiten Reihe von Abb. 5.2 gezeigten Konfiguration der Bethe-Quantenzahlen innerhalb der durch (2.32) für $r = R - 1 = 3$ und $m = 1$ gegebenen Grenzen erhält man die insgesamt fünf 2-Psinon-Anregungen für $r = 3$. Zu den $\psi\psi$ -Anregungen, die die dominanten Beiträge zu $S_{-+}(q, \omega)$ liefern, zählen dann alle Konfigurationen der Reihen 2 bis 7 in Abb. 5.2, also der Grundzustand und die 2-Psinon-Anregungen zu $r = 3$.

⁸Hierbei gibt es allerdings eine Ausnahme (MÜLLER *et al.*, 1981; KARBACH *et al.*, 2002): Die einzige Anregung, die einen Beitrag zu $S_{+-}(0, \omega)$ liefert, ist eine Anregung aus der Klasse (v) mit $\omega = h$.

⁹In den Abbildungen 5.2, 5.5 und 5.7 beziehen sich Farbangaben wie „blau“ bzw. „grün“ auf einen Farbausdruck der Arbeit und die Angabe „grau“ entsprechend auf einen Ausdruck in schwarzweiß.

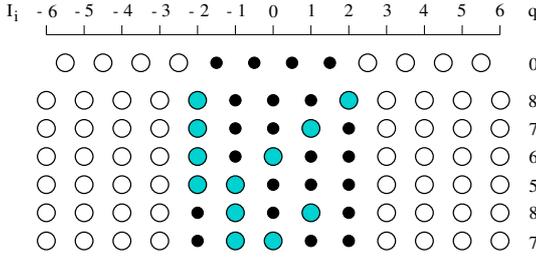


Abbildung 5.2: Konfigurationen der Bethe-Quantenzahlen für den Grundzustand $|\psi_0\rangle$ für $N = 16$ und $M_z = 4$ sowie die $\psi\psi$ -Anregungen der Klasse (P3) mit $q \geq 0$. Die Werte der Bethe-Quantenzahlen I_i sind durch kleine schwarze Kreise (•) markiert. Sie repräsentieren Magnonen. Die großen (leeren) Kreise (○) repräsentieren Spinonen. Zwei der Spinonen übernehmen die Rolle von Psinonen (große blaue bzw. graue Kreise). Die Impulse $q = k - k_0$ sind in Einheiten von $2\pi/N$ angegeben.

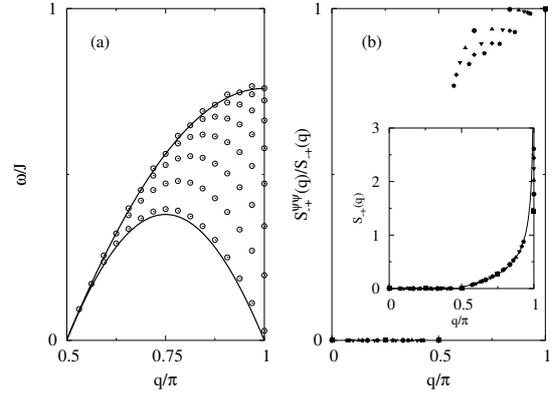


Abbildung 5.3: (a) Spektrum der $\psi\psi$ -Anregungen mit $q \geq 0$ bei Viertelmagnetisierung für eine Kette der Länge $N = 64$ (Punkte) und spektrale Grenzen für $N \rightarrow \infty$. (b) Integrierte Intensität $S_{-+}(q)$ (eingebettetes Bild) und relativer Beitrag der $\psi\psi$ -Anregungen für Ketten der Längen $N = 12, 16, 20, 24, 28$.

Die systematische Modifikation der Bethe-Quantenzahlen läßt sich auch als Wanderung der beiden Psinonen durch den von Magnonen besetzten Bereich interpretieren.

Abb. 5.3(a) zeigt das Spektrum der $\psi\psi$ -Anregungen für eine Kette der Länge $N = 64$ und die spektralen Grenzen für $N \rightarrow \infty$. Die $\psi\psi$ -Anregungen sind auf Impulse q mit $q_s \leq |q| \leq \pi$ beschränkt, wobei q_s durch

$$q_s = 2\pi M_z/N \quad (5.7)$$

gegeben ist. Man beachte, daß das Kontinuum der $\psi\psi$ -Anregungen gegenüber Abb. 2.4 um $\Delta q = \pi$ verschoben ist, da für die $\psi\psi$ -Anregungen hier ($r = R - 1$) der Grundzustand in einem anderen Unterraum ($r = R$) liegt.

Das Spektrum hat jeweils einen *soft mode* bei $q = q_s$ und $q = \pi$. Hält man N fest und verkleinert M_z , dann bleibt der *soft mode* bei $q = \pi$ stationär, während der *soft mode* bei $q = q_s$ nach links wandert. Für $M_z = 0$ gehen die $\psi\psi$ -Anregungen in 2-Spinon-Triplett-Anregungen über. Erhöht man hingegen M_z , so wandert q_s nach rechts, so daß der für das Spektrum zur Verfügung stehende Ausschnitt der q - ω -Ebene immer kleiner wird. Erreicht man schließlich Sättigung ($M_z = N/2$), so verschwindet $S_{-+}^{(\psi\psi)}(q, \omega)$ in Übereinstimmung mit Abb. 5.1 (KARBACH *et al.*, 2002).

Abb. 5.3(b) zeigt das relative Gewicht der $\psi\psi$ -Anregungen in dem über die Energie integrierten Strukturfaktor, $S_{-+}(q)$, dargestellt durch das Verhältnis $S_{-+}^{\psi\psi}(q)/S_{-+}(q)$. Man kann hieran die Dominanz der $\psi\psi$ -Anregungen deutlich erkennen.

In (KARBACH *et al.*, 2000; KARBACH & MÜLLER, 2000) wird eine Reihe von $2m$ -Psinon-Anregungen aus der Klasse K_R als dominante Anregungen für die parallelen Spinfluktuationen im XXX-Modell identifiziert. Für festes m ist jeweils der niedrigste Zweig von Anregungen dominant. Diese Anregungen lassen sich einheitlich beschreiben und als Psinon-Antipsinon-Anregungen – $\psi\psi^*$ -Anregungen, Klasse (P2) – interpretieren. Bei den $\psi\psi^*$ -Anregungen übernimmt ein Magnon, das sich bezüglich der Konfiguration der Bethe-Quantenzahlen am Rande des von Magnonen besetzten Bereiches befindet, die Rolle eines Antipsinons, das durch den von Spinonen besetzten Bereich wandern kann, während ein Spinon wieder die Rolle eines Psinons übernimmt, das sich durch den von Magnonen besetzten Bereich bewegen kann. Hierdurch werden die $\psi\psi^*$ -Anregungen generiert. Abb. 5.5 zeigt die Konfigurationen der Bethe-Quantenzahlen für die $\psi\psi^*$ -Anregungen bei Viertelmagnetisierung für eine Kette der Länge $N = 16$. Hierin wird das Antipsinon durch einen kleinen grünen bzw. grauen Kreis und das Psinon entsprechend durch einen großen grünen bzw. grauen Kreis repräsentiert.

Die Reinterpretation der Anregungen der Klasse (P2) als 2-Teilchen-Anregungen hat wie bei der

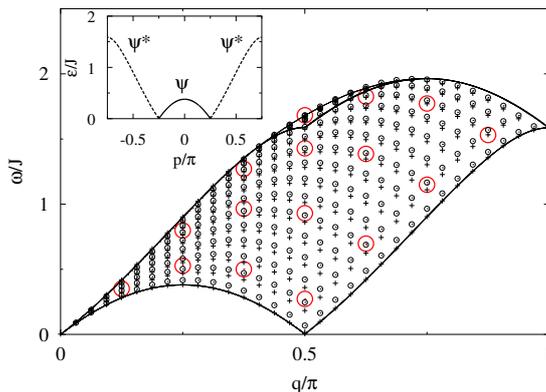


Abbildung 5.4: Spektrum der $\psi\psi^*$ -Anregungen mit $q \geq 0$ bei Viertelmagnetisierung ($M_z = N/4$) für eine Kette der Länge $N = 64$ (kleine Kreise, \odot) im Vergleich zum Spektrum, das sich bei wechselwirkungsfreier Überlagerung von Psinon und Antipsinon ergibt (+). Die großen Kreise (\odot) zeigen die $\psi\psi^*$ -Anregungen für $N = 16$. Die eingezeichneten Kontinuumsgrenzen sowie die oben links eingebetteten Dispersionsrelationen für Psinon ($0 \leq |p| \leq \pi/4$) und Antipsinon ($\pi/4 \leq |p| \leq 3\pi/4$) wurden aus den Daten zu $N = 2048$ abgeleitet. (KARBACH *et al.*, 2000)

Einführung der Spinonen oder der Psinonen in Kapitel 2.1 wiederum den Vorteil, daß die kollektiven Anregungen von der Wechselwirkung nur zweier identifizierbarer Teilchen bestimmt werden. Gleichzeitig verschwindet die auftretende Wechselwirkungsenergie für $N \rightarrow \infty$, da Streuprozesse zwischen Psinon und Antipsinon bei größer werdendem N immer seltener werden (KARBACH *et al.*, 2000). Dies ermöglicht die Ableitung des Spektrums sowie der spektralen Grenzen aus den Dispersionsrelationen von Psinon und Antipsinon.

Abb. 5.4 zeigt das Spektrum der $\psi\psi^*$ -Anregungen bei Viertelmagnetisierung für zwei Ketten der Längen $N = 16$ und $N = 64$. Für $N = 64$ ist zum Vergleich das Spektrum eingezeichnet, das sich bei einer (hypothetischen) wechselwirkungsfreien Überlagerung von Psinon und Antipsinon beobachten läßt. Die auftretende Wechselwirkungsenergie ist deutlich zu erkennen. Ferner sind die spektralen Grenzen des Anregungsspektrums für $N \rightarrow \infty$ eingezeichnet, wie sie sich aus den in der Abbildung gezeigten Dispersionsrelationen $\varepsilon_\psi(p)$ für das Psinon ($0 \leq |p| \leq \pi/4$) und $\varepsilon_{\psi^*}(p)$ für das Antipsinon ($\pi/4 \leq |p| \leq 3\pi/4$) ergeben.

Das Spektrum ist an der oberen Grenze um den Wert $q = \pi/2$ herum teilweise gefaltet, da in diesem Bereich die Gleichung $\omega = \varepsilon_\psi(p_\psi) + \varepsilon_{\psi^*}(p_{\psi^*})$ unter der Nebenbedingung $q = p_\psi + p_{\psi^*}$ keine eindeutigen Lösungen für p_ψ und p_{ψ^*} liefert. Ferner hat das Spektrum jeweils einen *soft mode* bei $q = 0$ und $q = q_s = \pi/2$, vgl. (2.33). Hält man N fest und verkleinert M_z , so wandert der *soft mode* bei $q = q_s$ nach rechts, bis die $\psi\psi^*$ -Anregungen bei $M_z = 0$ schließlich verschwinden. Erhöht man hingegen M_z , so wandert der *soft mode* nach links. Bei Erreichen der Sättigung ($M_z = N/2$) verschwinden die $\psi\psi^*$ -Anregungen ebenfalls (KARBACH *et al.*, 2000; KARBACH & MÜLLER, 2000).

Abb. 5.6(a) zeigt nochmals das Spektrum der $\psi\psi^*$ -Anregungen bei Viertelmagnetisierung, diesmal für eine Kette der Länge $N = 256$. Zusätzlich sind für $N = 16$ explizit die Zweige der $2m$ -Psinon-Anregungen, $m = 1, 2, 3, 4$, unterschieden, die die $\psi\psi^*$ -Anregungen bilden. Abb. 5.6(b) zeigt das relative Gewicht der $\psi\psi^*$ -Anregungen in dem über die Energie integrierten parallelen Strukturfaktor, $S_{zz}(q)$, dargestellt durch das Verhältnis $S_{zz}^{\psi\psi^*}(q)/S_{zz}(q)$. Man kann hieran die Dominanz der $\psi\psi^*$ -Anregungen deutlich erkennen.

In (KARBACH *et al.*, 2002) werden die $\psi\psi^*$ -Anregungen auch als dominante Anregungszustände für $S_{+-}(q, \omega)$ bei Viertelmagnetisierung im XXX-Modell identifiziert. Allerdings gehören die $\psi\psi^*$ -Anregungen der Klasse (P6), die die transversalen Spinfluktuationen dominieren, zur Klasse K_{R+1} , während die $\psi\psi^*$ -Anregungen der Klasse (P2), die die parallelen Spinfluktuationen dominieren, zur Klasse K_R gehören, d.h. es sind jeweils unterschiedliche invariante Unterräume involviert.

Abb. 5.7 zeigt die Konfigurationen der Bethe-Quantenzahlen für die $\psi\psi^*$ -Anregungen, die die trans-

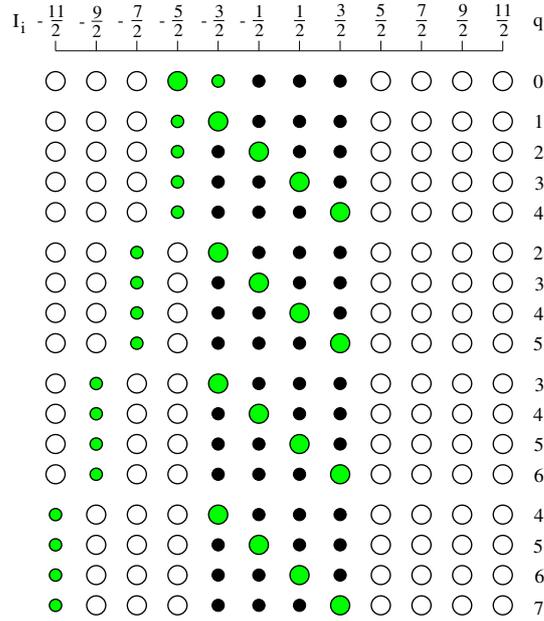


Abbildung 5.5: Konfigurationen der Bethe-Quantenzahlen für den Grundzustand $|\psi_0\rangle$ sowie die $\psi\psi^*$ -Anregungen der Klasse (P2) mit $0 \leq q \leq \pi$ für $N = 16$ und $M_z = 4$. Die Werte der Bethe-Quantenzahlen I_i sind durch kleine schwarze Kreise (\bullet) markiert. Sie repräsentieren Magnonen. Die großen (leeren) Kreise (\circ) repräsentieren Spinonen. Ein Magnon übernimmt die Rolle des Antispinons (kleiner grüner bzw. grauer Kreis), ein Spinon die Rolle des Psinons (großer grüner bzw. grauer Kreis). Die Impulse q sind in Einheiten von $2\pi/N$ angegeben.

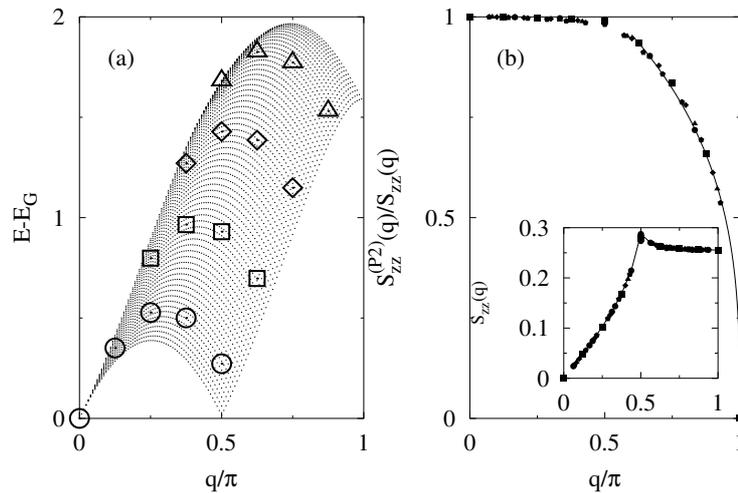


Abbildung 5.6: (a) Spektrum der $\psi\psi^*$ -Anregungen bei Viertelmagnetisierung für zwei Ketten der Länge $N = 16$ (Kreise, Quadrate, Rauten bzw. Dreiecke für $m = 1, 2, 3, 4$) und $N = 256$ (Punkte). (b) Integrierte Intensität $S_{zz}(q)$ (eingebettetes Bild) und relativer Beitrag der $\psi\psi^*$ -Anregungen für Ketten der Längen $N = 12, 16, 20, 24, 28, 32$. (KARBACH & MÜLLER, 2000)

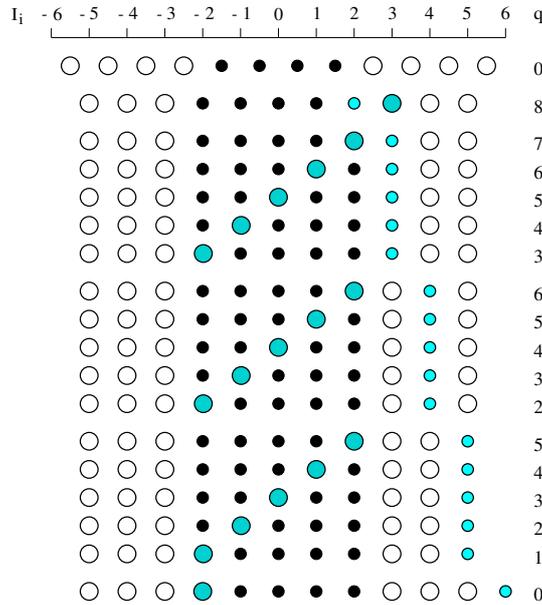


Abbildung 5.7: Konfigurationen der Bethe-Quantenzahlen für den Grundzustand $|\psi_0\rangle$ für $N = 16$ und $M_z = 4$ sowie die $\psi\psi^*$ -Anregungen der Klasse (P6) mit $0 \leq q \leq \pi$. Die Werte der Bethe-Quantenzahlen I_i sind durch kleine schwarze Kreise (\bullet) markiert. Sie repräsentieren Magnonen. Die großen (leeren) Kreise (\circ) repräsentieren Spinonen. Ein Magnon übernimmt die Rolle des Antipsinons (kleiner blauer bzw. grauer Kreis), ein Spinon die Rolle des Psinons (großer blauer bzw. grauer Kreis). Die letzte Reihe zeigt die Konfiguration für einen Zustand der Klasse (v), der zum gleichen S_T -Multipllett wie das Psinon-Vakuum (erste Reihe) gehört. Die Impulse q sind in Einheiten von $2\pi/N$ angegeben.

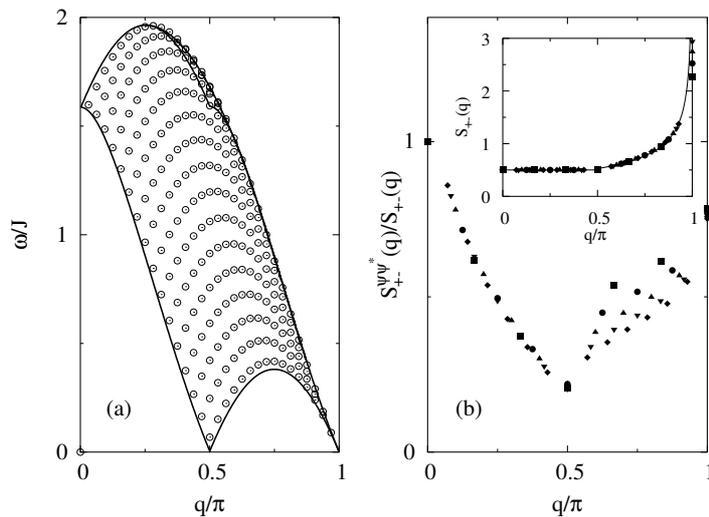


Abbildung 5.8: (a) Spektrum der $\psi\psi^*$ -Anregungen für $N = 64$ und $M_z = N/4$ und spektrale Grenzen für $N \rightarrow \infty$. (b) Integrierte Intensität $S_{+-}(q)$ (eingebettetes Bild) und relativer Beitrag der $\psi\psi^*$ -Anregungen für Ketten der Längen $N = 12, 16, 20, 24, 28$.

versalen Spinfluktuationen dominieren, für eine Kette der Länge $N = 16$. Man erkennt, daß der Grundzustand ($R = 4$) und die $\psi\psi^*$ -Anregungen ($R = 5$) in unterschiedlichen Räumen liegen. Daher wird in diesem Fall auch das Psinon-Vakuum zu $R = 5$ (zweite Reihe in Abb. 5.7) mit zu den $\psi\psi^*$ -Anregungen gezählt (analog wurde bei den $\psi\psi$ -Anregungen vorgegangen, vgl. Abb. 5.2). Die letzte Reihe in Abb. 5.7 zählt in Strenge nicht zu den $\psi\psi^*$ -Anregungen. Es handelt sich hierbei vielmehr um den bereits erwähnten Zustand, der eine Ausnahme in der Klasse (v) bildet, da er als einziger Zustand einen Beitrag zu $S_{+-}(0, \omega)$ liefert. Obwohl dieser Zustand nicht in die Klasse K_{R+1} fällt, bildet er doch einen natürlichen Endpunkt für das Kontinuum der Zustände der Klasse (P6) (KARBACH *et al.*, 2002).

Abb. 5.8(a) zeigt das Spektrum der $\psi\psi^*$ -Anregungen bei Viertelmagnetisierung für eine Kette der Länge $N = 64$. Eingezeichnet sind auch die spektralen Grenzen für $N \rightarrow \infty$. Da sich der Impulsübertrag hier auf einen anderen Grundzustand bezieht als im Falle der parallelen Spinfluktuationen, ist das Spektrum gegenüber Abb. 5.4 bezüglich der Linie $q = \pi$ gespiegelt.

Abb. 5.8(b) zeigt das relative Gewicht der $\psi\psi^*$ -Anregungen in dem über die Energie integrierten parallelen Strukturfaktor, $S_{zz}(q)$, dargestellt durch das Verhältnis $S_{zz}^{\psi\psi^*}(q)/S_{zz}(q)$. Man erkennt hieran, daß das relative Gewicht der $\psi\psi^*$ -Anregungen für $q = 0$ und $q = \pi$ am größten ist. Es fällt kontinuierlich von 100% bei $q = 0$ auf etwa 20% bei der Position des *soft mode* ab, und steigt dann wieder auf etwa 72.5% bei $q = \pi$ an. Damit durchläuft das relative Gewicht der $\psi\psi^*$ -Anregungen ein Minimum in dem Bereich, in dem das Spektrum teilweise gefaltet ist.

Faßt man die Erkenntnisse über die dominanten Anregungen für die hier interessierenden Fälle zusammen, so zeichnen sich alle dominanten Klassen von Anregungen – 2-Spinon-Triplett-Anregungen für $M_z = 0$ sowie die Klassen (P2), (P3) und (P6) für $M_z = N/4$ – dadurch aus, daß sie als 2-Teilchen-Anregungen interpretiert werden können. Dadurch lassen sie sich jeweils als zweiparametrischer Satz von Zuständen beschreiben.

Im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ bilden die hier identifizierten dominanten Anregungen zweiparametrische Kontinua in der (q, ω) -Ebene. Ihre Zustandsdichte, skaliert mit einem Faktor N^{-1} , geht in diesem Fall in eine stetige Funktion $D^{\lambda\lambda}(q, \omega)$ über (KARBACH & MÜLLER, 2000). Der Beitrag der dominanten Anregungsklassen zum jeweiligen dynamischen Strukturfaktor läßt sich dann ausgehend von (5.2) und (5.3) in Produktform schreiben (MÜLLER *et al.*, 1981; KARBACH *et al.*, 2000):

$$S_{\mu\mu}^{\lambda\lambda}(q, \omega) = M_{\mu\mu}^{\lambda\lambda}(q, \omega) \cdot D^{\lambda\lambda}(q, \omega), \quad \mu = z, +, -. \quad (5.8)$$

Hierin gehen die zugehörigen Übergangsmatrixelemente $M_{\lambda}^{\mu}(q)$, skaliert mit einem Faktor N , ein:

$$M_{\mu\mu}^{\lambda\lambda}(q, \omega) = N \cdot M_{\lambda}^{\mu}(q), \quad \mu = z, +, -. \quad (5.9)$$

In vielen Fällen liegen diese mit N^1 skalierten Übergangsmatrixelemente in der (q, ω) -Ebene auf einer stetigen Kurve, so z.B. im Falle der 2-Spinon-Anregungen im XXX-Modell (KARBACH *et al.*, 1997). Es gibt allerdings auch Fälle, in denen es notwendig ist, für den Skalierungsfaktor einen von Eins verschiedenen Exponenten zu wählen, d.h. N^1 durch N^{α} zu ersetzen, damit sich im thermodynamischen Limes eine stetige Kurve ergibt. Ein Beispiel für das Auftreten eines von Eins verschiedenen Exponenten wird in Kapitel 5.2.3 diskutiert.

Für Ketten endlicher Länge läßt sich (5.8) als Ansatz für den Beitrag der dominanten Anregungsklassen verwenden (KARBACH *et al.*, 2002). Die Genauigkeit dieses Ansatzes hängt davon ab, wie schnell sich die Daten für endliches N stetigen Kurven annähern. Probleme treten auf, wenn die Wechselwirkungsenergie zwischen den beteiligten Quasiteilchen bei wachsendem N lange signifikant bleibt (KARBACH *et al.*, 2002). Für die in Kapitel 2.1 diskutierten 2-Spinon- und 2-Psinon-Anregungen sowie die in diesem Kapitel diskutierten $\psi\psi$ - und $\psi\psi^*$ -Anregungen handelt es sich jedoch um Effekte der Ordnung $\mathcal{O}(N^{-1})$. Der Produktansatz wird umso besser, je mehr man sich dem thermodynamischen Limes nähert.

Die Berechnung der Zustandsdichte $D^{\lambda\lambda}(q, \omega)$ ist nach Identifikation und Parametrisierung der interessierenden dominanten Anregungsklassen mit Hilfe des Bethe-Ansatzes für sehr großes N ohne größere Probleme möglich, da hier nur die Zustandsenergien eingehen (MÜLLER *et al.*, 1981; KARBACH *et al.*, 1997; KARBACH *et al.*, 2002). Die Determinantendarstellung von Matrixelementen ermöglicht nun auch die Berechnung der reskalierten Übergangsmatrixelemente $M_{\mu\mu}^{\lambda\lambda}(q, \omega)$ für großes N (BIEGEL

| Δ | h |
|----------|--------|
| 1 | 1.5849 |
| 0.9 | 1.4931 |
| 0.7 | 1.3117 |
| 0.5 | 1.1334 |
| 0.3 | 0.9591 |
| 0.1 | 0.7897 |
| 0.001 | 0.7079 |
| 0 | 0.7071 |

Tabelle 5.2: Zur Magnetisierung $M_z = N/4$ gehörendes äußeres Magnetfeld h , ermittelt mittels Differenzenmethode für eine Kette der Länge $2^{15} = 32768$

et al., 2002; BIEGEL *et al.*, 2003a; BIEGEL *et al.*, 2003b). Dies soll im Rahmen des folgenden Kapitels für die parallelen und transversalen Spinfluktuationen demonstriert werden.

5.2 Lineshapes im XXX- und XXZ-Modell

Im folgenden werden einige Ergebnisse numerischer Rechnungen zu den Übergangsmatrixelementen für das XXX- und XXZ-Modell im planaren Bereich vorgestellt. Die Rechnungen wurden auf der Grundlage der in Kapitel 4 hergeleiteten Determinantendarstellung von Übergangsmatrixelementen unter Berücksichtigung der in Kapitel 5.1 diskutierten dominanten kollektiven Anregungen von Quasiteilchen durchgeführt. Die Berechnung der in den Formeln auftretenden Determinanten erfolgte mit der Routine *F03ADF* aus der NAG-Bibliothek¹⁰ wissenschaftlicher Routinen. Zur Bestimmung der Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen wurden die in (KARBACH *et al.*, 1998; BIEGEL, 2000) beschriebenen Verfahren angewendet.

Die Berechnung der Differenz $\omega = \omega_\lambda$ zwischen der Energie des angeregten Zustandes und der Energie des Grundzustandes erfordert im Falle der transversalen Spinfluktuationen gemäß (3.3) die Kenntnis des zu einer Magnetisierung $M_z \neq 0$ gehörenden Magnetfeldes h , da bei den transversalen Spinfluktuationen Grundzustand und angeregte Zustände in unterschiedlichen durch $r = N/2 - S_T^z$ gekennzeichneten Unterräumen liegen, vgl. Kapitel 4 und 5.1. Das Magnetfeld h läßt sich berechnen, indem man die Differenz zwischen den Energien der beiden Psinon-Vakua in den betreffenden Räumen für großes N berechnet. In Tabelle 5.2 sind die so ermittelten Werte von h für die im folgenden relevante Magnetisierung $M_z = N/4$ für verschiedene Werte des Parameters Δ zusammengestellt. Diese Werte wurden bei der Berechnung von ω entsprechend berücksichtigt.

Alle im folgenden betrachteten Anregungszustände zeichnen sich dadurch aus, daß sie durch reelle Lösungen der jeweiligen Bethe-Ansatz-Gleichungen beschrieben werden, und daß hierbei keine kritischen reellen Paare auftreten.

In den folgenden Abbildungen sind die errechneten Datenpunkte jeweils miteinander verbunden, um das Aussehen der *Lineshapes* zu verdeutlichen.

5.2.1 Lineshapes im XXX-Modell

Den Ausgangspunkt für die Betrachtungen im XXX-Modell bilden die parallelen Spinfluktuationen bei der Magnetisierung $M_z = N/4$. Abb. 5.9 zeigt die skalierten Übergangsmatrixelemente $M_{zz}^{\psi\psi^*}(\pi/2, \omega)$ für Übergänge zwischen den $\psi\psi^*$ -Anregungen der Klasse (P2) und dem Psinon-Vakuum. Die ausgefüllten Kreise (\bullet) sind hierbei Datenpunkte für $N = 512$, wie sie sich mit Hilfe der Determinantendarstellung ergeben. Zum Vergleich sind entsprechende Datenpunkte für $N = 12, 16, \dots, 32$ angegeben (\odot), wie sie aus entsprechenden Rechnungen unter expliziter Verwendung der Bethe-Ansatz-Wellenfunktionen folgen (KARBACH *et al.*, 2002).

¹⁰Numerical Algorithms Group, www.nag.com

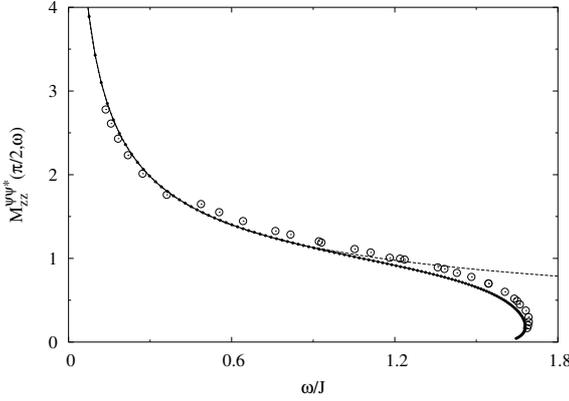


Abbildung 5.9: Übergangsmatrixelemente $M_{zz}^{\psi\psi^*}(\pi/2, \omega)$ zwischen den $\psi\psi^*$ -Anregungen der Klasse (P2) und dem Psinon-Vakuum für Ketten der Längen $N = 12, 16, \dots, 32$ (\odot) und $N = 512$ (\bullet) im XXX-Modell. Die gestrichelte Linie ist ein Fit der Funktion $a + b\omega^{\eta-2}$ an die Daten für $N = 512$ mit $\omega/J \leq 0.5$. Alle Daten beziehen sich auf die Magnetisierung $M_z = N/4$.

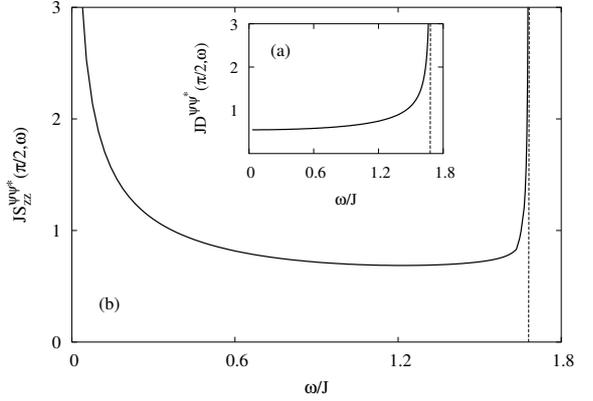


Abbildung 5.10: Zustandsdichte der $\psi\psi^*$ -Anregungen bei $q = \pi/2$ (a) und Beitrag der $\psi\psi^*$ -Anregungen zu $S_{zz}(\pi/2, \omega)$ (b) bei Magnetisierung $M_z = N/4$, ermittelt aus den Daten für $N = 512$.

Man kann in der Abbildung gut erkennen, daß sich die Datenpunkte für großes N zu einer stetigen Kurve – zu einem *Lineshape* – zusammenfügen. Ebenso ist die Faltung am oberen Ende des Spektrums der $\psi\psi^*$ -Anregungen (vgl. Abb. 5.4) deutlich sichtbar.

Die Ausbildung einer Infrarot-Singularität,

$$M_{zz}^{\psi\psi^*}(\pi/2, \omega) \sim \omega^{\eta-2}, \quad \eta - 2 = -0.468\dots, \quad (5.10)$$

bestätigt die Vorhersagen aus der konformen Invarianz (HALDANE, 1980; FLEDDERJOHANN *et al.*, 1996). Die gestrichelte Linie in Abb. 5.9 ist das Ergebnis eines entsprechenden zweiparametrischen Fits der Funktion $a + b\omega^{\eta-2}$ mit η aus (5.10) an die Daten für $N = 512$ mit $\omega/J \leq 0.5$. Am oberen Ende des Spektrums geht $M_{zz}^{\psi\psi^*}(\pi/2, \omega)$ gegen einen Wert nahe bei Null.

Die Zustandsdichte der $\psi\psi^*$ -Anregungen bei $q = \pi/2$,

$$D^{\psi\psi^*}(\pi/2, \omega) = \frac{2\pi}{N(\omega_{i+1} - \omega_i)}, \quad (5.11)$$

ist in Abb. 5.10(a) gezeigt. Die Zustandsdichte steigt mit wachsendem ω zunächst nur langsam an, divergiert dann aber aufgrund der Faltung des $\psi\psi^*$ -Spektrums am oberen Ende des Spektrums. Die Divergenz ist vom Typ einer inversen Quadratwurzel (KARBACH & MÜLLER, 2000).

Das Verhalten der Zustandsdichte führt dazu, daß der Beitrag der $\psi\psi^*$ -Anregungen zu $S_{zz}(\pi/2, \omega)$, berechnet gemäß (5.8), am oberen und unteren Ende des Spektrums divergiert, vgl. Abb. 5.10(b): Die Divergenz am unteren Ende des Spektrums wird von den Übergangsmatrixelementen generiert, die Divergenz am oberen Ende des Spektrums von der Zustandsdichte. Hierbei müssen in denjenigen Punkten, in denen das Spektrum gefaltet ist, die Beiträge von zwei Übergängen addiert werden, um den korrekten Verlauf der Kurve zu erhalten.

Die transversalen Spinfuktuationen, beschrieben durch $S_{-+}(q, \omega)$, werden für $M_z = N/4$ von den $\psi\psi$ -Anregungen der Klasse (P3) dominiert, vgl. Abb. 5.3. In Abb. 5.11(a) sind die skalierten Übergangsmatrixelemente $M_{-+}^{\psi\psi}(\pi, \omega)$ für Übergänge zwischen den $\psi\psi$ -Anregungen und dem Grundzustand bei Magnetisierung $M_z = N/4$ im XXX-Modell gezeigt. Die ausgefüllten Kreise (\bullet) sind hierbei Datenpunkte für $N = 1536$, wie sie sich mit Hilfe der Determinantendarstellung berechnen lassen. Zum Vergleich sind analog zu Abb. 5.9 entsprechende Datenpunkte für $N = 12, 16, \dots, 28$ angegeben (\circ), wie sie

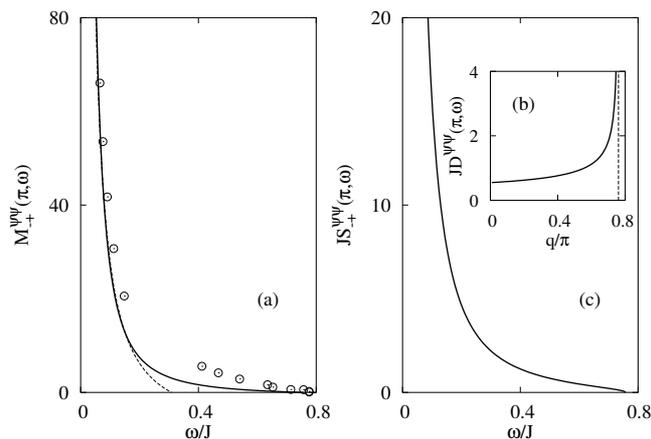


Abbildung 5.11: (a) Übergangsmatrixelemente $M_{-+}^{\psi\psi}(\pi, \omega)$ zwischen den $\psi\psi$ -Anregungen der Klasse (P3) und dem Grundzustand für Ketten der Längen $N = 12, 16, \dots, 28$ (○) und $N = 1536$ (●) im XXX-Modell. Die gestrichelte Linie ist ein Fit der Funktion $a + b\omega^{1/\eta-2}$ an die Daten für $N = 1536$ mit $\omega/J \leq 0.25$. (b) Zustandsdichte der $\psi\psi$ -Anregungen bei $q = \pi$ für $N = 1536$. (c) Beitrag der $\psi\psi$ -Anregungen zu $S_{-+}(\pi, \omega)$, ermittelt aus den Daten für $N = 1536$. Alle Daten beziehen sich auf die Magnetisierung $M_z = N/4$.

sich aus entsprechenden Rechnungen unter expliziter Verwendung der Bethe-Ansatz-Wellenfunktionen ergeben (KARBACH *et al.*, 2002).

Wie bei den parallelen Spinfuktuationen läßt sich auch hier gut erkennen, daß sich die Datenpunkte für großes N zu einem stetigen *Lineshape* zusammenfügen. Die Infrarot-Singularität,

$$M_{-+}^{\psi\psi}(\pi, \omega) \sim \omega^{1/\eta-2}, \quad 1/\eta - 2 = -1.346 \dots, \quad (5.12)$$

ist deutlich stärker als diejenige, die im Falle der parallelen Spinfuktuationen auftritt, vgl. (5.10). Ihre Beobachtung bestätigt wiederum die Vorhersagen aus der konformen Invarianz (HALDANE, 1980; FLEDDERJOHANN *et al.*, 1996). Die gestrichelte Linie in Abb. 5.11(a) ist das Ergebnis eines entsprechenden zweiparametrischen Fits der Funktion $a + b\omega^{1/\eta-2}$ mit η aus (5.12) an die Daten für $N = 1536$ mit $\omega/J \leq 0.25$. Am oberen Ende des Spektrums geht $M_{zz}^{\psi\psi^*}(\pi/2, \omega)$ gegen Null.

Die Zustandsdichte der $\psi\psi$ -Anregungen bei $q = \pi$, gezeigt in Abb. 5.11(b), weist die gleiche Struktur auf wie die der $\psi\psi^*$ -Anregungen bei $q = \pi/2$, vgl. Abb. 5.10(a). Allerdings trifft die Divergenz der Zustandsdichte am oberen Ende des Spektrums hier auf eine Nullstelle in den Übergangsmatrixelementen. Dadurch wird in dem in Abb. 5.11(c) gezeigten *Lineshape* die Divergenz am oberen Ende des Spektrums unterdrückt.

Im Grenzfall verschwindenden Magnetfelds ($h \rightarrow 0$) geht das Kontinuum der $\psi\psi$ -Anregungen in das der 2-Spinon-Anregungen über, vgl. Kapitel 2.1. Für diesen Fall läßt sich das Aussehen des *Lineshape* $S_{-+}^{sp,sp}(\pi, \omega)$ für $N \rightarrow \infty$ exakt bestimmen (KARBACH *et al.*, 1997). Man stellt fest, daß die beiden *Lineshapes* $S_{-+}^{sp,sp}(\pi, \omega)$ ($M_z = 0$) und $S_{-+}^{\psi\psi}(\pi, \omega)$ ($M_z = N/4$) ein ähnliches Verhalten zeigen. Allerdings müssen für $h = 0$ bei den auftretenden Singularitäten logarithmische Korrekturen berücksichtigt werden.

Im Gegensatz zu $S_{-+}(q, \omega)$ wird der dynamische Strukturfaktor $S_{+-}(q, \omega)$ von den $\psi\psi^*$ -Anregungen der Klasse (P6) dominiert, vgl. Abb. 5.8. Eine bemerkenswerte Eigenschaft von $S_{+-}^{\psi\psi^*}(q, \omega)$ ist das ungewöhnliche Skalenverhalten der Übergangsmatrixelemente zwischen dem Grundzustand und denjenigen ψ^* -Anregungen, die den Zweig bilden, der einen Teil der unteren Grenze des in Abb. 5.8(a) gezeigten Spektrums der $\psi\psi^*$ -Anregungen bildet.

Abb. 5.12(a) zeigt die Dispersionsrelation dieses Zweiges für verschiedene Magnetisierungen. Der Zweig der ψ^* -Anregungen existiert nur für $M_z \neq 0$. Erhöht man M_z von Null aus, so entsteht dieser Zweig ausgehend vom Punkt $q = 0, \omega = 0$. Hierbei wächst die Energie des Zustandes mit $q = 0$ proportional zum angelegten Magnetfeld h , vgl. Kapitel 5.1, während die Wellenzahl des Zustandes mit $\omega = 0$

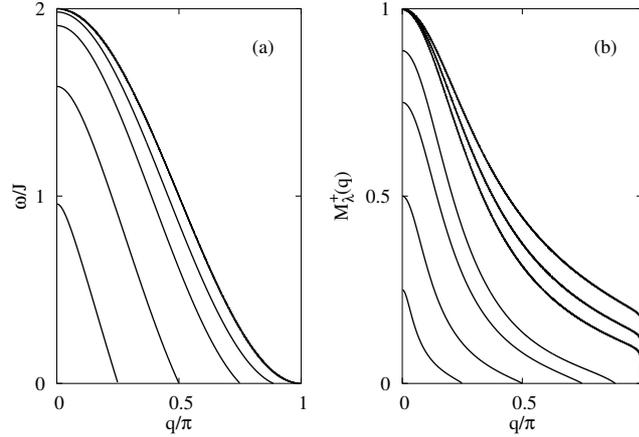


Abbildung 5.12: Dispersionsrelation für den Zweig der ψ^* -Anregungen, der das untere Ende des $\psi\psi^*$ -Spektrums begrenzt (a) und zugehörige Übergangsmatrixelemente $M_\lambda^+(q)$ (b) für Magnetisierungen $M_z/N = 192/1536 = 0.125$, $364/1536 = 0.25$, $576/1536 = 0.375$, $1364/3072 \simeq 0.444$, $9980/20000 = 0.499$. In (b) sind zusätzlich die Übergangsmatrixelemente für $M_z/N = 9990/20000 = 0.4995$ und $9995/20000 = 0.49975$ gezeigt.

proportional zur Magnetisierung M_z anwächst. Bei Erreichen der Sättigung ($M_z = N/2$) geht der Zweig der ψ^* -Anregungen in einen Zweig von 1-Magnon-Anregungen mit Dispersionsrelation $\omega/J = 1 + \cos q$ über.

In Abb. 5.12(b) werden die (unskalierten) Matrixelemente $M_\lambda^+(q)$ für die Übergänge zwischen den ψ^* -Anregungen und dem jeweiligen Psinon-Vakuum gezeigt. Zusätzlich zu den in Abb. 5.12(a) betrachteten Magnetisierungen werden hier zwei weitere Magnetisierungen berücksichtigt, die sehr nahe bei dem Wert für die Sättigung liegen.

Der dynamische Strukturfaktor bei $q = 0$ ist für beliebige Magnetisierungen exakt bekannt (MÜLLER *et al.*, 1981):

$$S_{+-}(0, \omega) = \frac{2M_z}{N} 2\pi\delta(\omega - h). \quad (5.13)$$

Hierbei handelt es sich um einen *resonant mode* der durch das äußere Feld induzierten Magnetisierung. Im Grenzfall $h \rightarrow h_S = 2J$ werden alle Übergangsmatrixelemente unabhängig von q und legen den dynamischen Strukturfaktor vollständig fest (MÜLLER *et al.*, 1981):

$$S_{+-}(q, \omega)|_{h=h_S} = 2\pi\delta(\omega - 2J). \quad (5.14)$$

Diese Entwicklung läßt sich in Abb. 5.12(b) bereits erkennen, wenn auch der Grenzprozeß sehr langsam verläuft. Man sieht in Abb. 5.12(b) allerdings ferner, daß die ψ^* -Anregungen auch schon für $h < h_S$ zum dynamischen Strukturfaktor beitragen. Aus diesem Grunde lassen sie sich als scharfe Resonanzlinien, unabhängig vom angrenzenden Spektrum, ausmachen, deren Intensitäten mit wachsendem äußeren Magnetfeld zunehmen.

5.2.2 Evolution von Lineshapes bei Variation von Δ

Die Determinantendarstellung von Matrixelementen für das XXZ-Modell eröffnet die Möglichkeit, die Evolution von Lineshapes im planaren Bereich des XXZ-Modells zu beobachten.

Abb. 5.13 zeigt die skalierten Übergangsmatrixelemente $M_{-+}^{sp,sp}(\pi, \omega)$ für Übergänge zwischen den 2-Spinon-Anregungen mit $S_T^z = 1$ und dem Grundzustand für verschiedene Werte des Anisotropieparameters Δ für eine Kette der Länge $N = 512$ und Magnetisierung $M_z = 0$.

Aus der Abbildung ist zu erkennen, daß sich die Datenpunkte für großes N jeweils zu einer stetigen Kurve zusammenfügen. Ebenso ist die Ausbildung einer Infrarot-Singularität zu beobachten. Die Lineshapes fallen mit wachsendem ω monoton ab und gehen am oberen Ende des Spektrums linear gegen

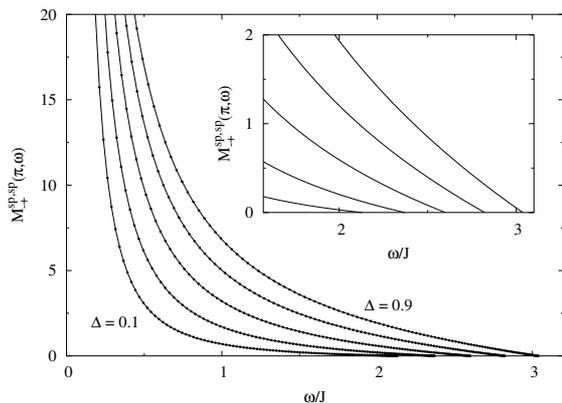


Abbildung 5.13: Übergangsmatrixelemente $M_{-+}^{sp,sp}(\pi, \omega)$ zwischen den 2-Spinon-Anregungen mit $S_T^z = 1$ und dem Grundzustand für verschiedene Werte des Anisotropieparameters Δ für eine Kette der Länge $N = 512$ und Magnetisierung $M_z = 0$. Eingebettet ist ein Ausschnitt für große Werte von ω .

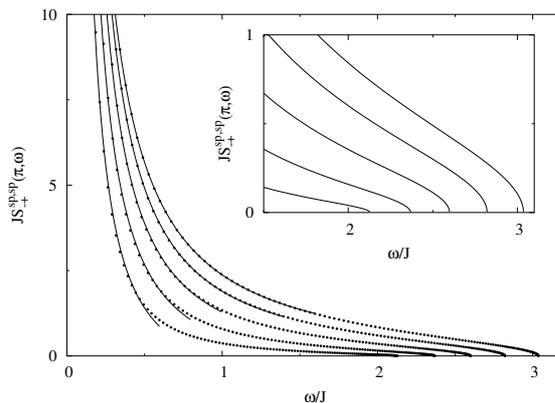


Abbildung 5.14: Beitrag der 2-Spinon-Anregungen mit $S_T^z = 1$ zu $S_{-+}(\pi, \omega)$ für verschiedene Werte des Anisotropieparameters Δ (von links nach rechts: $\Delta = 0.1, 0.3, \dots, 0.9$) für eine Kette der Länge $N = 512$. Die eingezeichneten Linien sind Fits der Funktion $a + b\omega^{-1-\gamma/\pi}$ an die Daten im jeweiligen Bereich. Eingebettet ist ein Ausschnitt für große Werte von ω .

den Wert $M_{-+}^{sp,sp}(q, \omega) = 0$. Dies zeigt insbesondere die in Abb. 5.13 eingebettete Vergrößerung für großes ω . Für $\Delta = 1$ läßt sich ein lineares Einmünden in den Wert Null analytisch herleiten (KARBACH *et al.*, 1997).

Die Zustandsdichte der 2-Spinon-Anregungen,

$$D^{sp,sp}(q, \omega) = \frac{2\pi}{N(\omega_{i+1} - \omega_i)}, \quad (5.15)$$

geht im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ in die Funktion

$$D_{t.L.}^{sp,sp}(q, \omega) = \frac{1}{[\varepsilon_U^2(q) - \omega^2]^{1/2}}, \quad \varepsilon_L(q) \leq \omega \leq \varepsilon_U(q), \quad (5.16)$$

über (MÜLLER *et al.*, 1981), wobei $\varepsilon_L(q)$ und $\varepsilon_U(q)$ die beiden Grenzen des 2-Spinon-Kontinuums bezeichnen, vgl. (2.25). Folglich divergiert die Zustandsdichte am oberen Ende des 2-Spinon-Kontinuums. Allerdings divergieren die zugehörigen *Lineshapes* $S_{-+}^{sp,sp}(\pi, \omega; \Delta)$, berechnet gemäß (5.8), nur am unteren Ende des Spektrums, da die Divergenz in der Zustandsdichte auf eine Nullstelle in den Übergangsmatrixelementen trifft. Die Divergenz in der Zustandsdichte führt lediglich dazu, daß die *Lineshapes* am oberen Ende des Spektrums nicht linear in den Wert Null einmünden, sondern wie eine Quadratwurzel. Abb. 5.14 zeigt die entsprechenden *Lineshapes*, wiederum für verschiedene Werte von Δ .

Die Infrarotdivergenz, die sich bei den skalierten Übergangsmatrixelementen beobachten läßt, bleibt nach der Produktbildung mit der Zustandsdichte erhalten. Die Divergenz wird durch ein Potenzgesetz beschrieben. Der zugehörige Exponent ist exakt bekannt (LUTHER & PESCHEL, 1975; FLEDDERJOHANN *et al.*, 1996) und hängt von Δ ab:

$$S_{-+}(\pi, \omega) \sim \omega^{-1-\gamma/\pi}, \quad \gamma = \arccos \Delta. \quad (5.17)$$

Dieses kritische Verhalten wird von den Daten für $N = 512$ korrekt widerspiegelt, was insbesondere auch ein Fit an die jeweiligen Daten für kleine ω bestätigt.

Verläßt man die Magnetisierung $M_z = 0$ und geht zu $M_z = N/4$ über, so dominieren die $\psi\psi$ -Anregungen der Klasse (P3) die durch $S_{-+}(q, \omega)$ beschriebenen transversalen Spinfluktuationen. Die Situation bei $\Delta = 1$ wurde bereits in Kapitel 5.2.1 beschrieben und ist in den Abbildungen 5.9 und

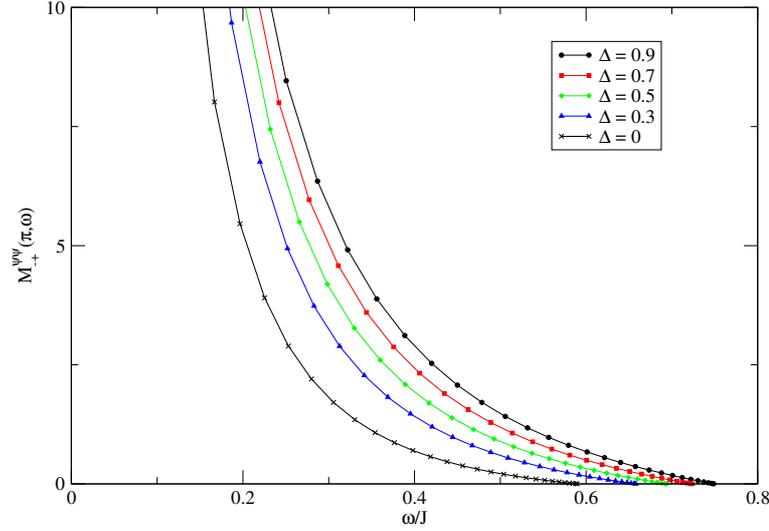


Abbildung 5.15: Übergangsmatrixelemente $M_{-+}^{\psi\psi}(\pi, \omega)$ zwischen den $\psi\psi$ -Anregungen der Klasse (P3) und dem Grundzustand für verschiedene Werte des Anisotropieparameters Δ für eine Kette der Länge $N = 256$ und Magnetisierung $M_z = N/4$.

5.10 zusammenfassend dargestellt. Die in Abb. 5.9 für die Übergangsmatrixelemente $M_{-+}^{\psi\psi}(\pi, \omega)$ zu erkennende Infrarotsingularität bleibt erhalten, wenn man Δ verkleinert und schließlich zum XX-Modell übergeht. Abb. 5.15 zeigt dies für eine Kette der Länge $N = 256$ und verschiedene Werte von Δ .

Man kann hier erkennen, daß die Steigung, mit der die *Lineshapes* am oberen Ende des Spektrums in den Wert Null linear einmünden, abnimmt. Gleichzeitig nimmt die Stärke der Singularität am unteren Ende des Spektrums mit abnehmendem Δ zu. Damit liegt hier das gleiche qualitative Verhalten wie für $M_z = 0$ vor.

Hingegen erwartet man für die in Abb. 5.9 gezeigten skalierten Matrixelemente $M_{zz}^{\psi\psi^*}(\pi/2, \omega)$ ein gänzlich anderes Verhalten bei Annäherung an $\Delta = 0$. Zum einen sollte die Faltung des Spektrums am oberen Rand verschwinden und zum anderen sollten alle Matrixelemente wegen (4.102) für $\Delta \rightarrow 0$ gegen den Wert Eins gehen, da innerhalb der Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen für die angeregten Zustände kein kritisches Paar auftreten kann.

Dieses Verhalten läßt sich auch in der Tat beobachten, wie Abb. 5.16(a) zeigt. Dort sind die Übergangsmatrixelemente $M_{zz}^{\psi\psi^*}(\pi/2, \omega)$ für verschiedene Werte des Anisotropieparameters Δ für eine Kette der Länge $N = 256$ und Magnetisierung $M_z = N/4$ gegen ω aufgetragen (die Übergangsmatrixelemente für $\Delta = 1$ sind in Abb. 5.9 dargestellt). Man kann hier gut erkennen, daß für $\Delta \rightarrow 0$ wie erwartet sowohl die Faltung des Spektrums verschwindet als auch sich alle Matrixelemente dem Wert Eins annähern. Abb. 5.16(b) zeigt die gleiche Situation bei $q = \pi/4$ und $q = 3\pi/4$.

5.2.3 Skalenverhalten der 2-Spinon-Übergangsraten $M_{-+}^{sp,sp}(\pi, \omega)$ im XX-Modell

In Kapitel 5.1 wurden für $M_z = 0$ die 2-Spinon-Anregungen mit $S_T^z = 1$ als dominante Anregungen für den dynamischen Strukturfaktor $S_{-+}(q, \omega)$ im XXZ-Modell identifiziert. Dieses spiegelt sich insbesondere in ihrem reziproken Skalenverhalten in den reskalierten Übergangsmatrixelementen und der reskalierten Zustandsdichte wider, was dazu führt, daß das Produkt

$$S_{-+}^{sp,sp}(q, \omega) = M_{-+}^{sp,sp}(q, \omega) \cdot D^{sp,sp}(q, \omega), \quad (5.18)$$

vgl. (5.8), im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ gegen eine stückweise glatte Funktion – den *Lineshape* der unendlich langen Kette – geht.

Führt man allerdings den Grenzübergang zum XX-Modell durch, so läßt sich ein qualitativ anderes Skalenverhalten beobachten. Damit die Übergangsmatrixelemente gegen eine nichtverschwindende

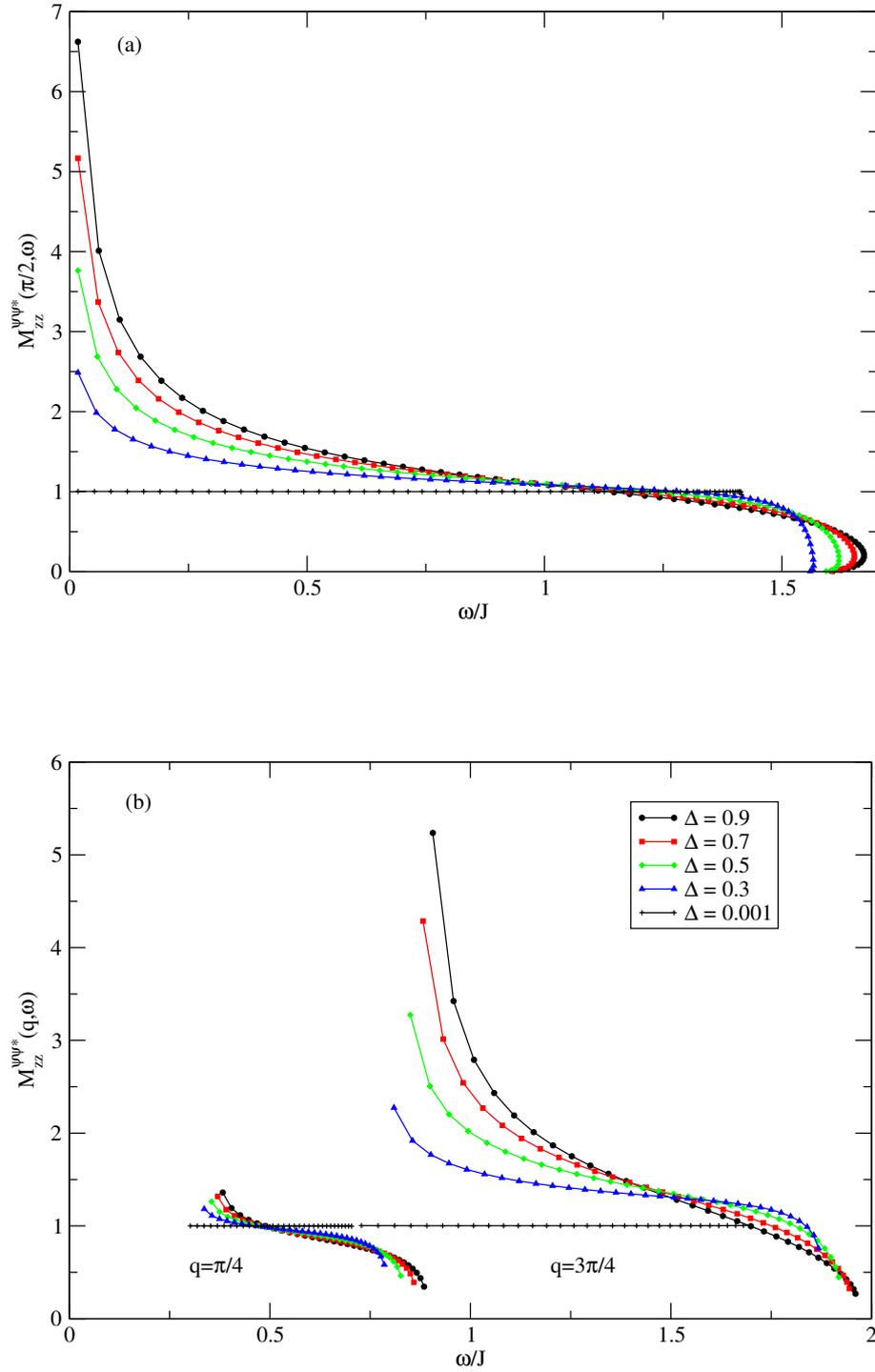


Abbildung 5.16: Übergangsmatrixelemente $M_{zz}^{\psi\psi^*}(q, \omega)$ zwischen den $\psi\psi^*$ -Anregungen der Klasse (P2) und dem Psinon-Vakuum für verschiedene Werte des Anisotropieparameters Δ für eine Kette der Länge $N = 256$ und Magnetisierung $M_z = N/4$ bei den Impulsen $q = \pi/2$ (a) sowie $q = \pi/4$ und $q = 3\pi/4$ (b)

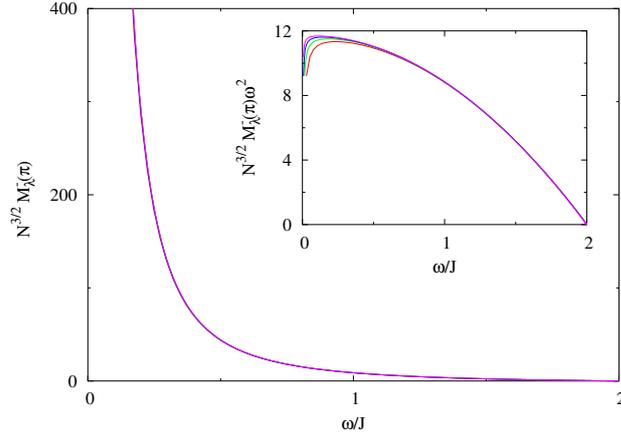


Abbildung 5.17: Reskalierte Übergangsmatrixelemente $\overline{M}_{-+}^{sp,sp}(\pi, \omega) = N^{3/2} M_{\lambda}^{-}(\pi)$ zwischen den 2-Spinon-Anregungen mit $S_T^z = 1$ und dem Grundzustand bei $\Delta = 0$ für Ketten der Längen $N = 512, 1024, 2048$ und 4096 . Eingebettet ist eine Darstellung derselben Größen multipliziert mit ω^2 .

stückweise glatte Funktion konvergieren, müssen sie anders skaliert werden:

$$\overline{M}_{-+}^{sp,sp}(q, \omega) = N^{3/2} \tilde{M}_{\lambda}^{-}(q). \quad (5.19)$$

Dies wird in Abb. 5.17 gezeigt. Dort sind die reskalierten Matrixelemente $\overline{M}_{-+}^{sp,sp}(\pi, \omega)$ für Ketten der Längen $N = 512, 1024, 2048$ und 4096 aufgetragen. Hierfür ergibt sich ein nahezu perfektes Skalierungsverhalten. Die Infrarotdivergenz, die sich für $N \rightarrow \infty$ in $\overline{M}_{-+}^{sp,sp}(\pi, \omega)$ entwickelt ist stärker, $\sim \omega^{-2}$, als die bekannte Singularität, $S_{-+}(q, \omega) \sim \omega^{-3/2}$, wie sie aus (5.17) für $\gamma = \pi/2$ folgt. Dies ist in dem in Abb. 5.17 eingebetteten Diagramm dokumentiert.

Das nichtreziproke Skalenverhalten zwischen den Übergangsmatrixelementen und der Zustandsdichte im XX-Modell hat zur Folge, daß der Beitrag der 2-Spinon-Anregungen zum dynamischen Strukturfaktor im Grenzfall $N \rightarrow \infty$ verschwindet. Damit hat das Auftreten von Singularitäten in $\overline{M}_{-+}^{sp,sp}(\pi, \omega)$ keinen unmittelbaren Einfluß auf $S_{-+}(q, \omega)$. Vielmehr kann das Auftreten von Singularitäten in $S_{-+}(q, \omega)$ in diesem Fall nur ein Effekt sein, der sich aus der Kombination der Eigenschaften aller $2m$ -Spinon-Anregungen ergibt.

Eine genaue Untersuchung der Struktur von $S_{-+}(q, \omega)$ setzt somit voraus, daß sich alle $2m$ -Spinon-Anregungen geeignet parametrisieren lassen, damit ein systematisches Lösen der entsprechenden Bethe-Ansatz-Gleichungen möglich wird. Ferner muß die Determinantendarstellung für $\tilde{M}_{\lambda}^{-}(q)$ auf den Fall des Vorliegens kritischer Paare verallgemeinert werden.

6 Ausblick

Die Verfügbarkeit der Determinantendarstellung eröffnet zahlreiche neue Möglichkeiten zur Berechnung von Übergangsmatrixelementen für große Systeme, d.h. großes N . Damit lassen sich einerseits Resultate, die mit anderen Methoden für großes N bzw. $N \rightarrow \infty$ gefunden wurden, überprüfen und andererseits neue Einsichten gewinnen, insbesondere abseits des isotropen XXX-Modells. Dies wurde in der vorliegenden Arbeit, insbesondere im Rahmen von Kapitel 5.2, bereits für unterschiedliche Fälle demonstriert.

Wie in Kapitel 3 gezeigt wurde, ist der Grenzübergang vom XXZ-Modell zum XX-Modell in den Bethe-Ansatz-Gleichungen möglich. Zudem sind in Kapitel 3.3 die Bethe-Ansatz-Gleichungen für das XX-Modell angegeben, die entweder im unkritischen Fall oder aber im allgemeinen Fall des Vorliegens von mehreren kritischen reellen und/oder komplexen Lösungspaaren zu lösen sind. Es liegt nun nahe, ebenso die Determinantendarstellung für die Übergangsmatrixelemente im XX-Modell für den allgemeinen Fall des Vorliegens von reellen und komplexen kritischen Lösungspaaren der Bethe-Ansatz-Gleichungen herzuleiten, um so Berechnungen für alle möglichen Fälle durchführen zu können. Dies verallgemeinert die in Kapitel 4.3 gezeigten Ergebnisse und ist insbesondere für eine weitere Diskussion der in Kapitel 5.2.3 vorgestellten Resultate erforderlich.

Die in Kapitel 5.2.3 gemachte Beobachtung, daß die 2-Spinon-Anregungen beim Übergang zum XX-Modell offensichtlich ihre Rolle als dominante Anregungen für $S_{-+}(q, \omega)$ verlieren, wirft natürlich die Frage auf, ob es sich hierbei um einen speziellen Einzelfall handelt, oder ob eventuell auch andere Klassen von Anregungen ein solches Schicksal erleiden können. Dieses sollte mit Hilfe der Determinantendarstellung herauszufinden sein.

Schließlich stellt sich die Frage, ob die der Herleitung der Determinantendarstellung zugrunde liegenden algebraischen Konzepte und Überlegungen (KITANINE *et al.*, 1999) einerseits eine Anwendung auf andere Quantenspinsysteme und andererseits eine Verallgemeinerung auf den Fall endlicher Temperaturen ($T > 0$) im Rahmen des thermodynamischen Bethe-Ansatzes bzw. der Quanten-Transfermatrix-Methode (KLÜMPER, 1993; TAKAHASHI *et al.*, 2001) erlauben.

A Rolle und Bedeutung des dynamischen Strukturfaktors in Theorie und Experiment

Ziel dieses Anhangs ist es, das Auftreten und die Bedeutung des dynamischen Strukturfaktors im Rahmen von Neutronen-Streuexperimenten zu diskutieren.

Neutronen-Streuexperimente spielen eine erhebliche Rolle bei der Untersuchung von Materie. Ihre Resultate erlauben wichtige Rückschlüsse auf den Aufbau und die Struktur der untersuchten Materie, insbesondere auch im Hinblick auf die Suche nach bzw. die Untersuchung von quasi-eindimensionalen Materialien, die mit Hilfe des Heisenberg-Modells oder verwandter Modelle beschrieben werden können, vgl. hierzu beispielsweise (NAGLER *et al.*, 1991; TENNANT *et al.*, 1995a; TENNANT *et al.*, 1995b; DENDER *et al.*, 1996; HAMMAR *et al.*, 1998; TENNANT *et al.*, 2003).

Die Bedeutung der Neutronen-Streuexperimente bei der Untersuchung von Materie beruht vor allem auf den Eigenschaften der Neutronen (SQUIRES, 1978; LOVESEY, 1987). Die de Broglie-Wellenlänge thermischer Neutronen liegt im Bereich interatomarer Abstände in Festkörpern und Flüssigkeiten, so daß bei einem Streuexperiment mit Neutronen Interferenzen auftreten, die Informationen über die atomare Struktur der Probe (des *Targets*) liefern.

Ferner sind Neutronen ungeladen, so daß sie tief in das *Target* eindringen können und Streueffekte an der Oberfläche in der Regel vernachlässigbar klein sind. Aufgrund der fehlenden Coulomb-Barriere kommen sie den Atomkernen im *Target* sehr nahe und werden an ihnen gestreut. Dies läßt Rückschlüsse auf die Anordnung der Atomkerne zu und ist vor allem bei der Untersuchung von Materialien, die aus leichten Elementen aufgebaut sind, von Bedeutung.

Schließlich besitzt das Neutron ein magnetisches Moment, so daß es mit den ungepaarten Elektronen in einem magnetischen Material wechselwirken kann. Elastische Streuprozesse, die auf dieser Wechselwirkung beruhen, liefern Informationen über die Anordnung der Elektronenspins und ihre Dichteverteilung im untersuchten Material. Inelastische Streuprozesse hingegen liefern Informationen über magnetische Anregungen und erlauben in aller Regel Rückschlüsse auf zeitabhängige Spin-Spin-Korrelationen im untersuchten Material.

Im folgenden wird der in Experimenten interessierende und meßbare Wirkungsquerschnitt für die Streuung von Neutronen hergeleitet. Dies erfolgt zunächst in allgemeinem Rahmen, und dann speziell für die (magnetische) Streuung an einer Spinkette.

A.1 Der Wirkungsquerschnitt für Neutronenstreuung

Bei einem typischen Streuexperiment treffen Teilchen mit Wellenvektor \vec{k}_i und Energie E_i auf ein *Target* und werden an diesem in einen Raumwinkel $d\Omega = \sin\vartheta d\vartheta d\varphi$ gestreut. Die gestreuten Teilchen (Wellenvektor \vec{k}_f) werden von einem Detektor aufgefangen, der in der Lage sein soll, auch die Energie E_f der gestreuten Teilchen zu bestimmen. In Abb. A.1 ist dies schematisch dargestellt.

Unter diesen Voraussetzungen mißt man den partiellen differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_f}. \quad (\text{A.1})$$

Dieser gibt die Zahl der Teilchen an, die pro Zeiteinheit in einen Raumwinkel $d\Omega$ gestreut werden und nach dem Streuprozess eine Energie zwischen E_f und $E_f + dE_f$ haben, normiert auf den Fluß der einfallenden Teilchen.

Integration über E_f liefert den differentiellen Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}$. Der totale Wirkungsquerschnitt σ folgt dann schließlich durch Integration über den Raumwinkel:

$$\sigma = \int d\Omega \int dE_f \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_f} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}. \quad (\text{A.2})$$

Aufgrund der Impuls- und Energieerhaltung wird beim Streuprozess der Impuls $\hbar\vec{\kappa}$ mit $\vec{\kappa} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ und die Energie

$$\hbar\omega = E_i - E_f = \frac{\hbar^2}{2m}(k_i^2 - k_f^2) \quad (\text{A.3})$$

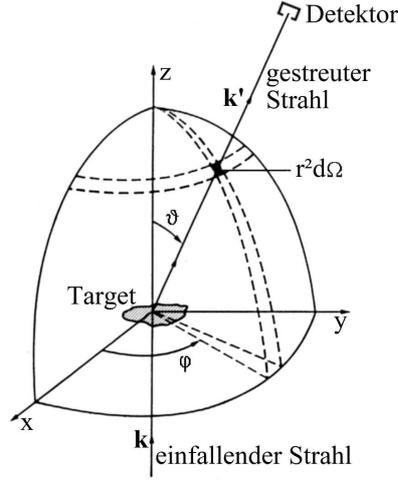


Abbildung A.1: Geometrie eines Neutronen-Streuxperiments (LOVESEY, 1987)

auf das *Target* übertragen ($k_\alpha = |\vec{k}_\alpha|$). \vec{k} wird auch als Streuvektor bezeichnet.

Man unterscheidet bei Streuprozessen zwischen elastischer Streuung ($E_i = E_f \Leftrightarrow k_i = k_f$) und inelastischer Streuung ($E_i \neq E_f$). Ist $E_i > E_f$, so wird Energie auf das *Target* übertragen (Stokes-Prozeß) und eine Anregung im *Target* erzeugt. Gilt hingegen $E_i < E_f$, so wird Energie vom *Target* auf das einfallende Teilchen übertragen (Anti-Stokes-Prozeß) und eine Anregung im *Target* vernichtet (BÖNI & FURRER, 2000).

Unter geeigneten Annahmen (SQUIRES, 1978; LOVESEY, 1987) läßt sich in erster Bornscher Näherung (d.h. es wird von einer sehr schwachen Streu-Wechselwirkung ausgegangen) mit Hilfe von Fermis goldener Regel folgender Ausdruck für den partiellen differentiellen Wirkungsquerschnitt herleiten:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_f} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \frac{k_f}{k_i} \sum_{\lambda_i, \lambda_f} p_{\lambda_i} |\langle \vec{k}_f, \lambda_f | \mathcal{O} | \vec{k}_i, \lambda_i \rangle|^2 \delta(E_{\lambda_i} - E_{\lambda_f} + \hbar\omega). \quad (\text{A.4})$$

Hierbei bezeichnen $|\lambda_i\rangle$ und $|\lambda_f\rangle$ die (auf 1 normierten) Anfangs- bzw. Endzustände des *Targets*. p_{λ_i} gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der der Zustand $|\lambda_i\rangle$ besetzt ist.¹¹ \mathcal{O} bezeichnet den Wechselwirkungsoperator zwischen den Neutronen und dem *Target*. Gleichung (A.4) ist in Strenge nur gültig, wenn das System während des Streuprozesses im thermodynamischen Gleichgewicht verharrt.¹² Ferner wird davon ausgegangen, daß der einfallende Strahl von Neutronen unpolarisiert ist.

Das Wechselwirkungspotential zwischen Neutronen und *Target* ist im Falle der Streuung an Atomkernen im allgemeinen von der Form

$$V(\vec{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_{j=1}^N V_j(\vec{r} - \vec{R}_j). \quad (\text{A.5})$$

Hierin bezeichnen N die Anzahl der Streuzentren und $V_j(\vec{r})$ das Wechselwirkungspotential zwischen einfallendem Neutron und einem Streuzentrum im *Target* (LOVESEY, 1987). Setzt man (A.5) als Wechselwirkungsoperator in (A.4) ein, so erhält man nach kurzer Rechnung folgenden Ausdruck für den partiellen differentiellen Wirkungsquerschnitt (LOVESEY, 1987):

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_f} = \frac{N}{2\pi\hbar} \frac{k_f}{k_i} \overline{|V_j(\vec{k})|^2} S(\vec{k}, \omega). \quad (\text{A.6})$$

Hierbei ist $V_j(\vec{k})$ die Fouriertransformierte von $V_j(\vec{r})$ und

¹¹Die Endzustände $|\lambda_f\rangle$ müssen nicht mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung gewichtet werden, da die Wahrscheinlichkeiten für einen Übergang $|\lambda_i\rangle \rightarrow |\lambda_f\rangle$ in den Matrixelementen von \mathcal{O} enthalten sind.

¹²Also: $p_\lambda = \exp(-E_\lambda/k_B T)/Z$ (Z : Zustandssumme).

$$S(\vec{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i\omega t) I(\vec{k}, t) \quad (\text{A.7})$$

mit

$$I(\vec{k}, t) = \frac{1}{N} \sum_{j,j'=1}^N \langle \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{R}_j) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_{j'}(t)) \rangle, \quad (\text{A.8})$$

wobei die Abkürzung $\langle \dots \rangle$ für den thermischen Erwartungswert $\sum_{\lambda} p_{\lambda} \langle \dots | \lambda \rangle$ verwendet wird. Die Funktion $S(\vec{k}, \omega)$ wird als Streufunktion bzw. dynamischer Strukturfaktor bezeichnet. Der dynamische Strukturfaktor ist vom Typ einer Antwortfunktion (LOVESEY, 1987; MÜLLER & KARBACH, 2000) und wird durch die spontanen Fluktuationen im *Target* bestimmt, deren Korrelationen durch die dynamische Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion $I(\vec{k}, t)$ (KARBACH *et al.*, 2000; BROHOLM *et al.*, 2002) beschrieben werden. Die enge Beziehung zwischen der Antwort des *Targets* auf Neutronenstreuung und den spontanen Fluktuationen im *Target* ergibt sich aus der Tatsache, daß Neutronenstreuung ein schwacher Wechselwirkungsprozeß ist und daher im Rahmen dieser Ausführungen in Bornscher Näherung, d.h. in der ersten Ordnung der Störungstheorie, behandelt wird. Somit zeigt sich, daß der differentielle Wirkungsquerschnitt für Neutronenstreuung, der ein Maß für die Reaktion des *Targets* auf den Streuprozess ist, durch das Spektrum der spontanen Fluktuationen im *Target* bestimmt wird. Folglich beschreibt der differentielle Wirkungsquerschnitt die tatsächlichen Eigenschaften des *Targets* ohne Beeinflussung durch die spezifischen experimentellen Umstände.¹³

Gemäß (A.6) kann der differentielle Wirkungsquerschnitt als Produkt zweier Faktoren geschrieben werden: Der erste Faktor, $|\overline{V}_j(\vec{k})|^2$, hängt ausschließlich von den Eigenschaften der einzelnen Streuzentren (z.B. Atomkerne) im *Target* ab, während in den zweiten Faktor, $S(\vec{k}, \omega)$, ausschließlich die Struktur und die dynamischen Eigenschaften des *Targets* eingehen. Da im Rahmen eines Experimentes der dynamische Strukturfaktor bestimmt wird, vgl. hierzu z.B. (SQUIRES, 1978; LOVESEY, 1987; BÖNI & FURRER, 2000), lassen sich aus den experimentellen Daten unmittelbar Rückschlüsse hinsichtlich des Aufbaus und der dynamischen Eigenschaften des *Targets* ziehen. Gleichzeitig bildet der dynamische Strukturfaktor eine natürliche Schnittstelle zwischen Theorie und Experiment (BROHOLM *et al.*, 2002): Mit Hilfe geeigneter theoretischer Modelle lassen sich Vorhersagen über den dynamischen Strukturfaktor (seine Größe, Struktur etc.) machen, deren Validität dann im Rahmen von Experimenten unmittelbar überprüft werden kann. Umgekehrt lassen sich experimentell gewonnene Daten mit Hilfe theoretischer Modelle angemessen auswerten und interpretieren.

A.2 Magnetische Streuung

Unter magnetischer Streuung versteht man in der Regel die Streuung von Neutronen an ungepaarten Elektronen (SQUIRES, 1978; LOVESEY, 1987). Bei der magnetischen Streuung findet eine Wechselwirkung zwischen den magnetischen Momenten der Neutronen und denen der ungepaarten Elektronen statt. Da die magnetischen Momente in beiden Fällen ihre Ursache in den Spins der beteiligten Teilchen haben, kann man unter magnetischer Streuung allgemeiner die Streuung von Neutronen an lokalisierten Spins verstehen.

Ausgangspunkt für die Berechnung des partiellen differentiellen Wirkungsquerschnitts für die magnetische Streuung an ungepaarten Elektronen ist der Ausdruck (A.4) für den partiellen differentiellen Wirkungsquerschnitt in Bornscher Näherung. Die Wechselwirkung zwischen einem Neutron und einem magnetischen Feld \vec{H} wird durch den Operator

$$\mathcal{O} = -\vec{\mu}_n \cdot \vec{H} = -\gamma \mu_N \vec{\sigma} \cdot \vec{H} \quad (\text{A.9})$$

beschrieben. Hierbei bezeichnet $\vec{\mu}_n = \gamma \mu_N \vec{\sigma}$ das magnetische Moment des Neutrons. Hier gehen das gyromagnetische Verhältnis γ für das Neutron, $\gamma = -1.913$ (SQUIRES, 1978), der Vektor der Pauli-Matrizen $\vec{\sigma}$ und das Kernmagneton μ_N ein. μ_N ist gegeben durch

¹³Im Rahmen der Quantenmechanik bzw. Statistischen Physik wird der Zusammenhang zwischen linearer Antworttheorie und spontanen Fluktuationen allgemein durch das Fluktuations-Dissipations-Theorem hergestellt (LOVESEY, 1987)

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_P c}, \quad (\text{A.10})$$

wobei m_P die Protonenmasse und e die Elementarladung bezeichnen. In analoger Weise hat man für das magnetische Moment des Elektrons

$$\vec{\mu}_e = -2\mu_B \vec{S}, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}, \quad \vec{S} = \frac{\vec{\sigma}}{2}. \quad (\text{A.11})$$

μ_B heißt Bohrsches Magneton, m_e ist die Masse des Elektrons. Das magnetische Feld, das von einem Elektron mit dem Impuls $\vec{p}^e = -i\hbar\vec{\nabla}$ erzeugt wird, wird durch

$$\vec{H}_1 = \text{rot} \left(\frac{\vec{\mu}_e \times \vec{R}}{|\vec{R}|^3} \right) + \frac{-e}{2m_e c} \left(\frac{\vec{p}^e \times \vec{R}}{|\vec{R}|^3} - \frac{\vec{R} \times \vec{p}^e}{|\vec{R}|^3} \right) \quad (\text{A.12})$$

beschrieben (SQUIRES, 1978; JACKSON, 1983). Der erste Summand beschreibt den Beitrag, der sich aufgrund des magnetischen (Dipol-) Momentes des Elektrons ergibt. Der zweite Summand beschreibt den Beitrag, der durch die Bewegung des Elektrons hervorgerufen wird (Biot-Savartsches Gesetz). Bei der Darstellung (A.12) wird bereits der Operatorcharakter des Elektronenimpulses berücksichtigt. Einsetzen von (A.12) in (A.9) liefert für die Wechselwirkung zwischen Neutron und i -tem Elektron:

$$\mathcal{O}_i = \gamma\mu_N \left[2\mu_B \vec{\sigma} \cdot \text{rot} \left(\frac{\vec{S}_i \times \vec{R}}{|\vec{R}|^3} \right) - \frac{e}{2m_e c} \left(\vec{p}_i^e \cdot \frac{\vec{\sigma} \times \vec{R}}{|\vec{R}|^3} + \frac{\vec{\sigma} \times \vec{R}}{|\vec{R}|^3} \cdot \vec{p}_i^e \right) \right]. \quad (\text{A.13})$$

Setzt man (A.13) in (A.4) ein, so erhält man für den partiellen differentiellen Wirkungsquerschnitt für die magnetische Streuung von unpolarisierten Neutronen an N Elektronen:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_f} &= \left(\frac{\gamma r_0}{4\pi} \right)^2 \frac{k_f}{k_i} \sum_{\lambda_i, \lambda_f} p_{\lambda_i} \left| \left\langle \vec{k}_f, \lambda_f \left| \sum_{i=1}^N \left[\vec{\sigma} \cdot \text{rot} \left(\frac{\vec{S}_i \times \vec{R}}{|\vec{R}|^3} \right) \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. - \frac{1}{2\hbar} \left(\vec{p}_i^e \cdot \frac{\vec{\sigma} \times \vec{R}}{|\vec{R}|^3} + \frac{\vec{\sigma} \times \vec{R}}{|\vec{R}|^3} \cdot \vec{p}_i^e \right) \right] \right| \vec{k}_i, \lambda_i \right\rangle \right|^2 \delta(E_{\lambda_i} - E_{\lambda_f} + \hbar\omega). \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Hierbei bezeichnet $r_0 = \frac{e^2}{m_e c^2} = 2.82 \cdot 10^{-13}$ cm den klassischen Elektronenradius (JACKSON, 1983). Durch die Verwendung von aus der Quantenmechanik bekannten Identitäten für die in (A.14) auftretenden Operatoren läßt sich (A.14) weiter umformen und vereinfachen und man erhält schließlich (SQUIRES, 1978; LOVESEY, 1987):

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_f} = N(\gamma r_0)^2 \frac{k_f}{k_i} \tilde{S}(\vec{\kappa}, \omega) \quad (\text{A.15})$$

mit der allgemeinen Antwortfunktion für die magnetische Streuung

$$\tilde{S}(\vec{\kappa}, \omega) = \sum_{\alpha, \beta} \left(\delta_{\alpha, \beta} - \frac{\kappa_\alpha \kappa_\beta}{|\vec{\kappa}|^2} \right) \sum_{\lambda_i, \lambda_f} p_{\lambda_i} \langle \lambda_i | Q_\alpha^\dagger | \lambda_f \rangle \langle \lambda_f | Q_\beta | \lambda_i \rangle \delta(E_{\lambda_i} - E_{\lambda_f} + \hbar\omega). \quad (\text{A.16})$$

Der magnetische Wechselwirkungsoperator \vec{Q} wird festgelegt durch

$$\vec{Q}_\perp = \frac{1}{|\vec{\kappa}|^2} \vec{\kappa} \times (\vec{Q} \times \vec{\kappa}), \quad \vec{Q}_\perp = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{|\vec{\kappa}|^2} \sum_{i=1}^N \exp(i\vec{\kappa} \cdot \vec{r}_i) \left(\vec{\kappa} \times (\vec{S}_i \times \vec{\kappa}) - \frac{i}{\hbar} \vec{\kappa} \times \vec{p}_i^e \right). \quad (\text{A.17})$$

Hierbei bezeichnet \vec{r}_i den Ort des i -ten Elektrons. Per Konstruktion ist \vec{Q} eindeutig festgelegt bis auf eine beliebige zu $\vec{\kappa}$ proportionale Funktion. Ausgehend von (A.12) wird man auf die Darstellung

$$\vec{Q} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) \left(\vec{S}_i - \frac{i}{\hbar|\vec{k}|^2} (\vec{k} \times \vec{p}_i^e) \right) \quad (\text{A.18})$$

geführt (BALCAR & LOVESEY, 1989), die (A.17) offensichtlich erfüllt.

Ein Vergleich zwischen (A.7) und (A.16) zeigt, daß die Antwortfunktion $\tilde{S}(\vec{k}, \omega)$ aufgrund der komplexen Struktur des Operators \vec{Q} im Vergleich zu dem durch (A.7) gegebenen dynamischen Strukturfaktor für die Neutronenstreuung an Atomkernen nicht ausschließlich durch spontane Fluktuationen im *Target* bestimmt wird. Aus diesem Grunde wird hier die Bezeichnung dynamischer Strukturfaktor für $\tilde{S}(\vec{k}, \omega)$ vermieden.

Der Zusammenhang zwischen dem partiellen differentiellen Wirkungsquerschnitt für die magnetische Streuung und spontanen Fluktuationen im *Target* soll vielmehr im folgenden genauer für den Spezialfall der Streuung von Neutronen an einer linearen Kette von Spins untersucht werden.

A.3 Streuung von Neutronen an einer Spinkette

Unter einer Spinkette versteht man modellhaft eine Anordnung von lokalisierten Spins entlang einer eindimensionalen Kette. Beispiele hierfür sind das Heisenberg-Modell oder das XXZ-Modell (vgl. Kapitel 2 ff.). In der Natur werden solche Strukturen in quasi-eindimensionalen Substanzen realisiert, in denen die spintragenden Teilchen, in der Regel ungepaarte Elektronen, entlang einer Dimension in einer Struktur nebeneinanderliegender Ketten an den Gitterplätzen eines Kristalls lokalisiert sind, vgl. hierzu z.B. (HAMMAR *et al.*, 1999; BROHOLM *et al.*, 2002).

Betrachtet man zunächst die Streuung von unpolarisierten Neutronen an einer idealen Spinkette der Länge N , bei der die Spins an den Plätzen $n = 1, \dots, N$ lokalisiert sind, so kann zu der magnetischen Wechselwirkung zwischen den einfallenden Neutronen und den Spins entlang der Kette nur der Dipolanteil beitragen, d.h. in diesem Falle ist der magnetische Wechselwirkungsoperator \vec{Q} ausgehend von (A.18) gegeben durch

$$\vec{Q} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \exp(iq \cdot n) \vec{S}_n \quad (\text{A.19})$$

mit $q = k_i - k_f$. An dieser Stelle geht bereits die eindimensionale Struktur des Problems ein: Die im allgemeinen auftretenden Orts- und Streuvektoren können durch skalare Größen ersetzt werden. Setzt man dieses in (A.15) und (A.16) ein, so erhält man den partiellen differentiellen Wirkungsquerschnitt für die Streuung unpolarisierter Neutronen an einer linearen Spinkette:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_f} = \frac{N}{2\pi\hbar} (\gamma r_0)^2 \frac{k_f}{k_i} \sum_{\alpha, \beta} (\delta_{\alpha, \beta} - 1) S_{\alpha\beta}(q, \omega) \quad (\text{A.20})$$

mit dem dynamischen Strukturfaktor

$$S_{\alpha\beta}(q, \omega) = \frac{2\pi\hbar}{N} \sum_{\lambda_i, \lambda_f} p_{\lambda_i} \sum_{n, n'=1}^N \exp(iq(n' - n)) \langle \lambda_i | S_n^{\alpha+} | \lambda_f \rangle \langle \lambda_f | S_{n'}^{\beta} | \lambda_i \rangle \delta(E_{\lambda_i} - E_{\lambda_f} + \hbar\omega) \quad (\text{A.21})$$

$$= \frac{2\pi\hbar}{N} \sum_{n, n'=1}^N \exp(iq(n' - n)) \langle S_n^{\alpha} S_{n'}^{\beta} \rangle \delta(E_{\lambda_i} - E_{\lambda_f} + \hbar\omega), \quad (\text{A.22})$$

wobei beim Übergang von (A.21) zu (A.22) die Vollständigkeitsrelation für die Zustände $|\lambda_f\rangle$ sowie die Hermitizität des Spinoperators eingeht. Setzt man weiterhin in (A.22) die Integraldarstellung der δ -Funktion,

$$\delta(E_{\lambda_i} - E_{\lambda_f} + \hbar\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\left(-\frac{it}{\hbar} (E_{\lambda_i} - E_{\lambda_f} + \hbar\omega)\right), \quad (\text{A.23})$$

ein, so läßt sich der dynamische Strukturfaktor nach dem Übergang vom Schrödinger- zum Heisenberg-Bild der Quantenmechanik in der Form

$$S_{\alpha\beta}(q, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i\omega t) I_S(q, t) \quad (\text{A.24})$$

mit

$$I_S(q, t) = \frac{1}{N} \sum_{n, n'=1}^N \exp(iq(n' - n)) \langle S_n^\alpha(t) S_{n'}^\beta \rangle \quad (\text{A.25})$$

angeben. Hieran läßt sich ablesen, daß der dynamische Strukturfaktor für die Streuung von Neutronen an einer Spinkette durch die spontanen Fluktuationen der Spins bestimmt wird, deren Korrelationen durch die dynamische Spin-Spin-Korrelationsfunktion $I_S(q, t)$ beschrieben werden. Damit ergibt sich hier die gleiche Struktur wie bei der Betrachtung der Neutronenstreuung an Atomkernen, vgl. (A.7) und (A.8). Der magnetische Wechselwirkungsoperator (A.19) wird in diesem Zusammenhang dann auch als Spin-Fluktuationsoperator bezeichnet. Bei der Durchführung von (realen) Streuexperimenten an quasi-eindimensionalen Substanzen müssen Spin und Bahndrehimpuls der ungepaarten Elektronen bzw. magnetischen Ionen im *Target* berücksichtigt werden. Ferner gehen die Orte der Streuzentren und die Impulse wieder vektoriell ein. Daher müssen (A.20), (A.24) sowie (A.25) in diesen Fällen entsprechend verallgemeinert werden (SQUIRES, 1978; LOVESEY, 1987; BROHOLM *et al.*, 2002).

Wird das Streuexperiment bei hinreichend niedrigen Temperaturen durchgeführt, so kann davon ausgegangen werden, daß die beobachteten Streuprozesse fast ausschließlich zwischen dem Grundzustand $|\psi_0\rangle$ der Spinkette bzw. der quasi-eindimensionalen Substanz und angeregten Zuständen $|\lambda\rangle$ stattfinden (KARBACH *et al.*, 2000; KARBACH *et al.*, 2002). In diesem Fall entfällt die thermische Mittelung über die Anfangszustände und man erhält für den dynamischen Strukturfaktor ausgehend von (A.21) ff.:

$$S_{\alpha\beta}(q, \omega) = \frac{2\pi\hbar}{N} \sum_{n, n'=1}^N \exp(iq(n' - n)) \langle \psi_0 | S_n^\alpha S_{n'}^\beta | \psi_0 \rangle \delta(\hbar(\omega - \omega_\lambda)) \quad (\text{A.26})$$

mit $\hbar\omega_\lambda = E_\lambda - E_0$. Dies läßt sich für $\alpha = \beta$ unter Ausnutzung der Vollständigkeitsrelation der angeregten Zustände in eine Summe über die angeregten Zustände $|\lambda\rangle$ umschreiben (MÜLLER *et al.*, 1981; BIEGEL *et al.*, 2002; KARBACH *et al.*, 2002):

$$S_{\mu\mu}(q, \omega) = 2\pi \sum_{\lambda} M_{\lambda}^{\mu}(q) \delta(\omega - \omega_{\lambda}). \quad (\text{A.27})$$

Hierin treten die Übergangsmatrixelemente¹⁴

$$M_{\lambda}^{\mu}(q) = |\langle \psi_0 | S_q^{\mu} | \lambda \rangle|^2 \quad (\text{A.28})$$

des Spin-Fluktuationsoperators

$$S_q^{\mu} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \exp(iq \cdot n) S_n^{\mu}, \quad \mu = x, y, z, \quad (\text{A.29})$$

auf. Ein Übergang von $|\psi_0\rangle$ zu $|\lambda\rangle$ trägt also eine Spektrallinie der Intensität $2\pi M_{\lambda}^{\mu}(q)$ zum dynamischen Strukturfaktor bei. In einem makroskopischen System sind diese Spektrallinien in verschiedenen Mustern im (q, ω) -Raum angeordnet, darunter Anregungszweige, Kontinua oder kompliziertere Strukturen. Die Funktionen $S_{\mu\mu}(q, \omega)$ liefern somit eine breite Palette von Informationen über die dynamischen Eigenschaften der Spinkette bei der Temperatur $T = 0$, insbesondere darüber, aus welchen Quasiteilchen die relevanten dynamischen Anregungszustände aufgebaut sind und welchen Dispersionsrelationen diese folgen (KARBACH *et al.*, 2000; KARBACH & MÜLLER, 2000), vgl. auch Kapitel 5.

¹⁴Sofern der Grundzustand und/oder die angeregten Zustände nicht auf 1 normiert sind, müssen in den entsprechenden Formeln die Zustände jeweils noch durch ihre Normen dividiert werden.

Statt S_q^x und S_q^y ist es auch möglich, die beiden zueinander adjungierten Operatoren $S_q^\pm = S_q^x \pm iS_q^y$ zu betrachten, vgl. (A.21). Es ergeben sich dann die folgenden dynamischen Strukturformfaktoren:

$$S_{zz}(q, \omega) = 2\pi \sum_{\lambda} M_{\lambda}^z(q) \delta(\omega - \omega_{\lambda}), \quad (\text{A.30})$$

$$S_{+-}(q, \omega) = 2\pi \sum_{\lambda} M_{\lambda}^+(q) \delta(\omega - \omega_{\lambda}), \quad (\text{A.31})$$

$$S_{-+}(q, \omega) = 2\pi \sum_{\lambda} M_{\lambda}^-(q) \delta(\omega - \omega_{\lambda}). \quad (\text{A.32})$$

Wird die z -Richtung als Vorzugsrichtung ausgezeichnet (beispielsweise durch ein äußeres Magnetfeld), so enthält $S_{zz}(q)$ die Informationen über die Beiträge der Spinfluktationen parallel zur Vorzugsrichtung und $S_{+-}(q)$ und $S_{-+}(q)$ die Informationen über die Beiträge senkrecht zur Vorzugsrichtung (KARBACH & MÜLLER, 2000). Dies kann prinzipiell auch in Experimenten getrennt voneinander gemessen bzw. ausgewertet werden (STONE *et al.*, 2003; TENNANT *et al.*, 2003).

Neben der in diesem Kapitel beschriebenen Untersuchung von Materialien mittels Neutronen-Streuexperimenten gibt es eine Reihe weiterer Untersuchungsmethoden, z.B. Röntgenbeugung, Elektronenstreuung, Photoemission oder Kernspinresonanz (HAMMAR *et al.*, 1999; KARBACH *et al.*, 2000). „Different measuring techniques view the same excitation spectrum through lenses of different color, i.e. by transition rates specific to particular fluctuation operators. Hence each experimental probe filters out a specific aspect of the zero point motion by viewing a particular dynamical variable of one and the same system“ (KARBACH *et al.*, 2000).

B Die ε -Entwicklung für $M_\lambda^z(q)$

Ziel der folgenden Ausführungen ist es, in der Berechnungsformel (4.67) für das Matrixelement $M_\lambda^z(q)$ im XXZ-Modell (trigonometrische Parametrisierung),

$$M_\lambda^z(q) = \frac{N \mathcal{K}_r(\{y_i^0\})}{4 \mathcal{K}_r(\{y_i\})} \frac{|\det(\mathbf{H} - \frac{2}{N}\mathbf{1})|^2}{\det \mathbf{N}(\{y_i^0\}) \det \mathbf{N}(\{y_i\})}, \quad (\text{B.1})$$

den Grenzübergang $\Delta \rightarrow 0$ zum XX-Modell für den Fall durchzuführen, daß für den angeregten Zustand $|\psi_\lambda\rangle$ ein kritisches reelles Lösungspaar der Bethe-Ansatz-Gleichungen (3.11) vorliegt (vgl. Kapitel 3.3.2). Um die Notationen zu vereinfachen, wird im folgenden o.B.d.A. davon ausgegangen, daß die beiden Lösungen y_1, y_2 das kritische Paar bilden, d.h.

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} y_1 y_2 = 1 = \tilde{y}_1 \tilde{y}_2, \quad (\text{B.2})$$

während die restlichen Lösungen y_3, \dots, y_r alle nichtkritisch sind und im XX-Modell durch (3.24) gegeben sind, d.h.

$$\tilde{y}_i = \tan\left(\frac{\pi I_i}{N}\right), \quad i = 3, \dots, r. \quad (\text{B.3})$$

Um den Grenzübergang $\Delta = \varepsilon \rightarrow 0$ in (B.1) durchführen zu können, wird für die Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen der Ansatz

$$y_i = \tilde{y}_i + \varepsilon \delta_i, \quad i = 1, \dots, r, \quad (\text{B.4})$$

gemacht und in (B.1) eingesetzt (vgl. Kapitel 3.3.2). Der Grenzübergang $\Delta \rightarrow 0$ führt dann auf eine Entwicklung im Kontrollparameter ε , deren führende Terme die Berechnungsformel für $M_\lambda^z(q)$ im XX-Modell liefern.

Bei dieser Entwicklung werden sukzessive alle Terme in (B.1) betrachtet, in denen y_1 und y_2 so aufeinandertreffen, daß Singularitäten oder unbestimmte Ausdrücke auftreten, mit dem Ziel, diese geeignet darzustellen, um zu einer geschlossenen Endformel zu gelangen.

B.1 $\mathcal{K}_r(\{y_i\})$

In

$$\mathcal{K}_r(\{y_i\}) = \prod_{i < j}^r |K(y_i, y_j)|, \quad K(y, y') = \frac{(1 - y^2)(1 - y'^2) \sin^2 \gamma}{(y - y')^2 + (1 - y^2)(1 - y'^2) \sin^2 \gamma}, \quad (\text{B.5})$$

vgl. (4.69), zeigt lediglich $K(y_1, y_2)$ kritisches Verhalten und divergiert für $\Delta \rightarrow 0$. Einsetzen des Ansatzes (B.4) in $K(y_1, y_2)$ und Entwicklung in ε liefert:

$$\tilde{K}(\tilde{y}_1, \tilde{y}_2) = \frac{1}{\varepsilon^2} P_{12} - \frac{2}{\varepsilon} Q_{12} + \mathcal{O}(1) \quad (\text{B.6})$$

mit

$$P_{12} = \frac{(1 - \tilde{y}_1^2)(1 - \tilde{y}_2^2)}{F_{12}} = P_{21}, \quad Q_{12} = \frac{(1 - \tilde{y}_1^2)(1 - \tilde{y}_2^2) C_{12} + A_{12} F_{12}}{F_{12}^2} = Q_{21} \quad (\text{B.7})$$

und

$$A_{12} = 2\tilde{y}_1^-(\delta_1 - \delta_2) = A_{21}, \quad (\text{B.8})$$

$$C_{12} = A_{12} + 2\delta_1 \delta_2 (\xi_1 - 1) = C_{21}, \quad (\text{B.9})$$

$$F_{12} = 4 [(\tilde{y}_1^-)^2 + (\xi_1 - 1)^2] = F_{21}. \quad (\text{B.10})$$

ξ_1 ist hierbei durch (3.30) gegeben. Ferner ist $\tilde{y}_1^\pm = (\tilde{y}_1 \pm \tilde{y}_2)/2$, vgl. (3.32).

B.2 $\det \mathbf{N}(\{y_i\})$

Die Matrix \mathbf{N} in $\det \mathbf{N}(\{y_i\})$ ist aus den Matrixelementen

$$\mathbf{N}_{a,b} = \left[1 - \frac{\cos \gamma}{N} \sum_{j=1}^r \frac{K(y_a, y_j)}{\kappa(y_a)} \right] \delta_{a,b} + \frac{\cos \gamma}{N} \frac{K(y_a, y_b)}{\kappa(y_a)} \quad (\text{B.11})$$

aufgebaut, vgl. (4.81). Im nichtkritischen Fall, d.h. es liegt kein kritisches Paar vor, verschwinden alle Nichtdiagonalelemente beim Übergang zum XX-Modell, während alle Diagonalelemente den Wert 1 annehmen, so daß $\det \mathbf{N}(\{y_i\})$ in diesem Fall gegen 1 geht, vgl. (4.87).

Bilden nun y_1 und y_2 ein kritisches reelles Paar, so beobachtet man stattdessen beim Übergang zum XX-Modell das Ausbilden einer Blockdiagonalform:

$$\det \tilde{\mathbf{N}}(\{\tilde{y}_i\}) = \left| \begin{array}{cc|cc} \tilde{\mathbf{N}}_{1,1} & \tilde{\mathbf{N}}_{1,2} & & \mathcal{O}(\varepsilon) \\ \tilde{\mathbf{N}}_{2,1} & \tilde{\mathbf{N}}_{2,2} & & \\ & & 1 + \mathcal{O}(\varepsilon) & \\ \mathcal{O}(\varepsilon) & & & \ddots \\ & & & & 1 + \mathcal{O}(\varepsilon) \end{array} \right| = \left| \begin{array}{cc} \tilde{\mathbf{N}}_{1,1} & \tilde{\mathbf{N}}_{1,2} \\ \tilde{\mathbf{N}}_{2,1} & \tilde{\mathbf{N}}_{2,2} \end{array} \right| + \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (\text{B.12})$$

$\det \tilde{\mathbf{N}}(\{\tilde{y}_i\})$ wird also durch eine 2×2 -Unterdeterminante festgelegt. In den hierin auftretenden Matrixelementen beobachtet man für $\Delta \rightarrow 0$ Divergenzen in den beiden Termen $K(y_1, y_2)/\kappa(y_1)$ und $K(y_2, y_1)/\kappa(y_2)$. Einsetzen des Ansatzes (B.4) in $K(y_1, y_2)/\kappa(y_1)$ und Entwicklung in ε führt auf:

$$\frac{\tilde{K}(\tilde{y}_1, \tilde{y}_2)}{\tilde{\kappa}(\tilde{y}_1)} = \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\tilde{y}_1^2 - \tilde{y}_2^2}{F_{12}} + \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{G_{12}}{F_{12}} - \frac{2(\tilde{y}_1^2 - \tilde{y}_2^2)C_{12}}{F_{12}} \right] + \mathcal{O}(1) \quad (\text{B.13})$$

mit

$$G_{12} = 4 [\tilde{y}_1^- \delta_1 - \tilde{y}_1^+ \delta_2 + (\tilde{y}_1^-)^2] \neq G_{21} \quad (\text{B.14})$$

und

$$G_{12} + G_{21} = 8 [(\tilde{y}_1^-)^2 - (\xi_1 - 1)]. \quad (\text{B.15})$$

Das analoge Ergebnis für $K(y_2, y_1)/\kappa(y_2)$ folgt unmittelbar aus (B.13) durch Vertauschen der Indizes. Durch das Anmultiplizieren von $\cos \gamma = \Delta = \varepsilon$ in $\mathbf{N}_{a,b}$ werden die Potenzen von ε um 1 erhöht. Das divergente Verhalten der Matrixelemente wird dann jeweils durch den ersten Summanden in (B.13) bestimmt.

Setzt man (B.13) in (B.11) und (B.12) ein, so stellt man bei der Berechnung der 2×2 -Unterdeterminante fest, daß sich die divergenten Anteile gerade herausheben. Nach kurzer Rechnung folgt schließlich:

$$\det \tilde{\mathbf{N}}(\{\tilde{y}_i\}) = 1 - 4 \frac{(\tilde{y}_1^-)^2}{F_{12}} \cdot \zeta_1 - \frac{8}{NF_{12}} [(\tilde{y}_1^-)^2 - (\xi_1 - 1)] \quad (\text{B.16})$$

mit

$$\zeta_1 = \frac{4}{N^2} \sum_{i=3}^r (\tilde{y}_1^+)^2 \frac{(1 - \tilde{y}_i^2)^2}{(1 + \tilde{y}_i^2 - 2\tilde{y}_i \tilde{y}_1^+)^2}. \quad (\text{B.17})$$

B.3 $\det(\mathbf{H} - \frac{2}{N}\mathbf{1})$

Bei der Untersuchung des Grenzübergangs $\Delta \rightarrow 0$ in $\det(\mathbf{H} - \frac{2}{N}\mathbf{1})$ bzw. $\det(\Gamma - \frac{2}{N}\mathbf{1})$ (je nachdem, welche Darstellung für die Matrixelemente verwendet wird, vgl. Kapitel 4) im Falle des Vorliegens eines kritischen reellen Paares hat es sich als nützlich erwiesen, zunächst die beiden speziellen Fälle $r = 2$ (nur das kritische Paar ist vorhanden) und $r = 3$ (neben dem kritischen Paar gibt es noch eine

weitere nichtkritische Lösung) zu betrachten. Im Rahmen der Diskussion dieser beiden Fälle werden Vorarbeiten geleistet, die es erlauben, den allgemeinen Fall kompakt und übersichtlich zu behandeln. Faßt man die bisher gewonnenen Resultate zum Grenzübergang $\Delta \rightarrow 0$, (B.6) und (B.16), zusammen, so stellt man fest, daß

$$\tilde{M}_\lambda^Z(q) \sim \varepsilon^2 \left| \det \left(\tilde{H}[\tilde{\Gamma}] - \frac{2}{N} \mathbf{1} \right) \right|^2. \quad (\text{B.18})$$

Zu einem endlichen, nichtverschwindenden Übergangsmatrixelement kann also ausschließlich die Ordnung ε^{-1} in $\det(\tilde{H}[\tilde{\Gamma}] - \frac{2}{N} \mathbf{1})$ beitragen.

B.3.1 $r = 2$

Der Fall $r = 2$ wird ausschließlich durch das kritische Paar bestimmt. In diesem Falle bietet es sich an, die Matrixelemente $\Gamma_{a,b}$ anstatt $H_{a,b}$ zu betrachten, da der einfache Zusammenhang (4.86) für die Lösungen des kritischen Paares nicht gegeben ist.

Die Matrixelemente $\Gamma_{a,b}$ sind für allgemeines r gemäß (4.76) gegeben durch:

$$\Gamma_{a,b} = F_N(y_a^0, y_b) \left[\frac{1}{G(y_a^0, y_b)} \prod_{j=1}^r \frac{G(y_j^0, y_b)}{G(y_j, y_b)} + \frac{1}{G^*(y_a^0, y_b)} \prod_{j=1}^r \frac{G^*(y_j^0, y_b)}{G^*(y_j, y_b)} \right] \quad (\text{B.19})$$

mit

$$G(y, y') = \frac{(y - y') \cot \gamma + \imath(1 - yy')}{\sqrt{1 - y^2} \cdot \sqrt{1 - y'^2}}, \quad G^*(y, y') = \frac{(y - y') \cot \gamma - \imath(1 - yy')}{\sqrt{1 - y^2} \cdot \sqrt{1 - y'^2}} \quad (\text{B.20})$$

und

$$F_N(y, y') = \frac{1}{2N} \frac{\sqrt{1 - y'^2} (1 + y^2 + (y^2 - 1) \cos \gamma)}{\sqrt{1 - y^2} (y - y') \sin \gamma}. \quad (\text{B.21})$$

Führt man für $r = 2$ in $\Gamma_{a,b}$, $a, b = 1, 2$, den Grenzübergang $\Delta \rightarrow 0$ durch, so verschwinden die Terme $G^{(*)}(y_1, y_2)$ und $G^{(*)}(y_2, y_1)$. Setzt man den Ansatz (B.4) in diese Terme ein und entwickelt um $\varepsilon = 0$ so erhält man:

$$\begin{aligned} \tilde{G}(\tilde{y}_1, \tilde{y}_2) &= \varepsilon J_{12} + \varepsilon^2 \imath L_{12} + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \\ \tilde{G}^*(\tilde{y}_1, \tilde{y}_2) &= \varepsilon J_{12}^* - \varepsilon^2 \imath L_{12} + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \\ \tilde{G}(\tilde{y}_2, \tilde{y}_1) &= -\varepsilon J_{12} + \varepsilon^2 \imath L_{12} + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \\ \tilde{G}^*(\tilde{y}_2, \tilde{y}_1) &= -\varepsilon J_{12} - \varepsilon^2 \imath L_{12} + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

mit

$$J_{12} = \frac{\tilde{y}_1 - \tilde{y}_2 - 2\imath(\xi_1 - 1)}{\sqrt{1 - \tilde{y}_1^2} \sqrt{1 - \tilde{y}_2^2}}, \quad J_{12}^* = \frac{\tilde{y}_1 - \tilde{y}_2 + 2\imath(\xi_1 - 1)}{\sqrt{1 - \tilde{y}_1^2} \sqrt{1 - \tilde{y}_2^2}} = -J_{21} \quad (\text{B.23})$$

sowie

$$L_{12} = 2 \frac{(\xi_1 - 1)(\delta_1 - \delta_2)}{\tilde{y}_1 - \tilde{y}_2} - \delta_1 \delta_2 = L_{21}. \quad (\text{B.24})$$

Setzt man dies zusammen mit (4.84) und (4.85) für $\Delta \rightarrow 0$ in (B.19) ein und berücksichtigt ferner, daß stets gilt:

$$\frac{1}{|G(y, y')|^2} = K(y, y'), \quad (\text{B.25})$$

so erhält man nach kurzer Rechnung für die Matrixelemente:

$$\tilde{\Gamma}_{1,1} = \tilde{F}_N(\tilde{y}_1^0, \tilde{y}_1) \frac{\tilde{G}(\tilde{y}_2^0, \tilde{y}_1)}{\imath} \frac{1}{|\tilde{G}(\tilde{y}_1, \tilde{y}_2)|^2} \cdot \left(\tilde{G}^*(\tilde{y}_2, \tilde{y}_1) + \tilde{G}(\tilde{y}_2, \tilde{y}_1) \right) \quad (\text{B.26})$$

$$= \imath \tilde{F}_N(\tilde{y}_1^0, \tilde{y}_1) \tilde{G}(\tilde{y}_2^0, \tilde{y}_1) (J_{12} + J_{12}^*) \left[\frac{1}{\varepsilon} P_{12} - 2Q_{12} \right] + \mathcal{O}(\varepsilon), \quad (\text{B.27})$$

und analog:

$$\tilde{\Gamma}_{2,1} = \imath \tilde{F}_N(\tilde{y}_2^0, \tilde{y}_1) \tilde{G}(\tilde{y}_1^0, \tilde{y}_1) (J_{12} + J_{12}^*) \left[\frac{1}{\varepsilon} P_{12} - 2Q_{12} \right] + \mathcal{O}(\varepsilon), \quad (\text{B.28})$$

$$\tilde{\Gamma}_{1,2} = \frac{1}{\imath} \tilde{F}_N(\tilde{y}_1^0, \tilde{y}_2) \tilde{G}(\tilde{y}_2^0, \tilde{y}_2) (J_{12} + J_{12}^*) \left[\frac{1}{\varepsilon} P_{12} - 2Q_{12} \right] + \mathcal{O}(\varepsilon), \quad (\text{B.29})$$

$$\tilde{\Gamma}_{2,2} = \frac{1}{\imath} \tilde{F}_N(\tilde{y}_2^0, \tilde{y}_2) \tilde{G}(\tilde{y}_1^0, \tilde{y}_2) (J_{12} + J_{12}^*) \left[\frac{1}{\varepsilon} P_{12} - 2Q_{12} \right] + \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (\text{B.30})$$

Hier wurde jeweils direkt (B.6) entsprechend eingesetzt. Für $r = 2$ läßt sich $\det(\tilde{\Gamma} - \frac{2}{N}\mathbf{1})$ unmittelbar ausrechnen:

$$\det\left(\tilde{\Gamma} - \frac{2}{N}\mathbf{1}\right) = \tilde{\Gamma}_{1,1}\tilde{\Gamma}_{2,2} - \tilde{\Gamma}_{2,1}\tilde{\Gamma}_{1,2} - \frac{2}{N}(\tilde{\Gamma}_{1,1} - \tilde{\Gamma}_{2,1} - \tilde{\Gamma}_{1,2} + \tilde{\Gamma}_{2,2}). \quad (\text{B.31})$$

Setzt man hierin (B.27) - (B.30) ein, so stellt man zunächst fest, daß in $\tilde{\Gamma}_{1,1}\tilde{\Gamma}_{2,2} - \tilde{\Gamma}_{2,1}\tilde{\Gamma}_{1,2}$ die Terme proportional zu ε^{-2} und ε^{-1} verschwinden. Ersteres macht ein konvergentes Übergangsmatrixelement überhaupt erst möglich, während letzteres dazu führt, daß $\tilde{\Gamma}_{1,1}\tilde{\Gamma}_{2,2} - \tilde{\Gamma}_{2,1}\tilde{\Gamma}_{1,2}$ keinen Beitrag zu einem nichtverschwindenden Übergangsmatrixelement liefern kann. Vielmehr kann ein solcher Beitrag nur von dem Klammerausdruck in (B.31) herrühren. So findet man schließlich:

$$\det\left(\tilde{\Gamma} - \frac{2}{N}\mathbf{1}\right) = \frac{4}{\varepsilon N^2} \frac{P_{12}(J_{12} + J_{12}^*)}{\sqrt{1 - (\tilde{y}_1^0)^2} \sqrt{1 - (\tilde{y}_2^0)^2}} [\tilde{y}_1^0 + \tilde{y}_2^0 - \tilde{y}_1^+(1 + \tilde{y}_1^0 \tilde{y}_2^0)] \times \\ \times \frac{\tilde{y}_1^+ [\tilde{y}_1^0(1 + (\tilde{y}_2^0)^2) - \tilde{y}_2^0(1 + (\tilde{y}_1^0)^2)]}{[1 + (\tilde{y}_1^0)^2 - 2\tilde{y}_1^0 \tilde{y}_1^+] \cdot [1 + (\tilde{y}_2^0)^2 - 2\tilde{y}_2^0 \tilde{y}_1^+]} + \mathcal{O}(1). \quad (\text{B.32})$$

B.3.2 $r = 3$

Geht man von $r = 2$ zu $r = 3$ über, so tritt neben das kritische Paar von Lösungen (y_1, y_2) eine unkritische Lösung y_3 . Das Verhalten der Elemente in der nun auftretenden dritte Spalte von $\det(\mathbf{H}[\Gamma] - \frac{2}{N}\mathbf{1})$ beim Übergang zum XX-Modell wird im wesentlichen durch die Eigenschaften von y_3 bestimmt. Da y_3 unkritisch ist, bietet es sich an, die Matrixelemente der dritten Spalte in der Form, wie sie in \mathbf{H} gemäß (4.75) gegeben ist, zu verwenden. Beim Grenzübergang $\Delta \rightarrow 0$ treten für die Elemente der dritten Spalte keine Schwierigkeiten im Zusammenhang mit dem kritischen Lösungspaar auf, und man erhält so zunächst mit (4.84) und (4.85):

$$\tilde{\mathbf{H}}_{a,3} = \frac{|1 - \tilde{y}_3^2|}{2N\imath} \frac{1 + (\tilde{y}_a^0)^2}{1 - \tilde{y}_a^0 \tilde{y}_3} \left[\prod_{i=1}^3 \frac{\sqrt{1 - \tilde{y}_i^2}}{\sqrt{1 - (\tilde{y}_i^0)^2}} \frac{1 - \tilde{y}_i^0 \tilde{y}_3}{1 - \tilde{y}_i \tilde{y}_3} \right] \cdot \lim_{\Delta \rightarrow 0} \left(\frac{1 - d(y_3)(-1)^{3-1}}{y_a^0 - y_3} \right), \quad (\text{B.33})$$

$$a = 1, 2, 3.$$

Der Term

$$1 - d(y_3)(-1)^{r-1} = 1 - \left[\frac{y_3 \cot \frac{\gamma}{2} - \imath}{y_3 \cot \frac{\gamma}{2} + \imath} \right]^N (-1)^{r-1} \quad (\text{B.34})$$

verschwindet stets für $\Delta \rightarrow 0$, und zwar für beliebiges $r \geq 3$. Setzt man nämlich den Ansatz (B.4) hier ein, so erhält man:

$$1 - d(y_3)(-1)^{r-1} = [1 - (-1)^{r-1}(-1)^{2I_3}] - (-1)^{r-1}(-1)^{2I_3}\varepsilon(\delta_3 + \tilde{y}_3)\frac{2N_l}{\tilde{y}_3^2 + 1} + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (\text{B.35})$$

Mit (4.86) folgt aber nun, daß stets $(-1)^{r-1}(-1)^{2I_3} = 1$ gilt, so daß

$$1 - d(y_3)(-1)^{r-1} = -\varepsilon(\delta_3 + \tilde{y}_3)\frac{2N_l}{\tilde{y}_3^2 + 1} + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (\text{B.36})$$

Vor diesem Hintergrund sind nun für die Berechnung des verbleibenden Limes in (B.33) zwei Fälle zu unterscheiden:

1. Im Grenzwert $\Delta \rightarrow 0$ gibt es keine Grundzustandslösung \tilde{y}_i^0 , $i = 1, 2, 3$, die mit \tilde{y}_3 übereinstimmt, d.h. $\tilde{y}_3 \neq \tilde{y}_i^0 \forall i = 1, 2, 3$. In diesem Fall läßt sich der Grenzübergang in (B.33) problemlos durchführen und mit (B.36) folgt:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{a,3} &= -\varepsilon(\delta_3 + \tilde{y}_3)\frac{|1 - \tilde{y}_3^2|}{1 + \tilde{y}_3^2}\frac{1 + (\tilde{y}_a^0)^2}{(\tilde{y}_a^0 - \tilde{y}_3)(1 - \tilde{y}_a^0\tilde{y}_3)} \left[\prod_{i=1}^3 \frac{\sqrt{1 - \tilde{y}_i^2}}{\sqrt{1 - (\tilde{y}_i^0)^2}} \frac{1 - \tilde{y}_i^0\tilde{y}_3}{1 - \tilde{y}_i\tilde{y}_3} \right] \\ &+ \mathcal{O}(\varepsilon^2), \end{aligned} \quad (\text{B.37}) \quad a = 1, 2, 3.$$

2. \tilde{y}_3 stimmt mit einer Grundzustandslösung überein. Dies soll, eventuell nach Ummumerierung, die Lösung \tilde{y}_3^0 sein, d.h. $\tilde{y}_3 = \tilde{y}_3^0$. In diesem Fall führt das Ausführen des Limes in (B.33) auf einen unbestimmten Ausdruck „ $\frac{0}{0}$ “, der allerdings mit Hilfe elementarer Methoden behoben werden kann, wenn man hierzu I_3 als kontinuierlich variierbaren Parameter annimmt:

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} \left(\frac{1 - d(y_3)(-1)^2}{y_a^0 - y_3} \right) = \frac{2N_l}{1 + \tilde{y}_3^2} \delta_{\tilde{y}_3, \tilde{y}_3^0} + \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (\text{B.38})$$

Damit folgt in diesem Fall (man beachte: $\tilde{y}_3 = \tilde{y}_3^0$):

$$\tilde{H}_{3,3} = \text{sgn}(1 - \tilde{y}_3^2) \cdot \left[\prod_{i=1}^2 \frac{\sqrt{1 - \tilde{y}_i^2}}{\sqrt{1 - (\tilde{y}_i^0)^2}} \frac{1 - \tilde{y}_i^0\tilde{y}_3}{1 - \tilde{y}_i\tilde{y}_3} \right] + \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (\text{B.39})$$

Die Matrixelemente $\tilde{H}_{1,3}$ und $\tilde{H}_{2,3}$ ergeben sich aus (B.37).

Die übrigen Matrixelemente lassen sich analog zum Fall $r = 2$ herleiten. Sie unterscheiden sich zwar in einzelnen Faktoren, zeigen in der ε -Entwicklung aber alle die gleiche Abhängigkeit von ε :

$$\tilde{\Gamma}_{i,j} \sim (J_{12} + J_{12}^*) \left[\frac{1}{\varepsilon} P_{12} - 2Q_{12} \right] + \mathcal{O}(\varepsilon), \quad i = 1, 2, 3, \quad j = 1, 2. \quad (\text{B.40})$$

Damit sind alle Matrixelemente für den Fall $r = 3$ bekannt und $\det(\tilde{H}[\tilde{\Gamma}] - \frac{2}{N}\mathbf{1})$ kann berechnet werden.¹⁵ Hierzu wird folgende Entwicklungsformel verwendet (MUIR, 1960):

$$\det \left(\tilde{\Gamma} - \frac{2}{N}\mathbf{1} \right) = \det \tilde{\Gamma} - \frac{2}{N} \sum_{i,j=1}^3 (-1)^{i+j} \det \tilde{\Gamma}^{(i,j)}. \quad (\text{B.41})$$

In dieser Formel bezeichnet $\tilde{\Gamma}^{(i,j)}$ den Minor von $\tilde{\Gamma}$, der sich durch Streichen der i -ten Zeile und j -ten Spalte ergibt.

¹⁵Um die Notationen zu vereinfachen, wird im folgenden stets $\det(\tilde{\Gamma} - \frac{2}{N}\mathbf{1})$ statt $\det(\tilde{H}[\tilde{\Gamma}] - \frac{2}{N}\mathbf{1})$ geschrieben.

Zunächst zum 1. Fall: Setzt man die Matrixelemente gemäß (B.37) und (B.40) in $\det \tilde{\Gamma}$ und entwickelt um $\varepsilon = 0$, so findet man folgendes Verhalten:

$$\det \tilde{\Gamma} \sim \underbrace{(\varepsilon^{-1}P_{12} - 2Q_{12})^2}_{\text{aus 1./2. Spalte}} \cdot \underbrace{\varepsilon}_{\text{aus 3. Spalte}} \cdot \det \left[\left(\frac{1}{\tilde{y}_a^0 - \tilde{y}_b} \frac{1}{1 - \tilde{y}_a^0 \tilde{y}_b} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \right)_{a,b=1,2,3} \right]. \quad (\text{B.42})$$

Da die Lösungen des kritischen Paares die Gleichung $\tilde{y}_1 \tilde{y}_2 = 1$ erfüllen, läßt sich dieses weiter umformen:

$$\det \left[\dots \right] = \begin{vmatrix} \frac{1}{\tilde{y}_1^0 - \tilde{y}_1} \frac{1}{1 - \tilde{y}_1^0 \tilde{y}_1} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) & \frac{\tilde{y}_1^2}{\tilde{y}_1^0 - \tilde{y}_1} \frac{1}{1 - \tilde{y}_1^0 \tilde{y}_1} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) & \dots \\ \frac{1}{\tilde{y}_2^0 - \tilde{y}_1} \frac{1}{1 - \tilde{y}_2^0 \tilde{y}_1} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) & \frac{\tilde{y}_1^2}{\tilde{y}_2^0 - \tilde{y}_1} \frac{1}{1 - \tilde{y}_2^0 \tilde{y}_1} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) & \dots \\ \frac{1}{\tilde{y}_3^0 - \tilde{y}_1} \frac{1}{1 - \tilde{y}_3^0 \tilde{y}_1} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) & \frac{\tilde{y}_1^2}{\tilde{y}_3^0 - \tilde{y}_1} \frac{1}{1 - \tilde{y}_3^0 \tilde{y}_1} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) & \dots \end{vmatrix} = 0 + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (\text{B.43})$$

da die erste und zweite Spalte in der Ordnung ε^0 linear abhängig sind. (B.42) und (B.43) ergeben zusammen:

$$\det \tilde{\Gamma} \sim \mathcal{O}(\varepsilon) \quad (\text{B.44})$$

Damit liefert $\det \tilde{\Gamma}$ keinen Beitrag zu $\tilde{M}_\lambda^z(q)$, vgl. (B.18). In analoger Weise findet man für die Minoren:

$$\det \tilde{\Gamma}^{(i,j)} \sim (\varepsilon^{-1}P_{12} - 2Q_{12}) \cdot \varepsilon \sim \mathcal{O}(1), \quad i = 1, 2, 3, \quad j = 1, 2, \quad (\text{B.45})$$

und

$$\det \tilde{\Gamma}^{(i,3)} \sim (\varepsilon^{-1}P_{12} - 2Q_{12})^2 \cdot (0 + \mathcal{O}(\varepsilon^2)) \sim \mathcal{O}(1), \quad i = 1, 2, 3. \quad (\text{B.46})$$

Demnach liefert auch keiner der Minoren einen Beitrag zu $\tilde{M}_\lambda^z(q)$, so daß schließlich folgt:

$$\tilde{M}_\lambda^z(q) = 0, \quad \text{falls } \tilde{y}_3 \neq \tilde{y}_i^0 \quad \forall i = 1, 2, 3. \quad (\text{B.47})$$

Im 2. Fall, $\tilde{y}_3 = \tilde{y}_3^0$, läßt sich aus der dritten Spalte kein gemeinsamer Faktor ε mehr ausklammern, vgl. (B.39). Damit wird die führende Ordnung in der ε -Entwicklung von $\det \tilde{\Gamma}$ im Vergleich zum 1. Fall um Eins erniedrigt:

$$\det \tilde{\Gamma} \sim \mathcal{O}(1) \quad (\text{B.48})$$

Wegen (B.18) liefert $\det \tilde{\Gamma}$ aber auch hier keinen Beitrag zu $\tilde{M}_\lambda^z(q)$. Von den Minoren tragen in diesem Fall alle diejenigen zu $\tilde{M}_\lambda^z(q)$ bei, in denen das Matrixelement $\tilde{\mathbf{H}}_{3,3}$ nicht gestrichen wird. Also:

$$\det \left(\tilde{\Gamma} - \frac{2}{N}\mathbf{1} \right) = -\frac{2}{N} \left[\det \tilde{\Gamma}^{(1,1)} - \det \tilde{\Gamma}^{(1,2)} - \det \tilde{\Gamma}^{(2,1)} + \det \tilde{\Gamma}^{(2,2)} \right] + \mathcal{O}(1) \quad (\text{B.49})$$

$$= -\frac{2}{N} \tilde{\mathbf{H}}_{3,3} \left(\tilde{\Gamma}_{2,2} - \tilde{\Gamma}_{2,1} - \tilde{\Gamma}_{1,2} + \tilde{\Gamma}_{1,1} \right) + \mathcal{O}(1). \quad (\text{B.50})$$

Da hier $\tilde{y}_3 = \tilde{y}_3^0$ gilt, kürzen sich in $\tilde{\Gamma}_{i,j}$, $i, j = 1, 2$, alle Terme heraus, in denen sich die Matrixelemente für $r = 3$ von denen für $r = 2$ unterscheiden. Somit läßt sich das Resultat (B.32) für den Fall $r = 2$ hier unmittelbar einsetzen, und man erhält schließlich:

$$\begin{aligned} \det \left(\tilde{\Gamma} - \frac{2}{N}\mathbf{1} \right) &= \frac{4}{\varepsilon N^2} \tilde{\mathbf{H}}_{3,3} \frac{P_{12}(J_{12} + J_{12}^*)}{\sqrt{1 - (\tilde{y}_1^0)^2} \sqrt{1 - (\tilde{y}_2^0)^2}} [\tilde{y}_1^0 + \tilde{y}_2^0 - \tilde{y}_1^+(1 + \tilde{y}_1^0 \tilde{y}_2^0)] \times \\ &\times \frac{\tilde{y}_1^+ [\tilde{y}_1^0(1 + (\tilde{y}_2^0)^2) - \tilde{y}_2^0(1 + (\tilde{y}_1^0)^2)]}{[1 + (\tilde{y}_1^0)^2 - 2\tilde{y}_1^0 \tilde{y}_1^+] \cdot [1 + (\tilde{y}_2^0)^2 - 2\tilde{y}_2^0 \tilde{y}_1^+]} + \mathcal{O}(1), \end{aligned} \quad (\text{B.51})$$

wobei $\tilde{\mathbf{H}}_{3,3}$ durch (B.39) gegeben ist.

B.3.3 Der allgemeine Fall

Die Übertragung der zu $r = 3$ angestellten Überlegungen zur Berechnung von $\det(\tilde{\Gamma} - \frac{2}{N}\mathbf{1})$ auf den allgemeinen Fall, d.h. beliebiges $r \geq 3$, ist nun problemlos möglich.

Im allgemeinen Fall liegen neben dem kritischen Paar (y_1, y_2) noch $r - 2$ nichtkritische Lösungen y_3, \dots, y_r vor. Hierfür werden die Matrixelemente $\tilde{\Gamma}_{i,j}$, $i = 1, \dots, r$, $j = 1, 2$, und $\tilde{H}_{i,j}$, $i = 1, \dots, r$, $j = 3, \dots, r$, sämtlich analog zum Fall $r = 3$ berechnet.

Für die Auswertung von $\det(\tilde{\Gamma} - \frac{2}{N}\mathbf{1})$ wird die Verallgemeinerung von (B.41) verwendet (MUIR, 1960):

$$\det\left(\tilde{\Gamma} - \frac{2}{N}\mathbf{1}\right) = \det \tilde{\Gamma} - \frac{2}{N} \sum_{i,j=1}^r (-1)^{i+j} \det \tilde{\Gamma}^{(i,j)}. \quad (\text{B.52})$$

Betrachtet man zunächst den Fall, daß es zu t nichtkritischen Lösungen ($t = 1, \dots, r - 2$) im Grenzwert $\Delta \rightarrow 0$ keine mit ihnen übereinstimmenden Grundzustandslösungen gibt, so verallgemeinern sich (B.42) und (B.44) zu:

$$\det \tilde{\Gamma} \sim \frac{1}{\varepsilon^2} \cdot \varepsilon^t \cdot (0 + \mathcal{O}(\varepsilon^2)) \sim \mathcal{O}(\varepsilon^t). \quad (\text{B.53})$$

Und für die Minoren findet man in Verallgemeinerung von (B.45) und (B.46):

$$\det \tilde{\Gamma}^{(i,j)} \sim \mathcal{O}(\varepsilon^{t-1}), \quad i, j = 1, \dots, r. \quad (\text{B.54})$$

Damit tragen sowohl $\tilde{\Gamma}$ als auch sämtliche Minoren wegen (B.18) nicht zu $\tilde{M}_\lambda^z(q)$ bei. In diesem Fall ist also $\tilde{M}_\lambda^z(q) = 0$. Ein nichtverschwindendes Matrixelement gibt es nur dann, wenn es $r - 2$ Grundzustandslösungen gibt, die für $\Delta \rightarrow 0$ mit den $r - 2$ nichtkritischen Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen für den angeregten Zustand übereinstimmen, d.h. (eventuell nach Ummumerierung):

$$\tilde{y}_3 = \tilde{y}_3^0, \tilde{y}_4 = \tilde{y}_4^0, \dots, \tilde{y}_r = \tilde{y}_r^0. \quad (\text{B.55})$$

Unter diesen Voraussetzungen führt eine analoge Rechnung zum Fall $r = 3$ zu folgender Verallgemeinerung von (B.51):

$$\begin{aligned} \det\left(\tilde{\Gamma} - \frac{2}{N}\mathbf{1}\right) &= \frac{4}{\varepsilon N^2} \left[\prod_{j=3}^r \tilde{H}_{j,j} \right] \frac{P_{12}(J_{12} + J_{12}^*)}{\sqrt{1 - (\tilde{y}_1^0)^2} \sqrt{1 - (\tilde{y}_2^0)^2}} [\tilde{y}_1^0 + \tilde{y}_2^0 - \tilde{y}_1^+ (1 + \tilde{y}_1^0 \tilde{y}_2^0)] \times \\ &\times \frac{\tilde{y}_1^+ [\tilde{y}_1^0 (1 + (\tilde{y}_2^0)^2) - \tilde{y}_2^0 (1 + (\tilde{y}_1^0)^2)]}{[1 + (\tilde{y}_1^0)^2 - 2\tilde{y}_1^0 \tilde{y}_1^+] \cdot [1 + (\tilde{y}_2^0)^2 - 2\tilde{y}_2^0 \tilde{y}_1^+]} + \mathcal{O}(1) \end{aligned} \quad (\text{B.56})$$

mit

$$\tilde{H}_{j,j} = \text{sgn}(1 - \tilde{y}_j^2) \cdot \left[\prod_{i=1}^2 \frac{\sqrt{1 - \tilde{y}_i^2}}{\sqrt{1 - (\tilde{y}_i^0)^2}} \frac{1 - \tilde{y}_i^0 \tilde{y}_j}{1 - \tilde{y}_i \tilde{y}_j} \right] + \mathcal{O}(\varepsilon), \quad (\text{B.57})$$

vgl. (B.39).

B.4 Zusammenführung der Einzelergebnisse

Führt man die in den Anhängen B.1 - B.3 hergeleiteten Einzelergebnisse für $\Delta \rightarrow 0$ in (B.1) zusammen, so hat man zunächst:

$$\tilde{M}_\lambda^z(q) \begin{cases} \neq 0 & : \exists \{I_i^0\}_{r-2} \subset \{I_i^0\}_r, \text{ so daß } \{I_i^0\}_{r-2} = \{I_3, I_4, \dots, I_r\}_{r-2}, \\ = 0 & : \text{sonst.} \end{cases} \quad (\text{B.58})$$

Im nichtverschwindenden Fall folgt dann für

$$\tilde{y}_3 = \tilde{y}_3^0, \tilde{y}_4 = \tilde{y}_4^0, \dots, \tilde{y}_r = \tilde{y}_r^0 \quad (\text{B.59})$$

ausgehend von (B.6), (B.16) und (B.56) sowie mit (4.82) - (4.85):

$$\begin{aligned} \tilde{M}_\lambda^z(q) &= \frac{16}{N^2(1 - \tilde{y}_1^0 \tilde{y}_2^0)^2} \left(\frac{\tilde{y}_1^+ \tilde{y}_1^- [\tilde{y}_1^0(1 + (\tilde{y}_2^0)^2) - \tilde{y}_2^0(1 + (\tilde{y}_1^0)^2)]}{[1 + (\tilde{y}_1^0)^2 - 2\tilde{y}_1^0 \tilde{y}_1^+] \cdot [1 + (\tilde{y}_2^0)^2 - 2\tilde{y}_2^0 \tilde{y}_1^+]} \right)^2 \times \\ &\quad \times \frac{[\tilde{y}_1^0 + \tilde{y}_2^0 - \tilde{y}_1^+(1 + \tilde{y}_1^0 \tilde{y}_2^0)]^2}{N [(\tilde{y}_1^-)^2(1 - \zeta_1) + (1 - \xi_1)^2] - 2 [(\tilde{y}_1^-)^2 + 1 - \xi_1]}. \end{aligned} \quad (\text{B.60})$$

Hierbei ist ξ_1 durch (3.30) und ζ_1 durch (B.17) gegeben.

Literatur

- BALCAR E. & LOVESEY S.W. 1989. *Theory of Magnetic Neutron and Photon Scattering*. Oxford series on Neutron Scattering in Condensed Matter 2. New York: Oxford University Press.
- BAXTER R.J. 1982. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. London: Academic Press.
- BETHE H. 1931. Zur Theorie der Metalle. I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette. *Z. Phys.*, **71**, 205.
- BIEGEL D. 2000. *Das eindimensionale Spin-1/2 XX-Modell als Grenzfall des XXZ-Modells*. Diplomarbeit, Bergische Universität Gesamthochschule Wuppertal.
- BIEGEL D., KARBACH M. & MÜLLER G. 2002. Transition rates via Bethe ansatz for the spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg chain. *Europhys. Lett.*, **59**, 882.
- BIEGEL D., KARBACH M., MÜLLER G. & WIELE K. 2003a. Spectrum and transition rates of the XX chain analyzed via Bethe ansatz. *cond-mat/0309247*.
- BIEGEL D., KARBACH M. & MÜLLER G. 2003b. Transition rates via Bethe ansatz for the spin- $\frac{1}{2}$ planar XXZ antiferromagnet. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **36**, 5361.
- BLOCH F. 1930. Zur Theorie des Ferromagnetismus. *Z. Phys.*, **61**, 206.
- BÖNI P. & FURRER A. 2000. Introduction to neutron scattering. *Page 1 of:* FURRER A. (ed), *Frontiers of Neutron Scattering*. Singapore: World Scientific.
- BOUGOURZI A.H., KARBACH M. & MÜLLER G. 1998. Exact two-spinon dynamic structure factor of the one-dimensional $S = 1/2$ Heisenberg-Ising antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, **57**, 11429.
- BROHOLM C., AEPPLI G., CHEN Y., DENDER D.C., ENDERLE M., HAMMAR P.R., HONDA Z., KATSUMATA K., LANDEE C.P., OSHIKAWA M., REGNAULT L.P., REICH D.H., SHAPIRO S.M., SIELING M., STONE M.B., TURNBULL M.M., ZALIZNYAK I. & ZHELUDEV A. 2002. Magnetized States of Quantum Spin Chains. *Pages 211–234 of:* BERTHIER C., LÉVY L.P. & MARTINEZ G. (eds), *High Magnetic Fields - applications in condensed matter physics and spectroscopy*. Springer Verlag.
- DAVIS P.J. 1975. *Interpolation and Approximation*. New York: Dover Publications.
- DEGUCHI T., FABRICIUS K. & MCCOY B.M. 2001. The sl_2 Loop Algebra Symmetry of the Six-Vertex Model at Roots of Unity. *J. Stat. Phys.*, **102**, 701.
- DENDER D.C., DAVIDOVIĆ D., REICH D.H., BROHOLM C., LEFMANN K. & AEPPLI G. 1996. Magnetic properties of a quasi-one-dimensional $S = 1/2$ antiferromagnet: Copper benzoate. *Phys. Rev. B*, **53**, 2583.
- DES CLOIZEAUX J. & GAUDIN M. 1966. Anisotropic Linear Magnetic Chain. *J. Math. Phys.*, **7**, 1384.
- DES CLOIZEAUX J. & PEARSON J.J. 1962. Spin-wave spectrum of the antiferromagnetic linear chain. *Phys. Rev.*, **128**, 2131.
- FABRICIUS K. & MCCOY B.M. 2001a. Bethe's Equation is Incomplete for the XXZ Model at Roots of Unity. *J. Stat. Phys.*, **103**, 647.
- FABRICIUS K. & MCCOY B.M. 2001b. Completing Bethe's Equation at Roots of Unity. *J. Stat. Phys.*, **104**, 573.
- FADDEEV L.D. 1995. Algebraic Aspects of Bethe-Ansatz. *Int. J. Mod. Phys. A*, **10**, 1845.
- FADDEEV L.D. 1996. How Algebraic Bethe Ansatz works for integrable model. *hep-th/9605187*.
- FADDEEV L.D. & TAKHTAJAN L.A. 1981. What is the spin of a spin wave? *Phys. Lett.*, **A85**, 375.

- FADDEEV L.D. & TAKHTAJAN L.A. 1984. Spectrum and scattering of excitations in the one-dimensional isotropic Heisenberg model. *J. Soviet. Math.*, **24**, 241.
- FADDEEV L.D. & TAKHTAJAN L.A. 1987. *Hamiltonian Methods in the Theory of Solitons*. Berlin: Springer-Verlag.
- FLEDDERJOHANN A., GERHARDT C., MÜTTER K.-H., SCHMITT A. & KARBACH M. 1996. Critical properties of the one-dimensional spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg model in the presence of a uniform field. *Phys. Rev. B*, **54**, 7168.
- GARDNER C.S., GREENE J.M., KRUSKAL M.D. & MIURA R.M. 1967. Method for Solving the Korteweg-de Vries equation. *Phys. Rev. Lett.*, **19**, 1095.
- GAUDIN M., MCCOY B.M. & WU T.T. 1981. Normalization sum for the Bethe's hypothesis of the Heisenberg-Ising chain. *Phys. Rev. D*, **23**, 417.
- HALDANE F.D.M. 1980. General Relation of Correlation Exponents and Special Properties of One-Dimensional Fermi Systems: Application to the Anisotropic $S = 1/2$ Heisenberg Chain. *Phys. Rev. Lett.*, **45**, 1358.
- HALDANE F.D.M. 1991. "Fractional Statistic" in Arbitrary Dimensions: A Generalization of the Pauli Principle. *Phys. Rev. Lett.*, **67**, 937.
- HAMMAR P.R., REICH D.H., BROHOLM C. & TROUW F. 1998. Spin gap in a quasi-one-dimensional $S=1/2$ antiferromagnet: $Cu_2(1,4\text{-diazacycloheptane})_2Cl_4$. *Phys. Rev. B*, **57**, 7846.
- HAMMAR P.R., STONE M.B., REICH D.H., BROHOLM C., GIBSON P.J., TURNBULL M.N., LANDEE C.P. & OSHIKAWA M. 1999. Characterization of a Quasi-One-Dimensional Spin-1/2 Magnet which is Gapless and Paramagnetic for $g\mu_B H \lesssim J$ and $k_B T \ll J$. *Phys. Rev. B*, **59**, 1008.
- HEISENBERG W. 1928. Zur Theorie des Ferromagnetismus. *Z. Phys.*, **49**, 619.
- HEITLER W. & LONDON F. 1927. Wechselwirkung neutraler Atome und homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik. *Z. Phys.*, **44**, 455.
- HULTHÉN L. 1938. Über das Austauschproblem eines Kristalles. *Arkiv Mat. Astron. Fysik*, **26A 11**, 1.
- IZERGIN A.G., KITANINE N., MAILLET J.M. & TERRAS V. 1999. Spontaneous magnetization of the XXZ Heisenberg spin-1/2 chain. *Nucl. Phys. B*, **554**, 679.
- JACKSON J.D. 1983. *Klassische Elektrodynamik*. Berlin, New York: Walter de Gruyter.
- JORDAN P. & WIGNER E. 1928. Über das Paulische Äquivalenzverbot. *Z. Phys.*, **47**, 631.
- KARBACH M. 1994. *Finite-Size Effekte im eindimensionalen Spin-1/2 XXZ -Modell*. Ph.D. thesis, Bergische Universität Gesamthochschule Wuppertal.
- KARBACH M. 2002. *Quantum fluctuations in spin chains: dynamical probes of collective excitations*. Bergische Universität Gesamthochschule Wuppertal.
- KARBACH M. & MÜLLER G. 1997. Introduction to the Bethe Ansatz I. *Comp. in Phys.*, **11**, 36.
- KARBACH M. & MÜLLER G. 2000. Lineshape predictions via Bethe ansatz for the one-dimensional spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet in a magnetic field. *Phys. Rev. B*, **62**, 14871.
- KARBACH M., MÜLLER G., BOUGOURZI A.H., FLEDDERJOHANN A. & MÜTTER K.-H. 1997. Two-spinon dynamic structure factor of the one-dimensional $s = 1/2$ Heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, **55**, 12510.
- KARBACH M., HU K. & MÜLLER G. 1998. Introduction to the Bethe ansatz II. *Comp. in Phys.*, **12**, 565.

- KARBACH M., HU K. & MÜLLER G. 2000. Introduction to the Bethe ansatz III. *cond-mat/0008018*.
- KARBACH M., BIEGEL D. & MÜLLER G. 2002. Quasiparticles governing the zero-temperature dynamics of the 1D spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet in a magnetic field. *Phys. Rev. B*, **66**, 054405.
- KATSURA S., HORIGUCHI T. & SUZUKI M. 1970. Dynamical properties of the isotropic XY model. *Physica*, **46**, 67.
- KITANINE N., MAILLET J. M. & TERRAS V. 1999. Form factors of the XXZ Heisenberg spin-1/2 finite chain. *Nucl. Phys. B*, **554**, 647.
- KLÜMPER A. 1993. Thermodynamics of the anisotropic spin-1/2 Heisenberg chain and related quantum chains. *Z. Phys. B*, **91**, 507.
- KOREPIN V. E. 1982. Calculation of Norms of Bethe Wave Functions. *Commun. Math. Phys.*, **86**, 391.
- KOREPIN V.E., BOGOLIUBOV N.M. & IZERGIN A.G. 1993. *Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions*. Cambridge: Cambridge University Press.
- LEFMANN K. & RISCHEL C. 1996. Dynamical correlation functions of the spin-1/2 nearest-neighbour and Haldane-Shastry antiferromagnetic chains in zero and applied fields. *Phys. Rev. B*, **54**, 6340.
- LIEB E., SCHULZ T. & MATTIS D. 1961. Two Soluble Models of an Antiferromagnetic Chain. *Ann. Phys.*, **16**, 407.
- LOVESEY S.W. 1987. *Theory of Neutron Scattering from Condensed Matter*. International Series of Monographs on Physics. New York: Oxford University Press.
- LUTHER A. & PESCHEL I. 1975. Calculation of critical exponents in two dimensions from quantum field theory in one dimension. *Phys. Rev. B*, **12**, 3908.
- MAILLET J.M. & DE SANTOS J. SANCHEZ. 1996. Drinfel'd Twists and Algebraic Bethe Ansatz. *q-alg/9612012*.
- MATTIS D.C. 1981. *The Theory of Magnetism I. Statics and Dynamics*. Springer Series in Solid-State sciences. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag.
- MUIR T. 1960. *A Treatise on the Theory of Determinants*. New York: Dover Publications.
- MÜLLER G. & KARBACH M. 2000. Computational Probes of Collective Excitations in Low-dimensional Magnetism. *Page 168 of:* FURRER A. (ed), *Frontiers of Neutron Scattering*. Singapore: World Scientific.
- MÜLLER G., THOMAS H., BECK H. & BONNER J.C. 1981. Quantum spin dynamics of the antiferromagnetic linear chain in zero and nonzero magnetic field. *Phys. Rev. B*, **24**, 1429.
- NAGLER S.E., TENNANT D.A., COWLEY R.A., PERRING T.G. & SATIJA S.K. 1991. Spin dynamics in the quantum antiferromagnetic chain compound KCuF₃. *Phys. Rev. B*, **44**, 12361.
- NIEMEIJER T. 1967. Some exact calculations on a chain of spin 1/2. *Physica*, **36**, 377.
- ORBACH R. 1958. Linear antiferromagnetic chain with anisotropic coupling. *Phys. Rev.*, **112**, 309.
- SKLYANIN E.K. 1982. Quantum version of the method of inverse scattering problem. *J. Soviet. Math.*, **19**, 1546.
- SKLYANIN E.K. & FADDEEV L.D. 1978. Quantum-mechanical approach to completely integrable field theory models. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, **243**, 1430.

- SKLYANIN E.K., TAKHTADZHIAN L.A. & FADDEEV L.D. 1979. Quantum Inverse Problem Method. I. *Teor. Mat. Fizika*, **40**, 194.
- SLAVNOV N.A. 1989. Calculation of Scalar Products of Wave Functions and Form Factors in the Framework of the Algebraic Bethe Ansatz. *Teor. Mat. Fizika*, **79**, 232.
- SQUIRES G.L. 1978. *Introduction to the Theory of Thermal Neutron Scattering*. Cambridge, London, New York, Melbourne: Cambridge University Press.
- STONE M.B., REICH D.H., BROHOLM C., LEFMANN K., RISCHEL C., LANDEE C.P. & TURNBULL M.M. 2003. Extended quantum critical phase in a magnetized spin-1/2 antiferromagnetic chain. *Phys. Rev. Lett.*, **91**, 037205.
- TAKAHASHI M. 1971. One-Dimensional Heisenberg Model at Finite Temperature. *Prog. Theor. Phys.*, **46**, 401.
- TAKAHASHI M. 1999. *Thermodynamics of one-dimensional Solvable Models*. Cambridge, United Kingdom: Cambridge University Press.
- TAKAHASHI M., SHIROISHI M. & KLÜMPER A. 2001. Equivalence of TBA and QTM. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **34**, L187.
- TAKHTADZHAN L.A. & FADDEEV L.D. 1979. The quantum method of the inverse problem and the Heisenberg XYZ model. *Russian Math. Surveys*, **34:5**, 11.
- TENNANT D.A., PERRING T.G., COWLEY R.A. & NAGLER S.E. 1993. Unbound Spinons in the $S=1/2$ Antiferromagnetic Chain KCuF_3 . *Phys. Rev. Lett.*, **70**, 4003.
- TENNANT D.A., NAGLER S.E., WELZ D., SHIRANE G. & YAMADA K. 1995a. Effects of coupling between chains on the magnetic excitation spectrum of KCuF_3 . *Phys. Rev. B*, **52**, 13381.
- TENNANT D.A., COWLEY R.A., NAGLER S.E. & TSVELIK A.M. 1995b. Measurement of the spin-excitation continuum in one-dimensional KCuF_3 using neutron scattering. *Phys. Rev. B*, **52**, 13368.
- TENNANT D.A., BROHOLM C., REICH D.H., NAGLER S.E., GRANROTH G.E., BARNES T., DAMLE K., XU G., CHEN Y. & SALES B.C. 2003. Neutron scattering study of two-magnon states in the quantum magnet copper nitrate. *Phys. Rev. B*, **67**, 054414.
- WIELE K. 2004. *Diplomarbeit*. work in progress.
- WOYNAROVICH F. 1982. On the $S^z=0$ excited states of an anisotropic Heisenberg chain. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **15**, 2985.
- YAMADA T. 1969. Fermi-liquid theory of linear antiferromagnetic chains. *Prog. Theor. Phys.*, **41**, 880.
- YANG C.N. & YANG C.P. 1966. One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin Interactions. I. Proof of Bethe's Hypothesis for Ground State in a Finite System. *Phys. Rev.*, **150**, 321.
- YOSIDA K. 1996. *Theory of Magnetism*. Springer Series in Solid-State sciences. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag.

Im Rahmen der Promotion sind folgende Veröffentlichungen entstanden:

KARBACH M., BIEGEL D. & MÜLLER G. 2002. *Phys. Rev. B*, **66**, 054405.

BIEGEL D., KARBACH M. & MÜLLER G. 2002. *Europhys. Lett.*, **59**, 882.

BIEGEL D., KARBACH M., MÜLLER G. & WIELE K. 2003a. *cond-mat/0309247*.

BIEGEL D., KARBACH M. & MÜLLER G. 2003b. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **36**, 5361.

Danksagung

Herrn Dr. M. Karbach danke ich für viele Ideen und Anregungen, sein stetes Interesse an meiner Arbeit sowie die hervorragende Zusammenarbeit.

Herrn Prof. Dr. K.-H. Mütter danke ich für sein fortwährendes Interesse an meiner Arbeit und für die Möglichkeit, meine Promotion innerhalb seiner Arbeitsgruppe durchführen zu können.

Herrn Dr. A. Fledderjohann danke ich für die Bereitstellung von Vergleichsdaten zu den Übergangsmatrixelementen und für zahlreiche interessante und hilfreiche Diskussionen.

Allen meinen Kollegen und Mitarbeitern in den Arbeitsgruppen von Herrn Prof. Dr. K.-H. Mütter und Herrn Prof. Dr. A. Klümper danke ich für zahlreiche nützliche Diskussionen und Anregungen.

Der DFG danke ich für die finanzielle Unterstützung aus dem Schwerpunkt 1073 „Kollektive Quantenzustände in elektronischen 1D Übergangsmetallverbindungen“.

Der Studienstiftung des deutschen Volkes und insbesondere ihrem Vertrauensdozenten in Wuppertal, Herrn Prof. Dr. Dr. D. Vieweger, gilt mein Dank für ihre ideelle und materielle Unterstützung während meines Studiums und der Zeit danach.

Mein besonderer Dank gilt meiner Lebensgefährtin Daniela für ihre liebevolle Unterstützung. Ebenso danke ich insbesondere meinen Eltern für ihre fortwährende Unterstützung während meiner gesamten Ausbildung.