

Exakte Diagonalisierung für das Drude-Gewicht der Spin-1/2 Heisenbergkette

Exact diagonalization study of the Drude weight
in the spin-1/2 Heisenberg chain

Bachelorarbeit

Ludwig-Maximilians-Universität
München

Lehrstuhl Prof. Dr. Ulrich Schollwöck

Eingereicht von: Johannes Hauschild
Eingereicht am: 6. Juli 2012

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Theoretische Grundlagen	5
2.1	Physikalisches Modell der Spin-1/2- XXZ -Kette	5
2.2	Jordan-Wigner-Transformation	6
2.3	Lineare-Antwort-Theorie	8
3	Implementierung der exakten Diagonalisierung	15
3.1	Eigenbasis von S^z und Spininversion	18
3.2	Impulseigenzustände	19
4	Test des Programms	20
4.1	Freie Fermionen	21
4.2	Wärmekapazität	22
4.3	Drude-Gewicht für freie Fermionen	24
5	Ergebnisse	26
5.1	Hochtemperaturgrenzfall	26
5.2	Extrapolation auf $N = \infty$	30
5.3	Vergleich großkanonisch – kanonisch	32
5.4	Anteil des Drude-Gewichts an der Gesamtleitfähigkeit	38
6	Zusammenfassung	40
A	Literatur	42
B	Abbildungsverzeichnis	44

1 Einleitung

Das Heisenberg-Modell ist ein Modell zur Beschreibung des Magnetismus in Festkörpern. Es beschreibt Spins an festen Gitterplätzen, die jeweils mit ihren nächsten Nachbarn wechselwirken. In dieser Arbeit wird das anisotrope, eindimensionale Heisenberg-Modell mit Spin-1/2 betrachtet, die sog. XXZ -Kette. Eine genauere Beschreibung des Modells wird in Abschnitt 2.1 gegeben. Es gibt Materialien, die derartige Spinketten realisieren. Beispiele für (quasi) eindimensionale Ketten sind Sr_2CuO_3 und SrCuO_2 (vgl. [1] und Referenzen darin).

Die Frage, ob und unter welchen Bedingungen in der XXZ -Kette „ballistischer“ Transport auftritt, ist Thema vieler Abhandlungen (vgl. [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]). Transport wird als ballistisch bezeichnet, wenn ein einmal entstandener Strom bestehen bleibt und nicht mit der Zeit abklingt: Die Strom-Strom-Korrelationsfunktion $\langle\{j(t), j(0)\}\rangle$ konvergiert im Limes $t \rightarrow \infty$ gegen einen nicht verschwindenden Wert (vgl. [1]). Dieser Grenzwert wird als Drude-Gewicht D bezeichnet.

Das Drude-Gewicht kann über die Leitfähigkeit σ charakterisiert werden: Es ist der Anteil der Leitfähigkeit bei der Frequenz $\omega = 0$, der vor einer Dirac-Funktion steht:

$$\text{Re } \sigma(\omega) = D \delta(\omega) + \sigma^{\text{reg.}}(\omega) \quad (1.1)$$

Der Term $\sigma^{\text{reg.}}(\omega)$ steht dabei für eine bei $\omega = 0$ reguläre (d.h. nicht divergierende) Funktion. Wenn das Drude-Gewicht $D \neq 0$ ist, bedeutet dies, dass die Gleichstrom-Leitfähigkeit „unendlich“ ist, der Widerstand also verschwindet.

In dieser Arbeit soll das Drude-Gewicht des Spintransports¹ in der XXZ -Kette untersucht werden. Dies geschieht numerisch mit der Methode der exakten Diagonalisierung. Es wird die Temperaturabhängigkeit und das Hochtemperaturverhalten des Drude-Gewichts betrachtet. Dies reproduziert Teilergebnisse von [2, 3]. Zusätzlich wird in dieser Arbeit auch auf unendliche Kettenlänge extrapoliert.

Im Gegensatz zu [2, 3] wird in [4] das Drude-Gewicht „kanonisch“² berechnet. In dieser Arbeit werden die Ergebnisse von „kanonischer“ und „großkanonischer“ Rechnung verglichen. Zuletzt wird noch der Anteil des Drude-Gewichts an der gesamten Leitfähigkeit $\int \text{Re } \sigma(\omega) d\omega$ betrachtet.

Im Folgenden soll noch ein kurzer Überblick über die Gliederung der Arbeit gegeben werden. In Abschnitt 2.1 und 2.2 wird das Modell der XXZ -Kette und die äquivalente Beschreibung als spinlose Fermionen durch die Jordan-Wigner-Transformation beschrieben. In Abschnitt 2.3 werden Ausdrücke zur numerischen Berechnung des Drude-Gewichts auf der Grundlage der Linearen-Antwort-Theorie hergeleitet. Abschnitt 3 gibt eine kurze Einführung in die Methode der exakten Diagonalisierung und beschreibt,

¹Mit dem Begriff „Drude-Gewicht“ ist im Folgendem das Drude-Gewicht des Spintransports gemeint, andere Transportprozesse werden nicht weiter betrachtet.

²Die Begriffe „kanonisch“ bzw. „großkanonisch“ sind im Sinne des Fermionenmodells gemäß der Jordan-Wigner-Transformation (Abschnitt 2.2) zu verstehen, im Fall der Spinkette steht „kanonisch“ für eine Rechnung, bei der nur der Eigenraum des S^z -Operators mit minimalem Betrag des Eigenwertes betrachtet wird.

wie diese im Programm implementiert werden kann. In Abschnitt 4 werden Methoden beschrieben, wie das Programm getestet werden kann; insbesondere wird auf den analytisch lösbaren Spezialfall der freien Fermionen eingegangen. Die Ergebnisse der numerischen Berechnung werden in Abschnitt 5 dargestellt und in Abschnitt 6 noch einmal kurz zusammengefasst.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Physikalisches Modell der Spin-1/2- XXZ - Kette

In dieser Arbeit wird die Spin-1/2- XXZ - Kette als Abwandlung des Heisenbergmodells betrachtet. Das Heisenbergmodell beschreibt die Wechselwirkung zwischen benachbarten Spins an fest lokalisierten Plätzen in einem Gitter. In dieser Arbeit wird nur der eindimensionale Fall – also eine Kette – mit Spinquantenzahl $\frac{1}{2}$ behandelt. Die Länge der Kette wird mit N bezeichnet. Der Eigenwert des Spinoperators S_i^z am Gitterplatz i kann nur die Werte $\pm\frac{1}{2}$ annehmen¹, die Eigenzustände dazu seien $|\uparrow_i\rangle$ und $|\downarrow_i\rangle$. Ein allgemeiner Zustand dieses Spins kann als (komplexe) Superposition der beiden Eigenzustände geschrieben werden.

Eine Basis des Hilbertraums für die Spinkette erhält man, indem alle möglichen Kombinationen von Eigenzuständen der $S_i^z, i = 1, \dots, N$ als Basiszustände verwendet werden:

$$\{|S_1^z S_2^z \cdots S_N^z\rangle \text{ mit } S_i^z \in \{\uparrow, \downarrow\}, i = 1, \dots, N\} \quad (2.1)$$

Es werden nur periodische Randbedingungen betrachtet, es wird also $\vec{S}_{i+N} = \vec{S}_i$ gesetzt. Dies entspricht einem „Zusammenfügen“ der beiden Kettenenden, sodass ein Ring entsteht. Für die XXZ - Kette wird in z -Richtung der sog. Anisotropieparameter Δ eingeführt. Der Hamiltonoperator nimmt folgende Form an:

$$\mathcal{H} = J \sum_{i=1}^N (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z) \quad (2.2)$$

$$= J \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_{i+1}^+ S_i^-) + \Delta S_i^z S_{i+1}^z \right) \quad (2.3)$$

$$= \sum_{i=1}^N h_i \text{ mit } h_i = \frac{J}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_{i+1}^+ S_i^-) + J\Delta S_i^z S_{i+1}^z \quad (2.4)$$

Der Parameter J beschreibt die Kopplungsstärke und wird als positiv angenommen. Für $\Delta = \pm 1$ ist das Modell isotrop. An diesen zwei Punkten findet ein Phasenübergang statt: Für $\Delta < -1$ ist das Modell im Grundzustand in der ferromagnetischen Phase, für $\Delta > 1$ ist der Grundzustand in der antiferromagnetischen Phase. Für $|\Delta| \leq 1$ ergibt sich eine bandlückenlose Phase (vgl. [1]).

¹In dieser Arbeit werden natürliche Einheiten verwendet und $\hbar = c = k_B = 1$ gesetzt.

Für Gl. (2.3) wurde die Definition $S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y$ verwendet. Die Spinoperatoren S_i^\pm lassen sich darstellen als

$$S_i^+ = S_i^x + iS_i^y = |\uparrow_i\rangle \langle \downarrow_i| \quad S_i^- = S_i^x - iS_i^y = |\downarrow_i\rangle \langle \uparrow_i|. \quad (2.5)$$

Die Kommutatorrelationen für die Spinoperatoren lauten

$$[S_i^\alpha, S_j^\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \delta_{ij} S_i^\gamma \text{ für } \alpha, \beta, \gamma \in \{x, y, z\} \Rightarrow [S_i^\pm, S_j^z] = \mp \delta_{ij} S_i^\pm. \quad (2.6)$$

Aus diesen Kommutatorrelationen folgt sofort, dass der Gesamtspin in z -Richtung $S^z = \sum_{i=1}^N S_i^z$ erhalten ist, da er mit dem Hamiltonoperator kommutiert.

Aufgrund dieser Erhaltung kann man den Spinstrom j^S über die diskrete Kontinuitätsgleichung definieren. Dies soll im Folgenden kurz dargestellt werden.

Die lokale Spindichte ist durch den Operator S_i^z gegeben. Im Heisenbergbild ist die Zeitentwicklung eines Operators A gegeben durch $i\frac{\partial}{\partial t}A = [A, \mathcal{H}]$. Also gilt, da h_j nur Spinoperatoren mit den Indizes j und $j+1$ enthält:

$$\frac{\partial}{\partial t} S_i^z = i[H, S_i^z] = i \sum_{j=1}^N [h_j, S_i^z] = \quad (2.7)$$

$$= i[h_{i-1}, S_i^z] + i[h_i, S_i^z] \quad (2.8)$$

Mit Hilfe der Kommutatorrelationen aus Gl. (2.6) erhält man

$$[h_{i-1}, S_i^z] = \frac{J}{2} (S_i^+ S_{i-1}^- - S_{i-1}^+ S_i^-) = -[h_{i-1}, S_{i-1}^z]. \quad (2.9)$$

Die Definition des Spinstroms als

$$j_i^S := i[h_{j-1}, S_i^z] = i\frac{J}{2} (S_i^+ S_{i-1}^- - S_{i-1}^+ S_i^-); \quad j^S := \sum_{i=1}^N j_i^S \quad (2.10)$$

löst somit die gesuchte (diskrete) Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} S_i^z + (j_{i+1}^S - j_i^S) = \frac{\partial}{\partial t} S_i^z + \nabla^{\text{diskr.}} j_i^S = 0. \quad (2.11)$$

2.2 Jordan-Wigner-Transformation

Die Eigenwerte der S_i^z Operatoren können zwei Werte annehmen. Dadurch entsteht eine Analogie zu einer Kette mit festen Plätzen für spinlose Fermionen.

Nach dem Pauli-Prinzip dürfen Fermionen nicht in allen Quantenzahlen übereinstimmen, weshalb jeder Platz i auf der Kette nur mit entweder einem ($|1_i\rangle$) oder mit keinem ($|0_i\rangle$) Fermion besetzt werden kann. Der S_i^z Operator entspricht also – bis auf eine Verschiebung um den konstanten Faktor $\frac{1}{2}$ – dem Teilchenzahloperator n_i aus der zweiten Quantisierung.

Die Basis für die Fermionen-Kette kann also völlig analog zu Gl. (2.1) angegeben werden als

$$\{|n_1 n_2 \cdots n_N\rangle \text{ mit } n_i \in \{0, 1\}, i = 1, \dots, N\}. \quad (2.12)$$

Den Operatoren S_i^\pm entsprechen die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Fermionen am Platz i , deren Wirkung völlig analog zu Gl. (2.5) ist (s. [9],[10]):

$$c_i^\dagger |0_i\rangle = |1_i\rangle \quad c_i^\dagger |1_i\rangle = 0 \quad (2.13)$$

$$c_i |0_i\rangle = 0 \quad c_i |1_i\rangle = |0_i\rangle \quad (2.14)$$

Damit kann der Teilchenzahloperator als $n_i = c_i^\dagger c_i$ ausgedrückt werden.

Bei den Vertauschungsrelationen bricht diese simple Analogie allerdings. Denn die Spins kommutieren auf verschiedenen Plätzen, während die Fermionen antikommutieren:

$$\{c_i^\dagger, c_j\} = \delta_{ij} \quad \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0 = \{c_i, c_j\} \quad (2.15)$$

$$\{S_i^+, S_i^-\} = 1, \text{ aber } [S_i^+, S_{j \neq i}^-] = 0 \quad [S_i^+, S_j^+] = 0 = [S_i^-, S_j^-] \quad (2.16)$$

Für den eindimensionalen Fall, der in dieser Arbeit betrachtet wird, kann jedoch auch dieses Problem umgangen werden, wie bereits 1928 von Jordan und Wigner gezeigt wurde (s. [11]). Dazu werden die Operatoren c_i^\dagger und daraus c_i und n_i definiert und gezeigt, dass sie die gleichen Relationen wie der Erzeugungs-, Vernichtungs- und Teilchenzahloperator der Fermionen erfüllen.

Die entscheidende Idee besteht darin, eine komplexe Phase Φ_i einzuführen, die von der Position abhängt:

$$c_i := e^{i\Phi_i} S_i^- \text{ mit } \Phi_i = \pi \sum_{j=1}^{i-1} S_j^+ S_j^- \quad (2.17)$$

Da die Spins auf verschiedenen Plätzen kommutieren, folgt sofort

$$c_i^\dagger = S_i^+ e^{-i\Phi_i} = e^{-i\Phi_i} S_i^+ \text{ und} \quad (2.18)$$

$$n_i := c_i^\dagger c_i = S_i^+ S_i^- = S_i^x S_i^x + S_i^y S_i^y + i [S_i^y, S_i^x] \quad (2.19)$$

$$= \vec{S}_i \cdot \vec{S}_i - S_i^z S_i^z + S_i^z = \frac{1}{2} + S_i^z. \quad (2.20)$$

Für die Antikommutatorrelationen ergibt sich

$$\{c_i, c_i^\dagger\} = e^{-i\Phi_i} e^{i\Phi_i} \{S_i^-, S_i^+\} = 1. \quad (2.21)$$

Für $i > j$ ergibt sich

$$\{c_i, c_j^\dagger\} = e^{i(\Phi_i - \Phi_j)} (S_i^- S_j^+ + e^{-i\pi n_j} S_j^+ e^{i\pi n_j} S_i^-) \quad (2.22)$$

$$= e^{i(\Phi_i - \Phi_j)} (S_i^- S_j^+ + e^{-i\pi} S_j^+ e^{i\pi} S_i^-) = 0. \quad (2.23)$$

Dabei wurde verwendet, dass gemäß Gl. (2.5) vor (bzw. nach) Anwendung von S_j^+ der Eigenwert von n_j gleich 1 (bzw. 0) ist. Durch das Einführen der komplexen Phase ist der letzte Term negativ geworden, so dass der Antikommutator verschwindet. Der Fall $i < j$ ist mit Hilfe von $\{c_i, c_j^\dagger\}^\dagger = \{c_j, c_i^\dagger\}$ abgedeckt. Unter Verwendung von $S_i^- S_i^- = 0$ nach Gl. (2.5) ergibt sich $\{c_i, c_i\} = 0$. Die Relation $\{c_i, c_j\} = 0$ lässt sich analog zu Gl. (2.22) zeigen; da der Antikommutator symmetrisch ist, ist o.E. $i > j$. Durch die Gleichung $\{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = \{c_i, c_j\}^\dagger$ sind die Relationen aus Gl. (2.15) vollständig gezeigt. Mit Hilfe der Relationen (2.17) – (2.20) lässt sich der Hamiltonoperator aus Gl. (2.4) schreiben als

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{J}{2} (c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i) + J\Delta \left(n_i - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i+1} - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (2.24)$$

2.3 Lineare-Antwort-Theorie

Wie der Name schon andeutet, beschreibt die Lineare-Antwort-Theorie die Reaktion eines Systems auf eine äußere Störung. Dies geschieht unter der Annahme, dass die Störung sehr klein ist, so dass Terme, deren Ordnung in der Störung quadratisch oder höher ist, vernachlässigt werden können. Mit Hilfe dieser Theorie soll im Folgenden eine Formel für das Drude-Gewicht hergeleitet werden. Diese Darstellung ist an [10] angelehnt.

Als Reaktion auf das Anlegen eines Gradienten im Magnetfeld ∇h^M wird von der Spinkette ein Spinstrom J^S erwartet, der linear zum Gradienten des Magnetfeldes ist:

$$J^S = \sigma \nabla h^M \quad (2.25)$$

Dabei ist J^S der Erwartungswert der Stromdichte j_i^S und damit die im Experiment gemessene Größe. ∇h^M sei unabhängig vom Gitterplatz i . Die Proportionalitätskonstante σ ist per Definition die Leitfähigkeit.

Der Gradient im Magnetfeld wird als Störung betrachtet. Die Störung soll langsam angeschaltet werden. Dies wird durch einen Faktor e^{st} , $s > 0$ sichergestellt, sodass für $t \rightarrow -\infty$ das System ungestört ist. Am Schluss muss der Limes $s \rightarrow 0$ genommen werden, so dass die Störung sehr langsam angeschaltet wird. Der gestörte Hamiltonoperator hat dann einen zusätzliche Term \mathcal{H}' :

$$\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} + \mathcal{H}' \quad \text{mit} \quad \mathcal{H}' = -e^{st} \sum_{i=1}^N S_i^z h_i^M =: e^{st} F. \quad (2.26)$$

Aufgrund dieser Störung addiert sich auch zur Dichtematrix ein Term, von dem angenommen wird, dass er proportional zur Störung \mathcal{H}' ist und somit auch den Faktor e^{st} enthält. Zur Unterscheidung wird die Dichtematrix des ungestörten Systems ρ_0 genannt:

$$\rho = \rho_0 + e^{st} f =: \rho_0 + \rho' \quad (2.27)$$

Die ungestörte Dichtematrix ist $\rho_0 = e^{-\beta\mathcal{H}}/Z$, wobei $\beta = 1/T$ das Inverse der Temperatur und $Z = \text{Tr}[\rho_0]$ die Zustandssumme ist. Nun muss also ρ' berechnet werden, so dass der Erwartungswert von j_i^S als $\langle j_i^S \rangle = \text{Tr}[\rho j_i^S]$ berechnet werden kann.

Die von-Neumann-Gleichung für den Dichteoperator lautet

$$i \frac{d}{dt} \rho = [\mathcal{H} + \mathcal{H}', \rho]. \quad (2.28)$$

Da ρ_0 zeitunabhängig ist, vereinfacht sich dies zu

$$i \frac{d}{dt} \rho' = \underbrace{[\mathcal{H}, \rho_0]}_{=0} + [\mathcal{H}, \rho'] + [\mathcal{H}', \rho_0] + [\mathcal{H}', \rho']. \quad (2.29)$$

Oben wurde angenommen, dass ρ' proportional zu \mathcal{H}' ist, deshalb ist der letzte Kommutator aus dieser Gleichung $\mathcal{O}(\mathcal{H}'^2)$ und wird vernachlässigt. Umstellen ergibt:

$$[\mathcal{H}', \rho_0] = i \frac{d}{dt} \rho' - [\mathcal{H}, \rho'] \quad (2.30)$$

$$= e^{-i\mathcal{H}t} \left(i \frac{d}{dt} (e^{i\mathcal{H}t} \rho' e^{-i\mathcal{H}t}) \right) e^{i\mathcal{H}t} \quad (2.31)$$

$$i \frac{d}{dt} (e^{i\mathcal{H}t} \rho' e^{-i\mathcal{H}t}) = e^{i\mathcal{H}t} [\mathcal{H}', \rho_0] e^{-i\mathcal{H}t} \quad (2.32)$$

$$= e^{st} [F(t), \rho_0] \text{ mit } F(t) := e^{i\mathcal{H}t} \mathcal{H}' e^{-i\mathcal{H}t} \quad (2.33)$$

Diese Differentialgleichung kann formal durch Integration gelöst werden. Da für $t \rightarrow -\infty$ die Störung ausgeschaltet war, gilt $\lim_{t \rightarrow -\infty} \rho' = 0$. Somit ergibt sich

$$\rho' = -i e^{-i\mathcal{H}t} \int_{-\infty}^t dt' e^{st} [F(t'), \rho_0] e^{i\mathcal{H}t'}. \quad (2.34)$$

Mit der Definition $\rho' = e^{st} f$ aus Gl. (2.27) und der Definition von $F(t)$ aus Gl. (2.33) folgt

$$f = -i \int_{-\infty}^t dt' e^{s(t'-t)} [F(t'-t), \rho_0]. \quad (2.35)$$

Dieses Integral hängt nur von der Differenz $t' - t$ ab. Durch Substitution von $t' - t = -t''$ und danach Umbenennen von t'' in t erhält man

$$f = -i \int_0^{\infty} dt e^{-st} [F(-t), \rho_0]. \quad (2.36)$$

Um später die Kontinuitätsgleichung verwenden zu können, ist nun folgende Umformung nötig:

$$[F(-t), \rho_0] = i \rho_0 \int_0^{\beta} d\beta' \frac{\partial}{\partial t} F(-t - i\beta') \quad (2.37)$$

Denn nach der Kettenregel und dem Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung gilt:

$$\int_0^\beta d\beta' \frac{\partial}{\partial t} F(-t - i\beta') = -i \int_0^\beta d\beta' \frac{\partial}{\partial \beta'} F(-t - i\beta') = -i (F(-t - i\beta) - F(-t)) \quad (2.38)$$

Multiplikation mit $i\rho_0 = iZ^{-1}e^{-\beta\mathcal{H}}$ und Verwendung der Definition von $F(t)$ aus Gl. (2.33) ergibt die Gleichung:

$$i\rho_0 \int_0^\beta d\beta' \frac{\partial}{\partial t} F(-t - i\beta') = \rho_0 (F(-t - i\beta) - F(-t)) \quad (2.39)$$

$$= Z^{-1}e^{-\beta\mathcal{H}} (e^{\beta\mathcal{H}}F(-t)e^{-\beta\mathcal{H}} - F(-t)) \quad (2.40)$$

$$= [F(-t), \rho_0] \quad (2.41)$$

Der Erwartungswert der Stromdichte am Gitterplatz i ist gegeben durch

$$\langle j_i^S \rangle = \text{Tr} [\rho_0 j_i^S] + \text{Tr} [\rho' j_i^S]. \quad (2.42)$$

Da im ungestörten System kein Strom fließt, verschwindet die erste Spur. Somit ergibt sich durch Einsetzen von Gl. (2.36) und Gl. (2.37):

$$\langle j_i^S \rangle = -ie^{st} \int_0^\infty dt' e^{-st'} \text{Tr} [[F(-t'), \rho_0] j_i^S] \quad (2.43)$$

$$= e^{st} \int_0^\infty dt' e^{-st'} \int_0^\beta d\beta' \text{Tr} \left[\rho_0 \frac{\partial F(-t' - i\beta')}{\partial t'} j_i^S \right] \quad (2.44)$$

Da das Magnetfeld h_i^M in Gl. (2.26) zeitunabhängig ist, ist die zeitliche Entwicklung von F durch die Änderung der lokalen Spindichte S_i^z gegeben. Mit der Kontinuitätsgleichung (2.11) folgt:

$$F(-t) = - \sum_{i=1}^N S_i^z(-t) h_i^M \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} F(-t) = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial t} S_i^z(-t) h_i^M \quad (2.46)$$

$$= - \sum_{i=1}^N (j_{i+1}^S(-t) - j_i^S(-t)) h_i^M \quad (2.47)$$

$$= \sum_{i=1}^N j_i^S(-t) \underbrace{(h_i^M - h_{i-1}^M)}_{\nabla^{\text{diskr.}} h_{i-1}^M} \quad (2.48)$$

Der letzte Schritt entspricht dabei der diskreten Version der partiellen Integration und ist nur möglich aufgrund der periodischen Randbedingungen. Nach Voraussetzung ist

$\nabla^{\text{diskr.}} h^M$ unabhängig vom Gitterplatz i . Einsetzen in Gl. (2.44) ergibt:

$$J^S = e^{st} \int_0^\infty dt' e^{-st'} \int_0^\beta d\beta' \text{Tr} \left[\rho_0 \sum_{j=1}^N j_j^S(-t' - i\beta') \nabla^{\text{diskr.}} h^M j_i^S \right] \quad (2.49)$$

Diese Gleichung hängt formal noch vom Kettenindex i ab. Dies wird vermieden, indem über i summiert und durch die Kettenlänge N geteilt wird. Mit $j^S = \sum_{i=1}^N j_i^S$ ergibt sich:

$$J^S = \frac{e^{st}}{N} \int_0^\infty dt' e^{-st'} \int_0^\beta d\beta' \text{Tr} \left[\rho_0 \sum_{j=1}^N j_j^S(-t' - i\beta') \nabla^{\text{diskr.}} h^M \sum_{i=1}^N j_i^S \right] \quad (2.50)$$

$$= \frac{e^{st}}{N} \int_0^\infty dt' e^{-st'} \int_0^\beta d\beta' \text{Tr} [\rho_0 j^S(-t' - i\beta') \nabla^{\text{diskr.}} h^M j^S] \quad (2.51)$$

Da das Magnetfeld kein Operator ist, kann es aus der Spur und den Integralen gezogen werden. Da das Magnetfeld langsam angeschaltet wird, muss auch in Gl. (2.25) diese Zeitabhängigkeit auftauchen, so dass $J^S = \sigma e^{st} \nabla^{\text{diskr.}} h^M$ gilt. Damit lässt sich die Leitfähigkeit ablesen als

$$\sigma = \frac{1}{N} \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \text{Tr} [\rho_0 j^S(-t - i\beta') j^S] \quad (2.52)$$

$$= \frac{1}{N} \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \langle j^S(-t - i\beta') j^S \rangle. \quad (2.53)$$

Gl. (2.53) ist die sog. Kubo-Formel für Gleichstrom. Für Wechselstrom lautet die Kubo-Formel (s. [10])

$$\sigma(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\omega N} \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \langle [j^{S\dagger}(\mathbf{q}, t), j^S(\mathbf{q}, 0)] \rangle. \quad (2.54)$$

Dabei ist \mathbf{q} der Wellenvektor des angelegten „Feldes“, im Modell der XXZ -Kette wäre $\mathcal{H}' = \frac{i}{\omega} \sum_{i=1}^N j_i^S e^{i(\mathbf{q}i - \omega t)} \nabla^{\text{diskr.}} h_i^M$ und $j^S(q, t)$ die diskrete Fouriertransformierte von $j_i^S(t)$ im „Ortsraum“, also bezüglich der Gitterplätze. Es wäre also $j^S(q, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{q}i} j_i^S(t)$. Gl. (2.53) ist äquivalent zu Gl. (2.54), wenn man den Limes $\omega \rightarrow 0$ nach dem Limes $\mathbf{q} \rightarrow 0$ nimmt (s. [10]). Da in dieser Arbeit jedoch nur das Drude-Gewicht berechnet wird, soll dies hier nicht gezeigt werden.

Um die Spur in Gl. (2.52) zu berechnen, wird nun eine Orthonormalbasis aus Eigenzuständen des ungestörten Hamiltonoperators eingeführt:

$$\mathcal{H} |n\rangle = E_n |n\rangle \quad \mathbf{1} = |n\rangle \langle n| \quad (2.55)$$

Mit der Zeitentwicklung von $j^S(t)$ analog zu Gl. (2.33) ergibt sich

$$\langle n | j^S(-t - i\beta') | m \rangle = \langle n | e^{-i\mathcal{H}(t+i\beta')} j^S e^{i\mathcal{H}(t+\beta')} | m \rangle \quad (2.56)$$

$$= \langle n | j^S | m \rangle e^{-i(E_n - E_m)t} e^{\beta'(E_n - E_m)}. \quad (2.57)$$

Einsetzen in Gl. (2.52) gibt

$$\operatorname{Re} \sigma = \frac{1}{ZN} \operatorname{Re} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle n | j^S | m \rangle \langle m | j^S | n \rangle \int_0^\infty dt e^{-i(E_n - E_m - is)t} \int_0^\beta d\beta' e^{(E_n - E_m)\beta'}. \quad (2.58)$$

Wegen $\langle n | j^S | m \rangle \langle m | j^S | n \rangle = |\langle n | j^S | m \rangle|^2$ ist der einzige komplexe Teil das Integral über t . Im Limes $s \rightarrow 0$ gilt

$$\operatorname{Re} \int_0^\infty dt e^{-i(E_n - E_m - is)t} = \operatorname{Re} \frac{1}{i(E_n - E_m - is)} = \pi \delta(E_n - E_m) \quad (2.59)$$

$$\delta(E_n - E_m) \int_0^\beta d\beta' e^{(E_n - E_m)\beta'} = \beta \delta(E_n - E_m). \quad (2.60)$$

Gl. (2.58) wird dadurch zu:

$$\operatorname{Re} \sigma = \frac{\pi\beta}{ZN} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} |\langle n | j^S | m \rangle|^2. \quad (2.61)$$

Nach der Definition des Drudegewichts aus Gl. (1.1) gilt also

$$D^I(N, T) = \frac{\pi\beta}{ZN} \sum_{\substack{n,m \\ E_n = E_m}} e^{-\beta E_n} |\langle n | j^S | m \rangle|^2. \quad (2.62)$$

Diese Formel wird im Programm zur numerischen Berechnung verwendet.

Kohns Formel für das Drude-Gewicht

Außer Gl. (2.62) soll noch ein zweiter Ausdruck für das Drude-Gewicht hergeleitet werden, der ebenfalls im Programm verwendet wurde. Zur expliziten Unterscheidung wird das der folgende Ausdruck mit D^{II} bezeichnet. Die Herleitung wird mit dem Modell der Fermionen-Kette nach Anwendung der Jordan-Wigner-Transformation durchgeführt. Dazu geht man von einer Formel aus, die von W. Kohn für $T = 0$ hergeleitet wurde (s. [12]). Kohn führt ein fiktives Vektorpotential A in die Richtung der periodischen Randbedingungen ein, was als Fluss $\Phi = ANe/\hbar c$ durch den Ring interpretiert werden kann. Die Verallgemeinerung von Kohns Formel auf endliche Temperaturen lautet dann (s. [13],[12]):

$$D^{II}(N, T) = \frac{\pi N}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \left. \frac{\partial^2 E_n(\Phi)}{\partial \Phi^2} \right|_{\Phi=0} \quad (2.63)$$

Man benötigt also die Eigenwerte des Hamiltonoperators bis zur zweiten Ordnung in Φ . Durch das Vektorpotential bzw. den Fluss erhalten die Erzeugung- und Vernichtungsoperatoren eine komplexe Phasenverschiebung:

$$c_i \rightarrow e^{i\frac{\Phi}{N}i} c_i \quad \Rightarrow \quad c_i^\dagger \rightarrow e^{-i\frac{\Phi}{N}i} c_i^\dagger \quad \Rightarrow \quad n_i \rightarrow n_i \quad (2.64)$$

Der Hamiltonoperator aus Gl. (2.24) nimmt somit folgende Form an:

$$\mathcal{H}(\Phi) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{J}{2} \left(e^{i\frac{\Phi}{N}} c_i^\dagger c_{i+1} + e^{-i\frac{\Phi}{N}} c_{i+1}^\dagger c_i \right) + J\Delta \left(n_i - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i+1} - \frac{1}{2} \right) \right) \quad (2.65)$$

Um die Eigenwerte zu berechnen, entwickelt man zunächst den Hamiltonoperator:

$$\left. \frac{\partial \mathcal{H}(\Phi)}{\partial \Phi} \right|_{\Phi=0} = \frac{i}{N} \sum_{i=1}^N \frac{J}{2} \left(e^{i\frac{\Phi}{N}} c_i^\dagger c_{i+1} + e^{-i\frac{\Phi}{N}} c_{i+1}^\dagger c_i \right) \Big|_{\Phi=0} = \frac{1}{N} j^S \quad (2.66)$$

Dabei ist j^S gleich mit dem Ausdruck aus Gl. (2.10), wenn man die Jordan-Wigner-Transformation gemäß Gl. (2.17) anwendet.

$$\left. \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\Phi)}{\partial \Phi^2} \right|_{\Phi=0} = -\frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \frac{J}{2} \left(e^{i\frac{\Phi}{N}} c_i^\dagger c_{i+1} + e^{-i\frac{\Phi}{N}} c_{i+1}^\dagger c_i \right) \Big|_{\Phi=0} =: -\frac{1}{N^2} \mathcal{T} \quad (2.67)$$

$$(2.68)$$

\mathcal{T} ist die kinetische Energie, in der Spinkette gegeben als

$$\mathcal{T} = \frac{J}{2} \sum_{i=1}^N (S_i^+ S_{i+1}^- + S_{i+1}^+ S_i^-). \quad (2.69)$$

Der Hamiltonoperator ist somit nach Taylor:

$$\mathcal{H}(\Phi) = \mathcal{H}(\Phi=0) + \frac{\Phi}{N} j^S - \frac{1}{2} \frac{\Phi^2}{N^2} \mathcal{T} + \mathcal{O}(\Phi^3) =: \mathcal{H}_0 + \Phi V \quad (2.70)$$

Nun muss mit Hilfe der zeitunabhängigen Störungsrechnung die Verschiebung der Eigenwerte ebenfalls bis zur zweiten Ordnung in Φ berechnet werden. Dabei muss darauf geachtet werden, dass die Eigenwerte des ungestörten Hamiltonoperators \mathcal{H}_0 entartet sind. Für die ausführliche Darstellung der Störungsrechnung sei auf Quantenmechanik-Lehrbücher verwiesen, z.B. [14]. Das Ergebnis ist:

$$E_n(\Phi) = E_n + \Phi \Delta E_n^{(1)} + \Phi^2 \Delta E_n^{(2)} + \mathcal{O}(\Phi^3) \quad \text{mit} \quad (2.71)$$

$$\Delta E_n^{(1)} = \langle n | V | n \rangle \quad \Delta E_n^{(2)} = \sum_{\substack{m \\ E_m \neq E_n}} \frac{|\langle n | V | m \rangle|^2}{E_n - E_m}. \quad (2.72)$$

Einsetzen von $V = j^S/N - \mathcal{T}\Phi/2N^2$ aus Gl. (2.70) ergibt:

$$E_n(\Phi) = E_n^0 + \Phi \left(\frac{1}{N} \langle n | j^S | n \rangle - \frac{\Phi}{2N^2} \langle n | \mathcal{T} | n \rangle \right) + \frac{\Phi^2}{N^2} \sum_{\substack{m \\ E_m \neq E_n}} \frac{|\langle n | j^S | m \rangle|^2}{E_n - E_m} + \mathcal{O}(\Phi^3) \quad (2.73)$$

$$\left. \frac{\partial^2 E_n(\Phi)}{\partial \Phi^2} \right|_{\Phi=0} = \frac{1}{N^2} \left(-\langle n | \mathcal{T} | n \rangle + 2 \sum_{\substack{m \\ E_m \neq E_n}} \frac{|\langle n | j^S | m \rangle|^2}{E_n - E_m} \right) \quad (2.74)$$

Nun kann in Gl. (2.63) eingesetzt werden und man erhält das Ergebnis:

$$D^{II}(N, T) = \frac{\pi}{ZN} \left(- \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \mathcal{T} | n \rangle + 2 \sum_{\substack{n,m \\ E_m \neq E_n}} e^{-\beta E_n} \frac{|\langle n | j^S | m \rangle|^2}{E_n - E_m} \right) \quad (2.75)$$

$$D^{II}(N, T) = \frac{\pi}{N} \left(\langle -T \rangle - \frac{2}{Z} \sum_{\substack{n,m \\ E_m \neq E_n}} e^{-\beta E_n} \frac{|\langle n | j^S | m \rangle|^2}{E_m - E_n} \right) \quad (2.76)$$

Äquivalenz von D^I und D^{II}

Die beiden Ausdrücke Gl. (2.62) und Gl. (2.76) sind im thermodynamischen Limes identisch (vgl. [1]):

$$D(T) = \lim_{N \rightarrow \infty} D^I(N, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} D^{II}(N, t) \quad (2.77)$$

Für endliche Systemgrößen, insbesondere für niedrige Temperaturen, unterscheiden sie sich jedoch erheblich. Definiert man das Drude-Gewicht als Antwort des Systems auf einen externen Fluss Φ wie oben eingeführt, so ist D^{II} der physikalisch richtige Ausdruck für endliche Systeme (s. [1],[5]). Auch die Summenregel, die unten diskutiert wird, ist nur für D^{II} erfüllt. In [8] wurde jedoch argumentiert, dass für $N \rightarrow \infty$ jeder nicht verschwindende Beitrag zum Drude-Gewicht von D^I kommt, da nur D^I die Diagonalelemente des Stroms $\langle n | j^S | n \rangle$ misst. Technisch gesehen unterscheiden sich D^I und D^{II} nur sehr wenig, weshalb beide Ausdrücke im Programm ausgewertet werden. Die Ergebnisse werden in Abschnitt 5 dargestellt.

Der Unterschied zwischen D^I und D^{II} wird deutlicher, wenn man die freie Energie $F(\Phi) = -T \ln Z(\Phi)$ betrachtet (vgl. [5],[1]). Die zweite Ableitung nach Φ ist:

$$\left. \frac{\partial^2 F(\Phi)}{\partial \Phi^2} \right|_{\Phi=0} = \frac{D^{II}(N, T)}{\pi N} + \beta \left(\sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \left. \frac{\partial E_n}{\partial \Phi} \right|_{\Phi=0} \right)^2 - \beta \left(\sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \left(\left. \frac{\partial E_n}{\partial \Phi} \right|_{\Phi=0} \right)^2 \right). \quad (2.78)$$

Wie man aus Gl. (2.73) sieht, ist

$$\left. \frac{\partial E_n}{\partial \Phi} \right|_{\Phi=0} = \frac{1}{N} \langle n | j^S | n \rangle \quad (2.79)$$

Deshalb ist der zweite Term in Gl. (2.78) proportional zu $\langle j^S \rangle^2$ und verschwindet, da im thermodynamischen Gleichgewicht kein Strom fließt. Der dritte Term ist äquivalent zu $D^I(N, T) / \pi N$. Dies sieht man, indem man die Basis so wählt, dass die offdiagonalen Terme $\langle n | j^S | m \rangle$ für $E_n = E_m$ verschwinden. Diese Wahl ist immer möglich. Somit ergibt sich:

$$D^{II}(N, T) - D^I(N, T) = \pi N \left. \frac{\partial^2 F(\Phi)}{\partial \Phi^2} \right|_{\Phi=0} \quad (2.80)$$

Die rechte Seite verschwindet im thermodynamischen Limes (s. [5],[1]), was Gl. (2.77) zeigt.

Summenregel

Ein anderes wichtiges Ergebnis, das man ausgehend von Gl. (2.76) erhält, ist die Summenregel. Sie lautet (s. [15],[3])

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Re} \sigma(\omega) = \frac{\pi}{N} \langle -\mathcal{T} \rangle \quad (2.81)$$

Um diese Gleichung zu erhalten, muss man über $\sigma^{\text{reg.}}(\omega)$ aus Gl. (1.1) integrieren. $\sigma^{\text{reg.}}(\omega)$ kann aus Gl. (2.53) berechnet werden und ergibt sich als (s. [10],[3])

$$\sigma^{\text{reg.}}(\omega) = \frac{\pi}{ZN} \frac{1 - e^{-\beta\omega}}{\omega} \sum_{\substack{n,m \\ E_n \neq E_m}} e^{-\beta E_n} |\langle n | j^S | m \rangle|^2 \delta(\omega - (E_m - E_n)) = \sigma^{\text{reg.}}(-\omega). \quad (2.82)$$

Somit ergibt sich nach Gl. (1.1) durch Auswerten der δ -Funktionen:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Re} \sigma(\omega) = D + 2 \int_0^{\infty} d\omega \sigma^{\text{reg.}}(\omega) \quad (2.83)$$

$$= D + \frac{\pi}{ZN} \sum_{\substack{n,m \\ E_n \neq E_m}} \frac{e^{-\beta E_n}}{E_m - E_n} |\langle n | j^S | m \rangle|^2 \quad (2.84)$$

Einsetzen des Ausdrucks D^{II} aus Gl. (2.76) für das Drude-Gewicht zeigt die Summenregel.

3 Implementierung der exakten Diagonalisierung

Der Grundgedanke der „exakten Diagonalisierung“ ist schon im Namen enthalten: Man stellt den Hamiltonoperator als Matrix auf und diagonalisiert diese Matrix mit numerischen Methoden. Dadurch erhält man die Eigenwerte und (falls benötigt) orthonormierte Eigenvektoren und kann im Prinzip für jede beliebige Observable den thermodynamischen Erwartungswert und jede Korrelationsfunktion bestimmen. Man hat also vollständiges und exaktes Wissen über das System erhalten. Das Problem der Methode liegt in dem rechnerischen (also zeitlichen) Aufwand für die Diagonalisierung und dem dafür benötigten Arbeitsspeicher, so dass diese Methode nur für relativ kleine Systeme verwendet werden kann. Im Rahmen dieser Arbeit konnten Spinketten bis zur Länge $N = 18$ berechnet werden.

Durch die ED erhält man also für relativ kleine Systeme vollständiges Wissen über das System. Benötigt man Informationen über große Systeme, muss man auf Näherungsmethoden zurückgreifen, beispielsweise die Monte-Carlo-Simulation (s. [16]) oder die

DMRG (density matrix renormalization group (s. [17],[7])). Die Existenz dieser Näherungsmethoden bedeutet jedoch nicht, dass die ED nutzlos ist. Die Daten der ED werden z.B. benötigt, um die Richtigkeit und Genauigkeit der Monte-Carlo-Simulationen für kleine Systeme zu testen (s. [16]). Außerdem ist die ED sehr flexibel; mit ihr kann „Alles“ berechnet werden, wenn man sich auf kleine Systemgrößen beschränkt. Im Folgenden wird das genauere Vorgehen für die Implementierung der ED beschrieben (vgl. [16]).

Der erste Schritt ist die Wahl einer Orthonormalbasis für den Hilbertraum. Für die Spin-1/2-Kette der Länge N ist die Dimension des Hilbertraums 2^N . Die Basisvektoren können deshalb durchnummeriert werden und (eindeutig) mit einer ganze Zahl als Index identifiziert werden¹:

$$\{|a\rangle \text{ mit } a = 0, \dots, 2^N - 1\} \quad (3.1)$$

Eine sehr einfache Möglichkeit, den Basiszuständen aus Gl. (2.1) eine ganze Zahl gemäß Gl. (3.1) zuzuordnen, ist folgende: Man ordnet die Spins nach absteigenden Indizes, ersetzt \uparrow durch 1 und \downarrow durch 0 und interpretiert das Ergebnis als Dualzahl, beispielsweise

$$|\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \rightarrow |101011_2\rangle = |43_{10}\rangle. \quad (3.2)$$

Um den Quellcode übersichtlicher zu gestalten, wird ein Alias eingeführt, der deutlich macht, dass eine Zahl für einen Zustand gemäß dieser Darstellung steht:

```
typedef int spinchain;
```

In dieser Darstellung steht das i -te Bit der Zahl a für der Eigenwert des Operators $S_i^z + 1/2$. Man kann also die bitweisen Operatoren der Programmiersprache verwenden, um den Eigenwert von S_i^z auszulesen oder neu zu setzen. In C++ geschieht das mit Hilfe der Operatoren $|$ für bitweises „Oder“, $\&$ für bitweises „Und“, \wedge für bitweises „exklusives Oder“ und dem Links- bzw. Rechtsschieben von Bits um i Stellen mit $\ll i$ bzw. $\gg i$. Ein allgemeiner Zustand $|\Psi\rangle$ ist dann eine Linearkombination aus den Basiszuständen und wird im Programm durch einen Vektor dargestellt:

$$|\Psi\rangle = \sum_a \Psi_a |a\rangle \text{ mit } \Psi_a = \langle a|\Psi\rangle \quad \Rightarrow \langle\Psi| = \sum_a \Psi_a^* \langle a| \quad (3.3)$$

Wurde die Basis gewählt, so muss die Matrixdarstellung des Hamiltonoperators \mathcal{H} in dieser Basis berechnet werden. Außerdem wird die Matrixdarstellung der Observablen benötigt, für die der Erwartungswert berechnet werden soll. In Fall dieser Arbeit müssen also \mathcal{H} , j^S und \mathcal{T} als Matrix aufgestellt werden. Die Matrixdarstellung eines Operators A ist gegeben durch

$$A = \sum_{a,b} A_{ab} |a\rangle \langle b| \text{ mit } A_{ab} = \langle a|A|b\rangle. \quad (3.4)$$

¹In der Programmiersprache C++ beginnt die Numerierung von Indizes üblicherweise bei 0. Diese Konvention wird hier übernommen und ermöglicht die Basiswahl des folgenden Absatzes.

Da die benötigten Matrizen \mathcal{H} , j^S und \mathcal{T} in Summen über lokale Terme zerfallen ($\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N h_i$ und analog), wird über a und i iteriert. Die Diagonalelemente der Energiedichte sind $h_{i,aa} = \pm\Delta/4$, je nachdem ob die Spins i und $i+1$ in die gleiche Richtung zeigen oder nicht. Dies wird durch eine Funktion `bool compare(spinchain a, int i, int j)`; getestet. Zeigen die Spins in verschiedene Richtungen, so erzeugt der Teil $(S_i^+ S_{i+1}^- + S_{i+1}^+ S_i^-) |a\rangle =: |b_i\rangle$ einen offdiagonalen Term, der durch das Umklappen der Spins i und $i+1$ entsteht. $|b_i\rangle$ wird durch eine Funktion `spinchain flip(spinchain a, int i, int j)`; ermittelt. Beide Funktionen können mit Hilfe der bitweisen Operatoren implementiert werden. Folgender Quellcodeausschnitt stellt die Matrizen für \mathcal{H} , j^S und \mathcal{T} gemäß Gl. (2.4), (2.10) und (2.69) auf (mit `const int Basis_size = pow(2, N);`). Da der Spinstrom j^S rein imaginär ist, wird nur der Imaginärteil gespeichert. Das fehlende komplexe i fällt durch das Betragsquadrat in den Formel für das Drudegewicht nicht weiter auf, so dass einfach normal weiter gerechnet werden kann.

```
for ( spinchain a = 0; a < Basis_size; ++a ) {
    for ( int i = 0; i < N; ++i ) {
        int j = (i+1) % N ;
        if ( compare( a, i, j ) )
            hamiltonian( a, a ) += Delta * 0.25 ;
        else {
            hamiltonian( a, a ) -= Delta * 0.25 ;
            spinchain b = flip( a, i, j ) ;
            hamiltonian( a, b ) += 0.5 ;
            kin_energy( a, b ) += 0.5 ;
            if ( a & (1 << i) )
                spincurrent( a, b ) -= 0.5 ;
            else
                spincurrent( a, b ) += 0.5 ;
        }
    }
}
```

Quellcode 1: Code zum Generieren von \mathcal{H} , j^S und \mathcal{T} ohne Symmetrienausnutzung

Ist der Hamiltonoperator \mathcal{H} als Matrix im Programm aufgestellt, so kann er diagonalisiert werden. Dazu kann man auf eine externe Bibliothek wie LAPACK (Linear Algebra PACKage, s. [18]) zurückgreifen. Eine geeignete Routine gibt dann die Eigenwerte E_n und Eigenzustände $|n\rangle$ (als Vektoren gemäß Gl. (3.3)) zurück. Damit kann der Erwartungswert jeder Observable A bestimmt werden als

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | A | n \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \left(\sum_{a,b} n_a^* A_{ab} n_b \right) \quad \text{mit } Z = \sum_n e^{-\beta E_n}. \quad (3.5)$$

Benötigt man den Erwartungswert für (viele) verschiedene Temperaturwerte, so ist es sinnvoll, die Summen über a und b nur einmal für jedes n auszuwerten und zu speichern. Gibt es negative Energieeigenwerte, so wird der Faktor $e^{-\beta E_n}$ für kleine Temperaturen sehr groß, was zu numerischen Problemen führt. Dies kann vermieden werden, indem

vor der Anwendung von Gl. (3.5) zu allen Energien der gleiche Wert, nämlich das Minimum aller Energien, addiert wird. Diese Verschiebung kürzt sich mit Z , sodass sich am Ergebnis nichts ändert.

Analog können auch die beiden Formeln Gl. (2.62) und Gl. (2.76) für das Drude-Gewicht ausgewertet werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde mit doppelter Flieskommagenauigkeit – also mit etwa 10^{-15} – gerechnet. Zwei Energien E_n und E_m werden in dieser Arbeit als gleich angenommen, wenn sie sich um weniger als $10^{-10}J$ unterscheiden (vgl. [2]). Ein so erstelltes Programm kann die Ergebnisse für Spinketten bis etwa zur Länge $N = 12$ berechnen.

Um größere Systeme beschreiben zu können, müssen Symmetrien ausgenutzt werden. Findet man einen Operator X , der mit dem Hamiltonoperator kommutiert, so können X und \mathcal{H} simultan diagonalisiert werden. Findet man eine Möglichkeit, die Basis des Hilbertraum bereits als Eigenbasis des Operators X zu schreiben, so erhält die Matrixdarstellung des Hamiltonoperators Blockdiagonalform, je ein Block zu jedem Eigenwert von X . Diese Blöcke können einzeln diagonalisiert werden, was den Speicherbedarf und Rechenaufwand deutlich reduziert. Findet man einen weiteren Operator, der mit \mathcal{H} und mit X vertauscht, so können alle drei Operatoren simultan diagonalisiert werden, was jeden Block zu einem Eigenwert von X wieder in kleinere Blöcke aufteilt. Dies soll in den folgenden zwei Abschnitten erklärt werden.

3.1 Eigenbasis von S^z und Spininversion

Durch Anwenden der Kommutatorrelation Gl. (2.6) sieht man, dass der Gesamtspin in z -Richtung S^z mit allen für die Rechnung benötigten Operatoren kommutiert:

$$S^z := \sum_{i=1}^N S_i^z \quad \Rightarrow \quad [S^z, \mathcal{H}] = 0 = [S^z, j^S] = [S^z, \mathcal{T}]. \quad (3.6)$$

Die im vorherigen Abschnitt gewählte Basis ist schon eine Eigenbasis des S^z -Operators, die Eigenwerte sind $0, \dots, N$. Die Dimension eines Blocks zum Eigenwert s^z ist durch den Binomialkoeffizienten $\binom{N}{s^z}$ gegeben. Man kann also in diesem Fall durch reines Umsortieren der Basis den Hamiltonoperator schon blockdiagonalisieren.

Im Programm stellt man zu jedem Eigenwert s^z den zugehörigen Block als eigene Matrix auf. Dazu benötigt man eine Liste mit den Basisvektoren des aktuellen Blocks. Diese erhält man durch Iteration über alle Basisvektoren, indem man den Basisvektor gegebenenfalls zur Liste hinzufügt, falls er den passenden Eigenwert s^z hat. Mit dieser Liste kann der Quellcode aus List. 1) angepasst werden: Statt der Iteration über alle a muss nun nur noch über die Liste iteriert werden, und nach `spinrep b = flip(a, i, j)`; muss der entstandene Basisvektor erst in der Liste gesucht werden. Für genaue Details zur Implementation sei auf die Literatur verwiesen (s. [16]).

Es ist dabei ausreichend, nur die Blöcke für $s^z \geq N/2$ aufzustellen, wie im Folgenden begründet wird. Sei \hat{F} der Spininversionsoperator, der alle Spins flipt:

$$\hat{F} |S_1^z, S_2^z, \dots, S_N^z\rangle := |-S_1^z, -S_2^z, \dots, -S_N^z\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{F}\hat{F} = 1; \quad \hat{F}^\dagger = \hat{F} \quad (3.7)$$

\hat{F} kommutiert mit \mathcal{H} und \mathcal{T} ; mit j^S antikommutiert \hat{F} . Auch mit S^z antikommutiert \hat{F} , deshalb kann \hat{F} nicht gleichzeitig mit S^z zur Blockdiagonalisierung eingesetzt werden. Es gilt aber:

$$S^z |n\rangle = s^z |n\rangle \quad \Rightarrow \quad S^z \hat{F} |n\rangle = -s^z \hat{F} |n\rangle \quad (3.8)$$

Ist $|n\rangle$ ein Eigenzustand von \mathcal{H} und S^z , so ist also auch $\hat{F} |n\rangle$ Eigenzustand dieser Operatoren mit gleichem Energieeigenwert, jedoch mit anderem Eigenwert $-s^z$ von S^z , falls $s^z \neq 0$. Das Minus aus dem Antikommutator für j^S verschwindet im Betragsquadrat der Gleichungen (2.62) und (2.76) für das Drudegewicht:

$$\left| \langle n | \hat{F} j^S \hat{F} | m \rangle \right|^2 = \left| - \langle n | j^S \hat{F} \hat{F} | m \rangle \right|^2 = \left| \langle n | j^S | m \rangle \right|^2 \quad (3.9)$$

Der Beitrag eines Blockes mit s^z zum Drudegewicht bzw. zum Erwartungswert von \mathcal{T} gemäß Gl. (3.5) ist also indentisch zu dem eines Blockes mit $-s^z$. Deshalb reicht es für diese Arbeit, Blöcke mit $s^z \geq 0$ zu berechnen. Für gerades N muss darauf geachtet werden, dass der Block mit $s^z = 0$ in der Summe des Erwartungswertes bzw. des Drudegewichts nur halb so viel gewichtet wird wie die Blöcke mit $s^z > 0$.

Durch die in diesem Abschnitt dargestellte Symmetrienausnutzung können schon die Ergebnisse für Ketten bis etwa zur Länge $N = 15$ berechnet werden.

3.2 Impulseigenzustände

Durch die periodischen Randbedingungen ist das System translationsinvariant. Formal drückt man dies durch den Translationsoperator \hat{T} aus:

$$\hat{T} |S_1^z, S_2^z, \dots, S_N^z\rangle := |S_N^z, S_1^z, S_2^z, \dots, S_{N-1}^z\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{T}^N = \mathbf{1}; \quad \hat{T}^\dagger = \hat{T}^{-1} \quad (3.10)$$

Die Gleichung $\hat{T}^N = \mathbf{1}$ impliziert, dass der Eigenwerte von \hat{T} nur die Werte e^{ik} für bestimmte k annehmen kann, die folgendermaßen gewählt werden können:

$$k = m_k \frac{2\pi}{N} \quad \text{mit } m_k \in \{0, \dots, N-1\}. \quad (3.11)$$

Da die Operatoren \mathcal{H} , j^S , \mathcal{T} und S^z in Summen über die lokalen Dichten zerfallen, kommutieren sie mit \hat{T} . Deshalb können die Matrizen weiter blockdiagonalisiert werden, die Blöcke zu einem Wert s^z werden dabei in kleinere Blöcke mit jeweils einem Wert s^z und k aufgeteilt.

Folgende Transformation ergibt einen Eigenzustand von \hat{T} zum Eigenwert e^{ik} :

$$|a(k)\rangle := \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{-ikj} \hat{T}^j |a\rangle \quad (3.12)$$

Diese Definition ist jedoch nicht für jeden Zustand $|a\rangle$ und für alle k aus Gl. (3.11) möglich. Für manche Basiszustände $|a\rangle$ gilt schon für ein $m < N$, dass $\hat{T}^m |a\rangle = |a\rangle$

ist. Das kleinste positive m , dass dies erfüllt, wird als Periodizität R_a des Zustandes $|a\rangle$ bezeichnet. Ist die Periodizität kleiner als N , so treten in Gl. (3.12) die gleichen Zustände in der Summe mehrmals mit verschiedenen Phasen auf. Die Summe dieser Phasen ist

$$\sum_{j=0}^{N/R_a-1} e^{-ikjR_a} = \begin{cases} N/R_a & \text{falls } kR_a \text{ Vielfaches von } 2\pi \text{ ist} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} . \quad (3.13)$$

Es sind also zu jedem $|a\rangle$ nur k -Werte erlaubt, für die kR_a ein Vielfaches von 2π ist. Die Normalisierungskonstante ist dann $N_a = N^2/R_a$. Wegen $|\langle \hat{T}a(k) \rangle| = |a(k)\rangle$ muss außerdem darauf geachtet werden, dass nur ein Repräsentant in die Liste für die Basis des Blocks aufgenommen wird. Am einfachsten ist es, nur die $|a\rangle$ aufzunehmen, für die der Zahlenwert von $|a\rangle$ im Sinne von Gl. (3.2) kleiner ist als für alle $\hat{T}^i |a\rangle$, $i = 1, \dots, R_a - 1$. Mit diesen zwei Bedingungen kann die Basis des Blocks zu gegebenem s^z und k aufgestellt werden.

Das Aufstellen der Matrizen geschieht ähnlich wie in Abschnitt 3.1. Der Diagonalterm von \mathcal{H} bleibt völlig identisch. Für die Terme aus $(S_i^+ S_{i+1}^- \pm S_{i+1}^+ S_i^-)$ ergibt sich eine kleine Änderung: Der Zustand $|b'_i\rangle$, der durch den Flip der Spins i und $i + 1$ aus $|a\rangle$ entsteht, muss nicht unbedingt ein Repräsentant für einen Impulszustand gemäß Gl. (3.12) sein. Es muss erst der Zustand $|b_i\rangle = \hat{T}^{l_i} |b'_i\rangle$ gefunden werden, dessen Zahlenwert (im Sinne von Gl. (3.2)) minimal ist. Dieser Zustand muss dann in der Liste der Basis des Blocks gesucht werden. Es kann auch der Fall eintreten, dass $|b_i\rangle$ nicht in dieser Liste vorhanden ist, weil der Wert von k für dieses $|b'_i\rangle$ nicht erlaubt ist. Dies liegt daran, dass zwar die Summe der Dichten mit \hat{T} kommutiert, aber nicht die einzelnen Dichten. Summiert man aber über alle Dichten, so heben sich derartige Terme gerade auf. Deshalb kann man den offdiagonalen Term ignorieren, falls $|b_i\rangle$ nicht in der Liste der Basis ist.

Durch Einsetzen der Definition (3.12) für die Impulszustände erhält man die offdiagonalen Elemente (s. [16]):

$$\langle b_i(k) | (S_i^+ S_{i+1}^- \pm S_{i+1}^+ S_i^-) | a(k) \rangle = e^{-ikl_i} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{R_a}{R_{b_i}}} \text{ falls } \hat{T}^{l_i} |b'_i\rangle = |b_i\rangle \quad (3.14)$$

Die Matrixelemente sind für die Impulszustände also komplex, was den Rechenaufwand und Speicherbedarf prinzipiell erhöht. Da die Operatoren \mathcal{H} , j^S und \mathcal{T} jedoch weiter blockdiagonalisiert wurden, können nun Ketten bis zur Länge $N = 18$ berechnet werden. Für weitere Details zur Implementierung wird auf [16] verwiesen.

4 Test des Programms

Beim Programmieren können „kleine“ Fehler unter Umständen sehr große Auswirkung auf das Ergebnis haben. Deshalb ist es sinnvoll, das Ergebnis auf Plausibilität zu überprüfen. Dazu kann auf Spezialfälle zurückgegriffen werden, die analytisch lösbar sind, und deren Ergebnisse mit denen des Programms verglichen werden. Wenn schon Daten aus anderen Quellen vorhanden sind, kann auch mit diesen verglichen werden; so muss

das Programm natürlich auch in den verschiedenen „Entwicklungsstufen“ bezüglich der Blockdiagonalisierung die gleichen Daten liefern, falls identische Parameter (N, Δ) eingestellt wurden.

4.1 Freie Fermionen

Setzt man im Hamiltonoperator nach der Jordan-Wigner-Transformation Gl. (2.24) den Anisotropieparameter Δ auf 0, so besteht der Hamiltonoperator nur noch aus dem kinetischen Teil.

$$\mathcal{H}^{XY} = \frac{J}{2} \sum_{j=1}^N \left(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j \right) = \mathcal{T} \quad (4.1)$$

Der Fall $\Delta = 0$ beschreibt also spinlose freie Fermionen auf einer Kette. Dieses Modell kann analytisch gelöst werden (vgl. [10]). Dazu führt man eine diskrete Fouriertransformation durch:

$$c_k := \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{ikj} c_j \quad \Rightarrow \quad c_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-ikj} c_j^\dagger \quad (4.2)$$

$$c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikj} c_k \quad c_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikj} c_k^\dagger \quad (4.3)$$

k nimmt dabei N Werte mit Abstand $\frac{2\pi}{N}$ an, da wegen der periodischen Randbedingungen $c_{j+N} = c_j$ gefordert werden muss. Diese Operatoren c_k und c_k^\dagger erfüllen die gleichen Antikommutatorregeln wie c_j und c_j^\dagger , beschreiben also ebenfalls Fermionen auf einer Kette. Die Operatoren \mathcal{H}^{XY} und j^S werden durch die Transformation diagonal in k :

$$\mathcal{H}^{XY} = \frac{J}{2N} \sum_{k,k'} \left(\underbrace{\sum_{j=1}^N e^{i(k-k')j} e^{-ik'j} c_k^\dagger c_{k'} + \text{h.c.}}_{N\delta_{kk'}} \right) = J \sum_k \cos(k) c_k^\dagger c_k \quad (4.4)$$

Durch eine Verschiebung $k \rightarrow k + \pi$ kann man ein Minuszeichen erhalten, so dass die Energie für $k = 0$ den minimalen Wert $E_0 = -|J|$ annimmt. Eine analoge Rechnung ergibt den Strom j^S . Mit $n_k = c_k^\dagger c_k$ erhält man

$$\mathcal{H}^{XY} = -J \sum_k \cos(k) n_k =: \sum_k \epsilon_k n_k \quad \text{und} \quad j^S = J \sum_k \sin(k) n_k. \quad (4.5)$$

Die Besetzungswahrscheinlichkeit der Energieeigenzustände ist im großkanonischen Ensemble durch die Fermi-Verteilungsfunktion gegeben (vgl. [19]):

$$n_k(\epsilon_k) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1} \quad (4.6)$$

Das chemische Potential μ kann mit dem externen Magnetfeld h^M identifiziert werden, da der Gesamtspin S^z in z -Richtung nach der Jordan-Wigner-Transformation mit dem Teilchenzahloperator $N = \sum_k n_k$ (bis auf eine Konstante) übereinstimmt. Da in dieser Arbeit kein Magnetfeld betrachtet wird, wird das chemische Potential auf $\mu = 0$ gesetzt.

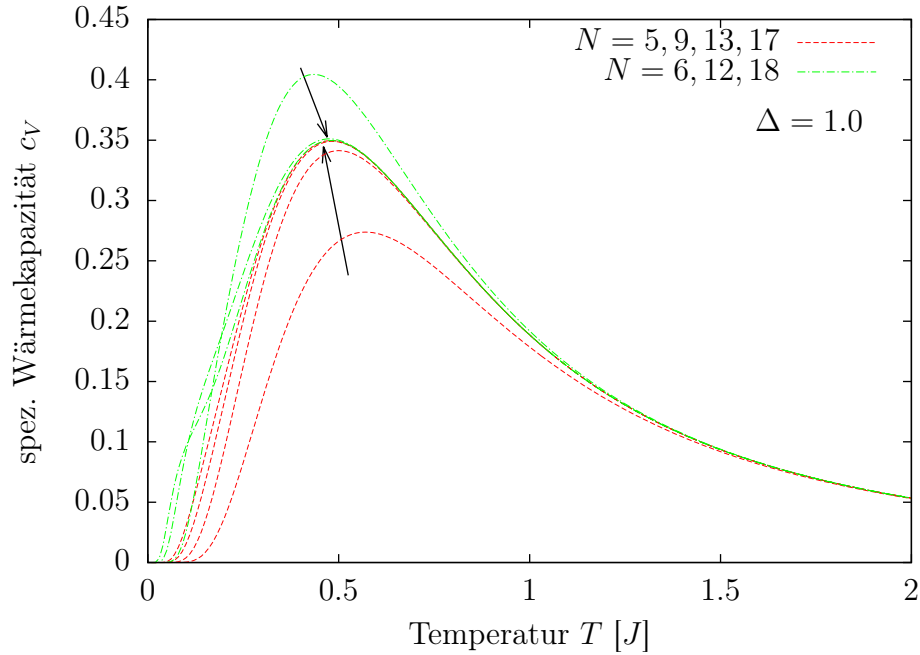


Abbildung 4.1: Numerische Ergebnisse für die spezifische Wärmekapazität $c_V = C_V/N$ für $\Delta = 1$, großkanonisch.

4.2 Wärmekapazität

Die Wärmekapazität C_V ist definiert als Ableitung der inneren Energie nach der Temperatur bei konstantem Volumen (vgl. [19]). Die innere Energie ist in der Thermodynamik gegeben als $\langle \mathcal{H} \rangle$. Somit lässt sich die Wärmekapazität gemäß Gl. (3.5) in der Eigenbasis $\{|n\rangle\}$ des Hamiltonoperators berechnen als:

$$C_V = \left(\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial T} \right)_V = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | E_n | n \rangle \right) \quad (4.7)$$

$$= \frac{1}{ZT^2} \left(\left(\sum_n E_n^2 e^{-\beta E_n} \right) - \frac{1}{Z} \left(\sum_n E_n e^{-\beta E_n} \right)^2 \right). \quad (4.8)$$

Um die Wärmekapazität zu berechnen, werden also nur die Eigenwerte des Hamiltonoperators benötigt, nicht die Eigenzustände. Deshalb die Wärmekapazität sehr gut geeignet, um in der Entstehungsphase des Programms zu testen, ob der Hamiltonoperator richtig aufgestellt wurde.

Da die Energie extensiv ist, ist auch die Wärmekapazität extensiv. Für den Vergleich von verschiedenen Systemgrößen wird deshalb die spezifische Wärmekapazität $c_V = C_V/N$, also die Wärmekapazität pro Gitterplatz, verwendet. Das Ergebnis ist für $\Delta = 1$ in Abbildung 4.1 zu sehen. Man sieht, dass Ketten mit ungerader Länge N sich besonders für kleines N von den Ketten mit geradem N unterscheiden, was an der Symmetrie liegt

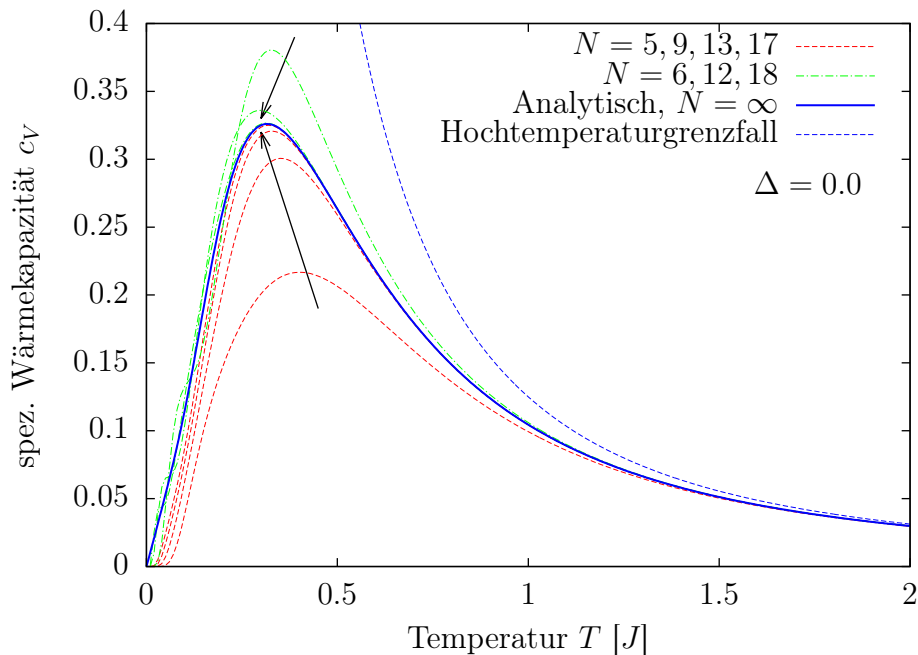


Abbildung 4.2: Spezifische Wärmekapazität für $\Delta = 0$, großkanonisch.

(vgl. [2]). Man erkennt auch, dass die spezifische Wärmekapazität für hohe Temperaturen unabhängig von N wird.

Für $\Delta = 0$ kann man mit dem Ergebnis des vorherigen Abschnittes 4.1 den thermodynamischen Limes exakt berechnen, wie im Folgenden gezeigt wird. Die innere Energie ist $\langle \mathcal{H}^{XY} \rangle = \sum_k \epsilon_k n_k(\epsilon_k)$. Im Limes $N \rightarrow \infty$ geht diese Summe in ein Integral über:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle \mathcal{H}^{XY} \rangle = \frac{N}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \epsilon(k) \frac{1}{e^{\beta \epsilon(k)} + 1} \quad (4.9)$$

$$= J \frac{N}{\pi} \int_{-1}^1 d\tilde{\epsilon} \frac{\tilde{\epsilon}}{\sqrt{1 - \tilde{\epsilon}^2} (e^{J\beta\tilde{\epsilon}} + 1)} \quad (4.10)$$

Im letzten Schritt wurde die Dispersionsrelation $\epsilon(k) = -J \cos(k)$ verwendet und $\tilde{\epsilon} = \epsilon/J$ substituiert, um das Integral dimensionslos zu machen. Damit lässt sich leicht die spezifische Wärmekapazität als Ableitung nach der Temperatur ausrechnen und man erhält:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} c_V = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \frac{\partial \langle \mathcal{H}^{XY} \rangle}{\partial T} = \frac{J^2}{2\pi T^2} \int_{-1}^1 d\tilde{\epsilon} \frac{\tilde{\epsilon}}{\sqrt{1 - \tilde{\epsilon}^2} (\cosh J\beta\tilde{\epsilon} + 1)}. \quad (4.11)$$

Dieses Integral kann numerisch für verschiedene T berechnet werden. Abbildung 4.2 zeigt den Vergleich zwischen Gl. (4.11) und den Ketten endlicher Länge. Zusätzlich wurde der führende Term hoher Temperaturen eingezeichnet, der aus Gl. (4.11) als $c_V(T \gg J) \approx 1/8T^2$ berechnet werden kann. Für kleine Temperaturen gilt $c_V(T \ll J) \approx T\frac{\pi}{3}$. Dieses Verhalten zeigen die endlichen Ketten nicht, sie fallen bereits für $T > 0$ auf 0 ab.

4.3 Drude-Gewicht für freie Fermionen

Auch das Drude-Gewicht kann für $\Delta = 0$ analytisch ausgerechnet werden. Da der Stromoperator diagonal wird (vgl. Gl. (4.5)), kommutiert er mit dem Hamiltonoperator. Dadurch vereinfachen sich die beiden Ausdrücke für das Drude-Gewicht Gl. (2.62) und (2.76) erheblich:

$$D^I(N, T) = \frac{\pi\beta}{ZN} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | j^S | n \rangle = \frac{\pi\beta}{N} \langle (j^S)^2 \rangle \quad (4.12)$$

$$D^{II}(N, T) = \frac{\pi}{N} \langle -\mathcal{T} \rangle \quad (4.13)$$

Im thermodynamischen Limes ergibt sich (s. [2]):

$$D^I(N \rightarrow \infty, T) = \frac{\pi\beta}{N} \frac{N}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk (J \sin(k))^2 \frac{e^{\beta\epsilon(k)}}{(e^{\beta\epsilon(k)} + 1)^2} \quad (4.14)$$

$$= J^2\beta \int_{-1}^1 d\tilde{\epsilon} \sqrt{1 - \tilde{\epsilon}^2} \frac{e^{J\beta\tilde{\epsilon}}}{(e^{J\beta\tilde{\epsilon}} + 1)^2}. \quad (4.15)$$

$$D^{II}(N \rightarrow \infty, T) = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\pi}{N} \langle \mathcal{H}^{XY} \rangle = -J \int_{-1}^1 d\tilde{\epsilon} \frac{\tilde{\epsilon}}{\sqrt{1 - \tilde{\epsilon}^2} (e^{J\beta\tilde{\epsilon}} + 1)} \quad (4.16)$$

Für die letzte Gleichung wurde Gl. (4.10) eingesetzt. Wie man durch paritelle Integration zeigen kann, sind die Integrale aus Gl. (4.15) und Gl. (4.16) identisch. Die Ausdrücke D^I und D^{II} sind also im thermodynamischen Limes identisch.

Wie bei der Wärmekapazität kann auch dieses Integral numerisch für verschiedene Werte von T berechnet werden. Es ist in Abbildung 4.3 zusammen mit den numerischen Ergebnissen für D^I und D^{II} für verschiedene N gegen T aufgetragen. Für hohe Temperaturen stimmen alle Kurven überein, der Hochtemperaturgrenzwert ist also unabhängig von N . Für kleine Temperaturen muss zwischen D^I und D^{II} und ungeraden oder geraden N unterschieden werden. D^I divergiert für ungerades N im Limes $T \rightarrow 0$ und nähert sich dem thermodynamischen Limes von oben. Für gerades N und kleine Temperaturen wird D^I dagegen 0, es nähert sich dem thermodynamischen Grenzwert von unten. D^{II} zeigt ein wesentlich besseres Konvergenzverhalten in N als D^I . D^{II} nähert sich für ungerades N von unten, für gerades N von oben an den Grenzwert $N \rightarrow \infty$ an.

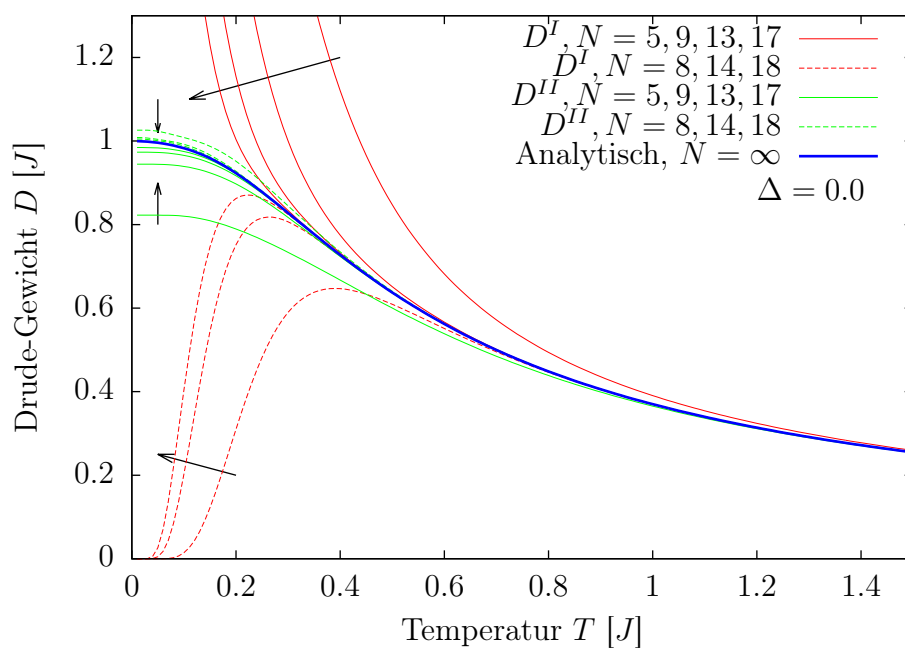


Abbildung 4.3: Drude-Gewicht für $\Delta = 0$, großkanonisch. Die roten Linien zeigen numerische Ergebnisse für D^I gemäß Gl. (2.62), grün für D^{II} nach Gl. (2.76). Blau zeigt den thermodynamischen Grenzwert $N \rightarrow \infty$ nach Gl. (4.15).

5 Ergebnisse

Abbildung 5.1 und 5.2 zeigen die numerischen Ergebnisse für das Drude-Gewicht bei $\Delta = 0.5$ für ungerade bzw. gerade Kettenlängen N . Man sieht, dass $D^I(N, T)$ und $D^{II}(N, T)$ für hohe Temperaturen übereinstimmen ($T \gtrsim 0.4J$ für $N \approx 17$, für kleineres N erst bei höherem T). Im Gegensatz zum Fall der freien Fermionen ist das Hochtemperaturverhalten jedoch nicht mehr unabhängig von N . Für gerade N steigt $D^I(N, T)$ monoton mit N , für ungerade N ist $D^I(N, T)$ jedoch monoton fallend. $D^{II}(N, T)$ zeigt gleiches Verhalten für hohe Temperaturen, für niedrige Temperaturen ist das Monotonieverhalten jedoch entgegengesetzt.

Abbildung 5.3 und 5.4 zeigen die Ergebnisse für den isotropen Fall $\Delta = 1$. Das Verhalten ist im Prinzip genauso wie für $\Delta = 0.5$. Der Vergleich mit Abb. 5 aus [2] zeigt für beide Fälle (auch für andere N als die Eingezeichneten) sehr gute Übereinstimmung.

5.1 Hochtemperaturgrenzfall

Für das Verhalten bei großen Temperaturen ($T \gg J$) liefern $D^I(N, T)$ und $D^{II}(N, T)$ aus Gl. (2.62) und (2.76) identische Ergebnisse (vgl. vorheriger Abschnitt). Da der Ausdruck Gl. (2.62) technisch einfacher ist, wird er zur Untersuchung dieses Verhaltens verwendet. Für hohe Temperaturen ($T \gg J \Leftrightarrow \beta \ll 1/J$) ist $\exp(-\beta E_n) \approx 1$. Die Zustandssumme konvergiert gegen die Dimension des Hilbertraumes $Z_\infty = 2^N$, so dass

$$\lim_{T \rightarrow \infty} D^I(N, T) T = C^S(N) \text{ mit } C^S(N) = \frac{\pi}{N Z_\infty} \sum_{\substack{n, m \\ E_n = E_m}} |\langle n | j^S | m \rangle|^2. \quad (5.1)$$

In Abbildung 5.5 ist $C^S(N)$ für $\Delta \in \{0, 0.5, 1\}$ gegen die inverse Kettenlänge aufgetragen. Die N -Abhängigkeit ist (für großes N) etwa

$$C^S(N) \approx C^S(N = \infty) + \frac{A}{N}. \quad (5.2)$$

Extrapoliert man nach dieser Gleichung, so erhält man für $\Delta = 0.5$ ein deutlich positives $C^S(N = \infty)$. Für $\Delta = 1$ ist $C^S(N = \infty)$ dagegen schon ziemlich nah an 0.

Verwendet man zur Extrapolation noch einen zusätzlichen Term B/N^2 zu Gl. (5.2), so ist der $|B|$ mit 1.7 ($\Delta = 0.5$) bzw. 1.5 ($\Delta = 1$) für ungerade Ketten kleiner als für gerade Ketten mit $|B| = 2.0$ bzw. 2.7. Die lineare Approximation der N -Abhängigkeit, die zur Extrapolation verwendet wird, ist also für ungerade Ketten besser als für gerade Ketten.

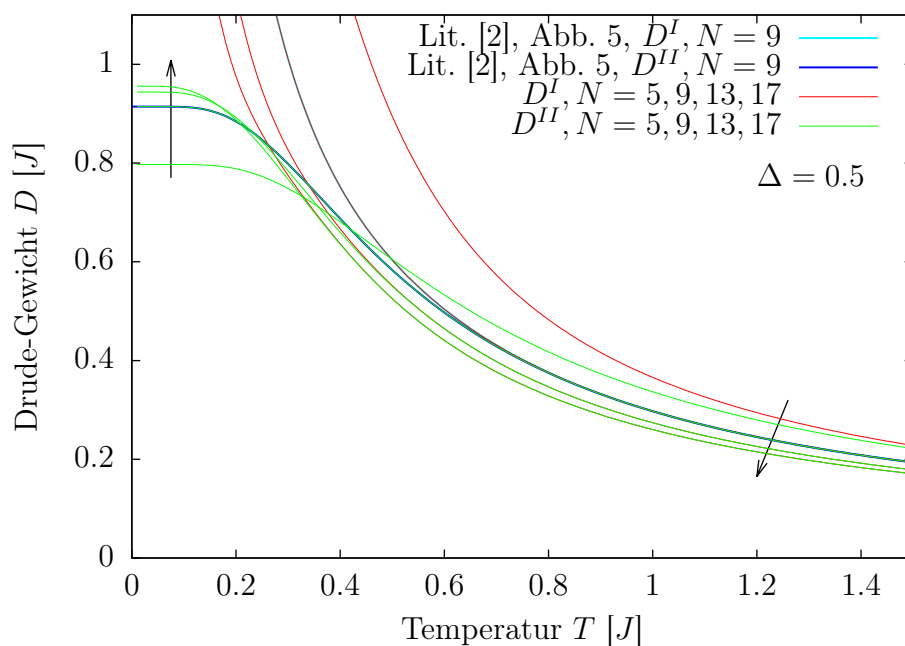


Abbildung 5.1: Numerische Ergebnisse für das Drude-Gewicht nach Gl. (2.62) (rot) und Gl. (2.76) (grün) für $\Delta = 0.5$, ungerade Kettenlängen N , großkanonisch.

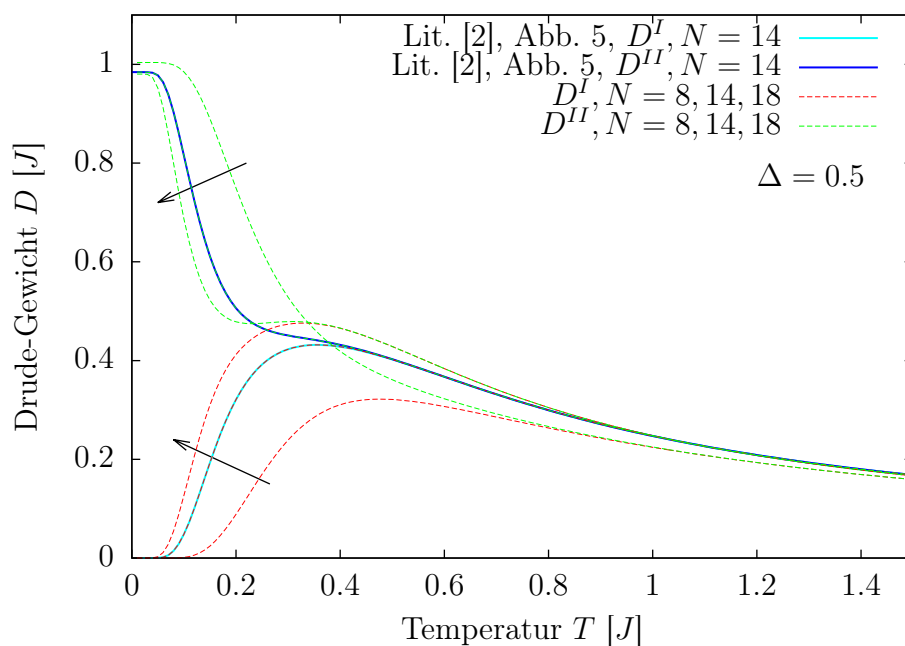


Abbildung 5.2: Numerische Ergebnisse für das Drude-Gewicht nach Gl. (2.62) (rot) und Gl. (2.76) (grün) für $\Delta = 0.5$, gerade Kettenlängen N , großkanonisch.

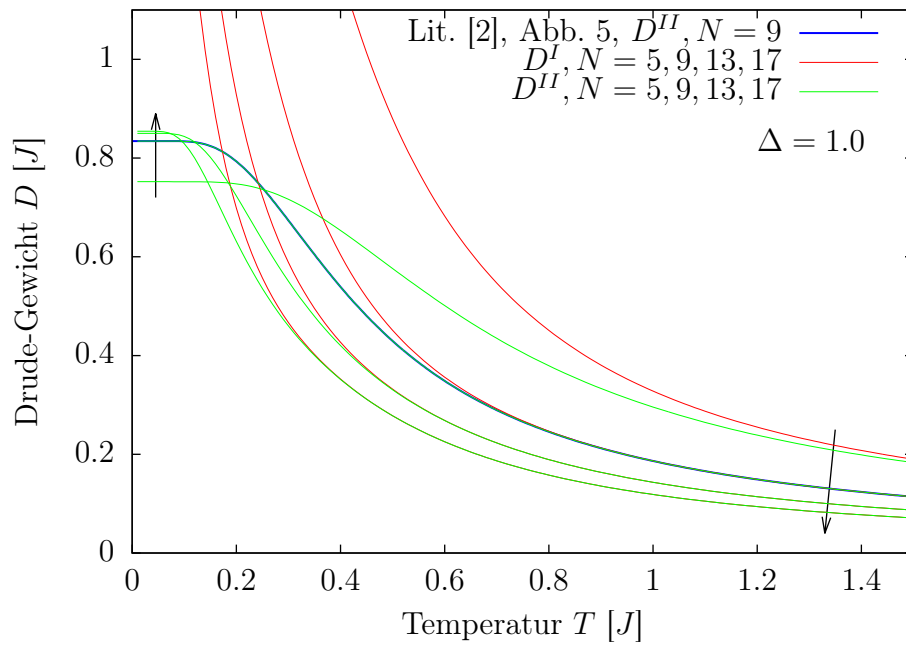


Abbildung 5.3: Numerische Ergebnisse für das Drude-Gewicht nach Gl. (2.62) (rot) und Gl. (2.76) (grün) für $\Delta = 1$, ungerade Kettenlängen N , großkanonisch.

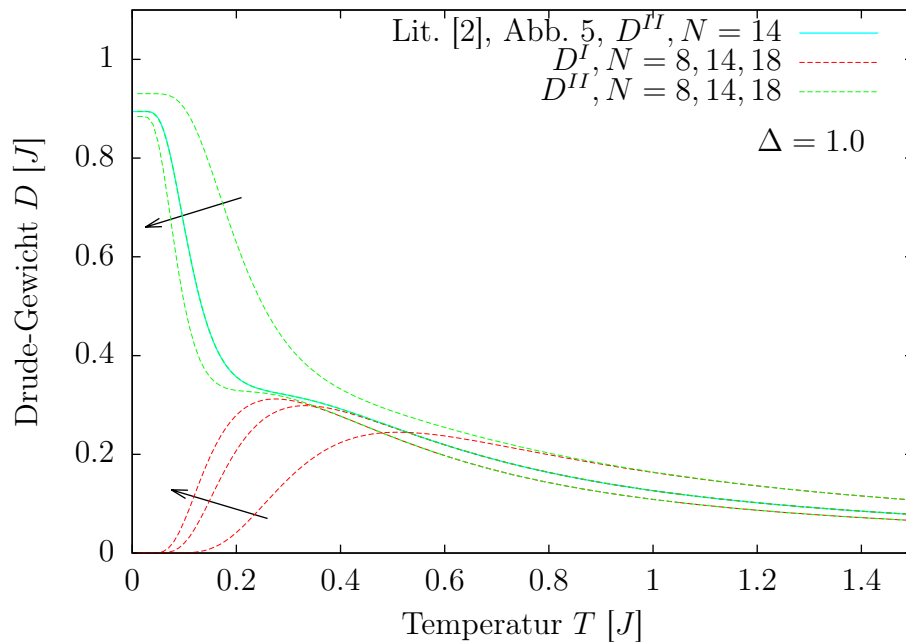


Abbildung 5.4: Numerische Ergebnisse für das Drude-Gewicht nach Gl. (2.62) (rot) und Gl. (2.76) (grün) für $\Delta = 1$, gerade Kettenlängen N , großkanonisch.

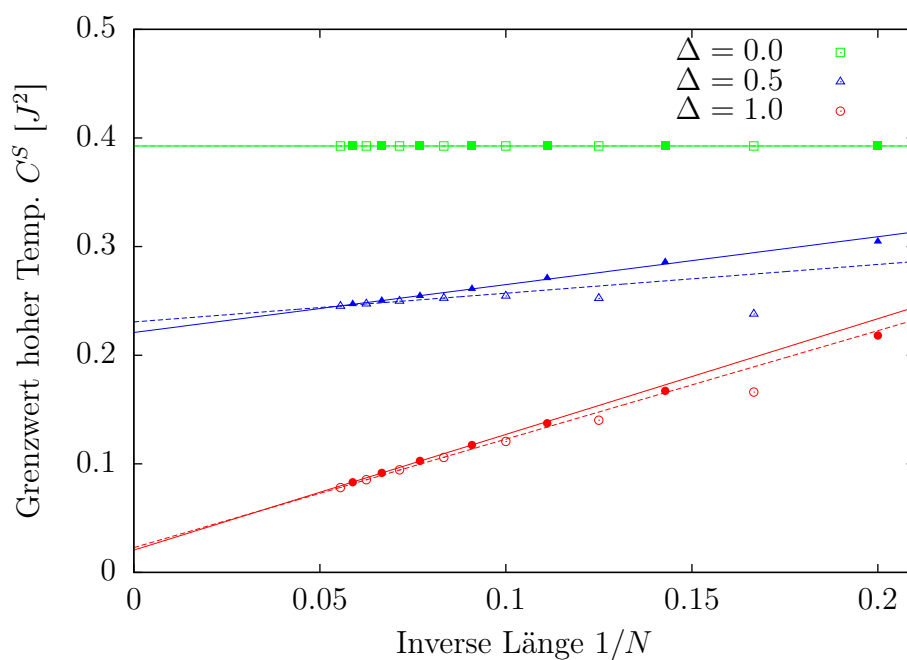


Abbildung 5.5: Numerische Ergebnisse für das Hochtemperaturverhalten des Drude-Gewichts $C^S(N) = \lim_{T \rightarrow \infty} [TD(T, N)]$ nach Gl. (5.1), großkanonisch. Gefüllte (ungefüllte) Symbole zeigen die ungeraden (geraden) Kettenlängen N . Die durchgezogenen (gestrichelten) Geraden zeigen Extrapolationen für ungerade (gerade) N gemäß Gl. (5.2). Zur Extrapolation werden jeweils vier Punkte mit dem maximalen berechneten N ($N = 11, 13, 15, 17$ für ungerade N bzw. $N = 12, 14, 16, 18$ für gerade N) verwendet.

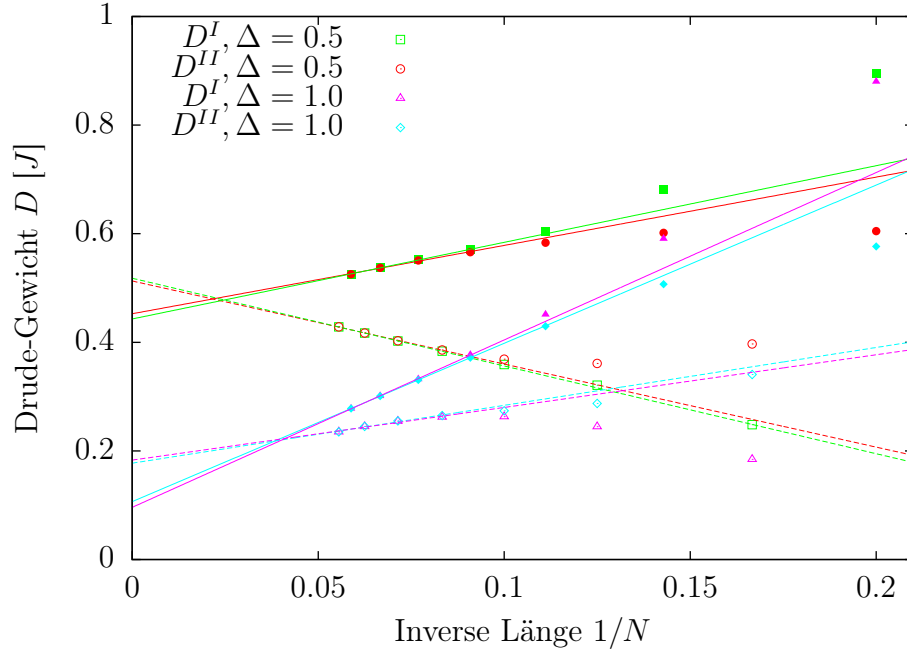


Abbildung 5.6: Extrapolation des Drude-Gewichts für Temperatur $T = 0.5J$ auf $N = \infty$ für $\Delta = 0.5$, großkanonisch. Gefüllte (ungefüllte) Symbole zeigen die ungeraden (geraden) Kettenlängen N . Die durchgezogenen (gestrichelten) Geraden zeigen Extrapolationen für ungerade (gerade) N gemäß Gl. (5.3). Zur Extrapolation werden jeweils vier Punkte mit dem maximalen berechneten N ($N = 11, 13, 15, 17$ für ungerade N bzw. $N = 12, 14, 16, 18$ für gerade N) verwendet.

5.2 Extrapolation auf $N = \infty$

Analog zu Gl. (5.2) kann auch das Drude-Gewicht bei endlichen Temperaturen extrapoliert werden:

$$D(N, T) \approx D(N = \infty, T) + \frac{A(T)}{N} \quad (5.3)$$

Für die Extrapolation muss zwischen ungeraden und geraden N unterschieden werden, da sich deren Verhalten grundlegend unterscheidet; für D^I und D^{II} muss natürlich auch getrennt extrapoliert werden. In Abbildung 5.6 ist exemplarisch die Extrapolation für $T = 0.5J$ dargestellt. Man sieht in dieser Abbildung und in Abb. 5.5, dass die Approximation der N -Abhängigkeit gemäß Gl. (5.3) für ungerade N besser ist als für gerade N . Die Extrapolation für ungerade N liegt deshalb im Zweifelsfall wohl näher am tatsächlichen Ergebnis als die Extrapolation für gerade N .

In Abbildung 5.7 und 5.8 ist das Ergebnis der so durchgeführten Extrapolation auf $N = \infty$ in Abhängigkeit der Temperatur zu sehen. Das beste Konvergenzverhalten zeigt D^{II} für ungerade Kettenlänge. Für gerade N hat die Extrapolation von D^{II} ein

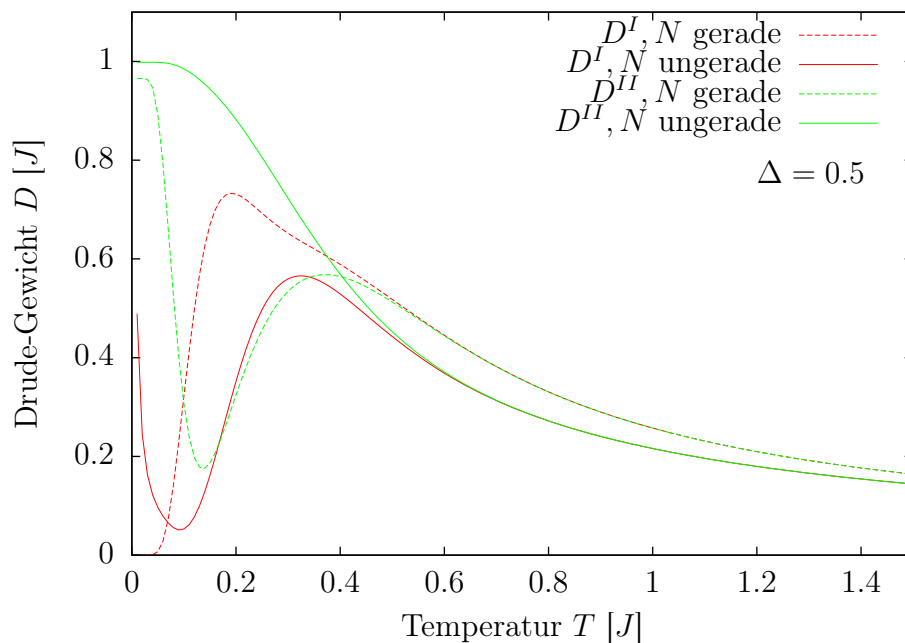


Abbildung 5.7: Drude-Gewicht extrapoliert auf $N = \infty$ für $\Delta = 0.5$, großkanonisch. Die Extrapolation wurde wie in Abbildung 5.6 durchgeführt.

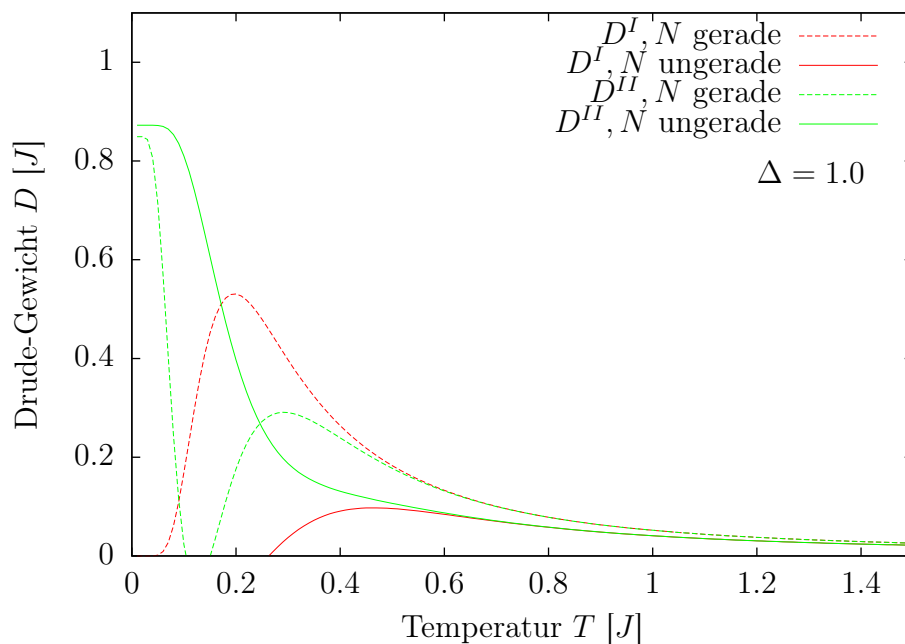


Abbildung 5.8: Drude-Gewicht extrapoliert auf $N = \infty$ für $\Delta = 1$, großkanonisch. Die Extrapolation wurde wie in Abbildung 5.6 durchgeführt.

deutliches Minimum bei $T \approx 0.15J$. Dieses Minimum entsteht, da die Extrapolation bei festem T durchgeführt wird: in Abbildung 5.2 bzw. 5.4 erkennt man, dass sich der Bereich hoher Steigung mit wachsendem N zu kleineren Temperaturen verschiebt, was die Ausprägung des Minimums verursacht. Analog wird auch das Maximum von D^I für gerade N verstärkt. Die Extrapolation von D^I ist für kleine gerade N relativ ungenau, da hier die Abhängigkeit von N , also $A(T)$, sehr groß wird und sich kleine Fehler von diesem Parameter $A(T)$ deutlich in der Extrapolation auswirken. Generell ist die Extrapolation für $T \lesssim 0.4J$ in Frage zu stellen, da die Extrapolation für ungerades und gerades N sehr unterschiedliche Ergebnisse liefert.

5.3 Vergleich großkanonisch – kanonisch

In diesem Abschnitt soll der Unterschied zwischen großkanonischer und kanonischer Rechnung untersucht werden. Für die großkanonische Rechnung werden alle möglichen Eigenwerte von S^z zugelassen, also $S^z \in \{-N/2, \dots, N/2\}$. Für die kanonische Rechnung wird dagegen der Eigenwert von S^z fixiert. Am meisten Zustände kann das System bei minimalen Betrag von S^z einnehmen, da hier die Dimension des Hilbertraums am größten ist (vgl. Abschnitt 3.1). Für ungerade N wird deshalb die kanonische Rechnung bei $S^z = 1/2$ durchgeführt. Bei geraden N ist die Wahl $S^z = 0$ nicht sinnvoll, denn in diesem Fall verschwindet der Ausdruck D^I für das Drude-Gewicht aufgrund von Teilchen-Loch-Symmetrie (s. [5]). Für gerades N wird die Rechnung deshalb bei $S^z = 1$ durchgeführt.

In Abbildung 5.9 sind die kanonischen Ergebnisse für die freien Fermionen, also bei $\Delta = 0$, dargestellt. Auffällig ist, dass im Vergleich zur großkanonischen Rechnung (s. Abbildung 4.3) der Hochtemperaturgrenzwert C^S nicht mehr unabhängig von der Kettenlänge N ist. Da D^{II} bei kleinen Temperaturen besser in N konvergiert, wird nur noch D^{II} betrachtet. Es sei jedoch angemerkt, dass auch bei kanonischer Rechnung für große Temperaturen $T \gtrsim 0.5J$ die Ausdrücke $D^I(N, T)$ und $D^{II}(N, T)$ übereinstimmen.

Abbildung 5.10 zeigt den Vergleich zwischen kanonischer und großkanonischer Rechnung für die Hochtemperaturgrenzwerte C^S aus Gl. (5.1) für ungerade N . Extrapoliert man das Hochtemperaturverhalten der kanonischen Rechnung, so erhält man für $\Delta = 0$ noch den selben Wert $C^S(N = \infty)$ wie bei der großkanonischen Rechnung, obwohl nun eine deutliche N -Abhängigkeit aufgetreten ist. Diese N -Abhängigkeit wird für $\Delta = 0$ durch die lineare Approximation aus Gl. (5.2) sehr gut beschrieben. Die N -Abhängigkeit ist im Vergleich zu $\Delta = 0.5$ und $\Delta = 1$ also noch sehr regelmässig. Für $\Delta = 0.5$ sind die Hochtemperaturgrenzwerte sogar auch für endliche Kettenlänge bei beiden Rechnungen nahezu identisch. Lediglich bei kleiner Kettenlänge liegen die Werte etwas höher.

Im isotropen Fall $\Delta = 1$ liegen die Werte von C^S für kanonische Rechnung im Vergleich zur großkanonischen Rechnung dagegen deutlich niedriger – im Gegensatz zu $\Delta = 0$ und $\Delta = 0.5$, wo die kanonische Rechnung höhere Werte für $C^S(N)$ ergibt. Die Extrapolation für $\Delta = 1$ liefert für kanonische Rechnung einen negativen Wert für $C^S(N = \infty)$. Ein negativer Wert für das Drude-Gewicht macht jedoch per Definition keinen Sinn: die Leitfähigkeit sollte positiv sein. Deshalb muss der Schluss gezogen werden, dass die Extrapolation auf $N = \infty$ hier falsch ist. Auffällig bei $\Delta = 1$ ist auch, dass die kanoni-

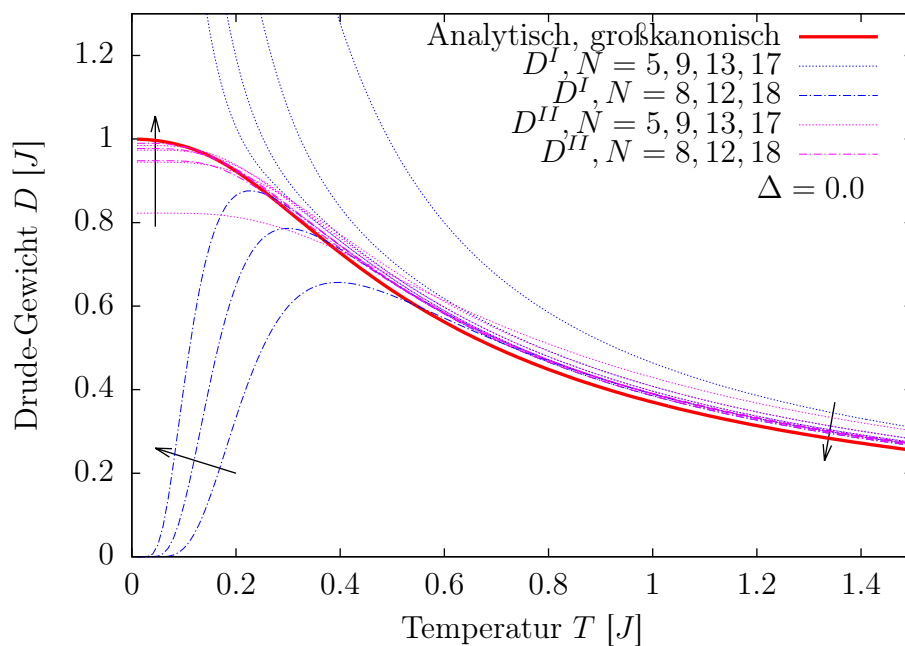


Abbildung 5.9: Vergleich des Drude-Gewicht kanonisch ($S^z = \frac{1}{2}$ (ungerade) bzw. $S^z = 1$ (gerade)) mit analytischem Grenzwert der großkanonischen Rechnung für $\Delta = 0$.

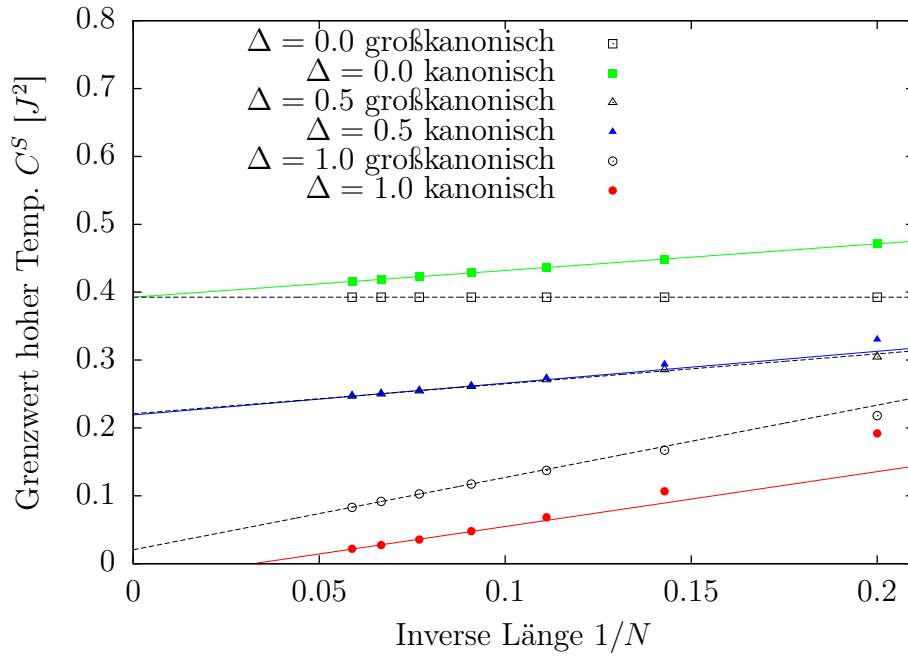


Abbildung 5.10: Vergleich Hochttemperaturgrenzwert C^S großkanonisch – kanonisch ($S^z = \frac{1}{2}$) für ungerade N .

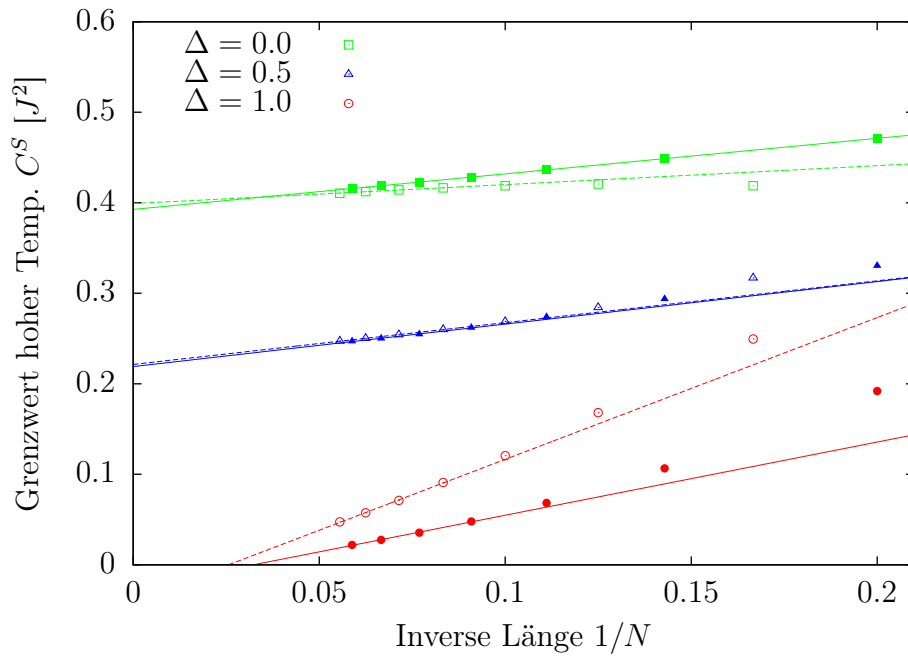


Abbildung 5.11: Hochttemperaturgrenzwert C^S kanonisch: Vergleich zwischen ungeradem N für $S^z = \frac{1}{2}$ (gefüllt / durchgezogen) und geradem N für $S^z = 1$ (ungefüllt / gestrichelt).

schen Werte für C^S bei kleineren N über der Approximation der N -Abhängigkeit liegen, während sie bei der kanonischen Rechnung unter der Approximation liegen. Dies deutet darauf hin, dass der „tatsächliche“ Wert zwischen den beiden extrapolierten Werten liegt. Vom Betrag her sind die Werte von C^S für $\Delta = 1$ im Vergleich zu $\Delta = 0$ und $\Delta = 0.5$ deutlich kleiner.

Ein Vergleich zwischen ungeraden N ($S^z = \frac{1}{2}$) und geraden N ($S^z = 1$) in Abbildung 5.11 zeigt für die kanonische Rechnung relativ gute Übereinstimmung. Im Gegensatz zur großkanonischen Rechnung (Abbildung 5.5) stimmen hier die Werte für $\Delta = 0.5$ am besten überein. Die freien Fermionen ($\Delta = 0$) zeigen für gerade Ketten eine kompliziertere N -Abhängigkeit als für ungerade N .

Für $\Delta = 1$ liegen die Werte für die geraden endlichen N deutlich höher. Die Extrapolation ergibt jedoch wie bei den ungeraden N einen negativen Wert für $C^S(N = \infty)$, weshalb die Extrapolation falsch sein muss.

In Abbildung 5.12 und 5.13 ist das extrapolierte Drude-Gewicht D^{II} für großkanonische und kanonische Rechnung bei ungeraden bzw. geraden N gegen die Temperatur aufgetragen. Für niedrige Temperaturen $T \lesssim 0.2J$ und ungerade N stimmen die Ergebnisse fast vollkommen überein. Dies ist dadurch zu begründen, dass der Zustand mit der niedrigsten Energie im Block mit betragsminimalen Eigenwert von S^z liegt. Für niedrige Temperaturen trägt fast nur dieser Zustand zu den Ergebnissen bei – und er wird sowohl bei der großkanonischen als auch bei der kanonischen Rechnung berücksichtigt. Für gerade N wurde der Eigenraum zu $S^z = 1$ betrachtet. Dieser enthält nicht die Zustände mit der niedrigsten Energie, deshalb liefert D^{II} bei kanonischer Rechnung für niedrige Temperaturen ein leicht abweichendes Ergebnis.

Für $\Delta = 0.5$ ergibt sich für ungerade N bei allen Temperaturen relativ gute Übereinstimmung zwischen; im Bereich $0.6J \lesssim T \lesssim 0.8J$ ist die Abweichung ca. 7% und wird bei höhern Temperaturen wieder kleiner. Die Extrapolation der geraden N zeigt im Vergleich zur großkanonischen Rechnung eine deutliche Abweichung von etwa 40% bei $T \approx 0.5J$; das Ergebnis der kanonischen Rechnung liegt jedoch deutlich näher bei dem der ungeraden Kettenlängen. Auffällig ist, dass das Minimum in der Extrapolation der großkanonischen Rechnung im Fall der kanonischen Rechnung nicht auftritt: Für die endlichen Ketten ergibt sich bei geraden N und kanonischer Rechnung keine so starke Steigung wie bei den geraden N der großkanonischen Rechnung; die geraden Ketten stimmen bei der kanonischen Rechnung deutlich besser mit den ungeraden Ketten überein.

Wie schon beim Hochtemperaturverhalten angesprochen ergibt die Extrapolation für $\Delta = 1$ bei hohen Temperaturen sowohl für ungerade als auch für gerade N negative Werte und muss deshalb falsch sein. Die Frage, ob das Drude-Gewicht für hohe Temperaturen im Limes $N \rightarrow \infty$ verschwindet oder nicht, kann hier durch Exakte Diagonalisierung nicht beantwortet werden, da nur zu kleine Kettenlängen N berechnet werden können, so dass die N -Abhängigkeit nicht ausreichend genau bestimmt werden kann. Deutlich wird aber, dass das Drude-Gewicht im Vergleich zu $\Delta = 0$ und $\Delta = 0.5$ wesentlich kleiner ist.

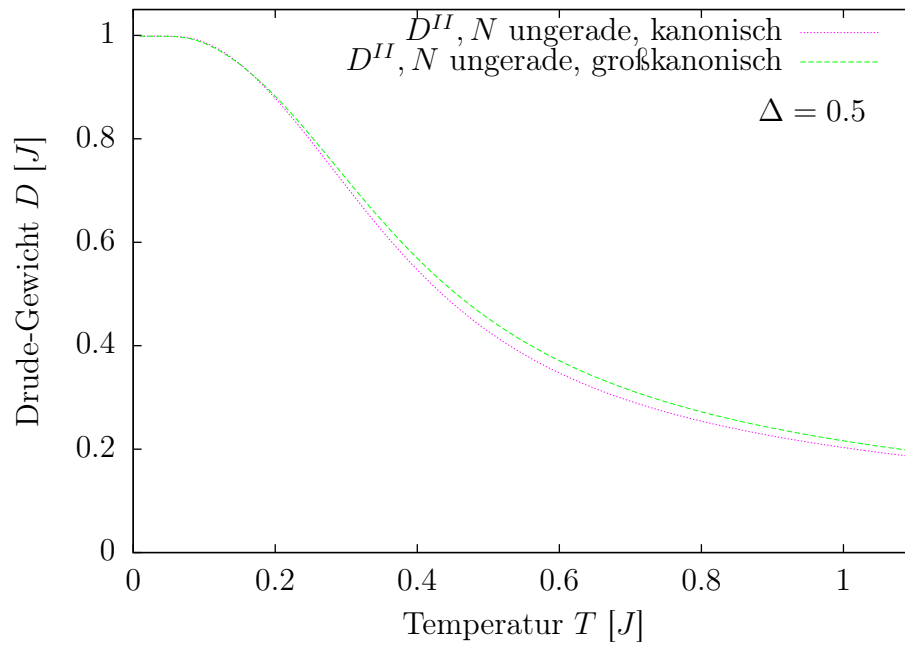
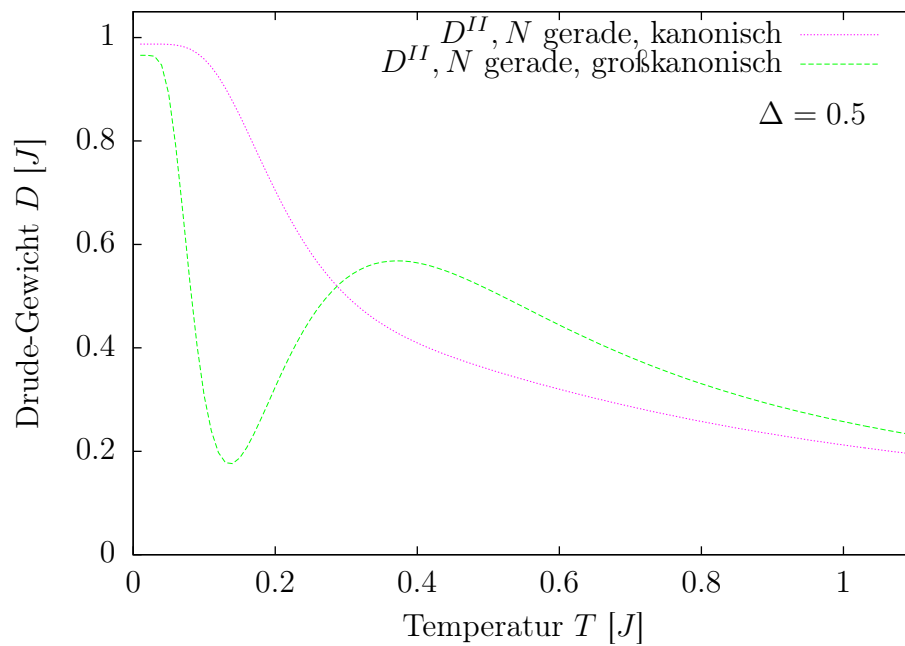


Abbildung 5.12: Vergleich der Extrapolationen großkanonisch – kanonisch für $\Delta = 0.5$ für ungerade N (oben) und gerade N (unten).



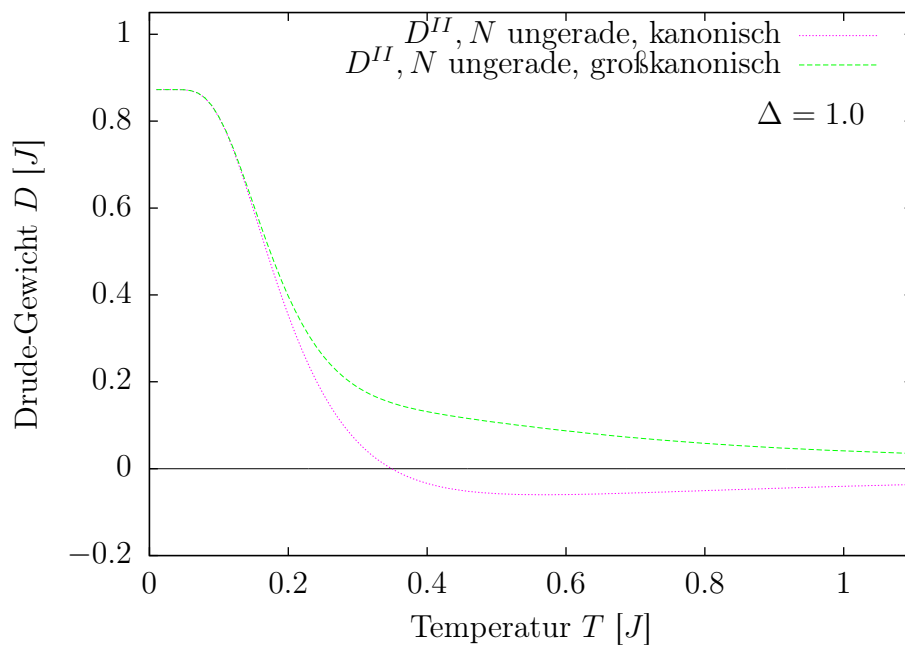
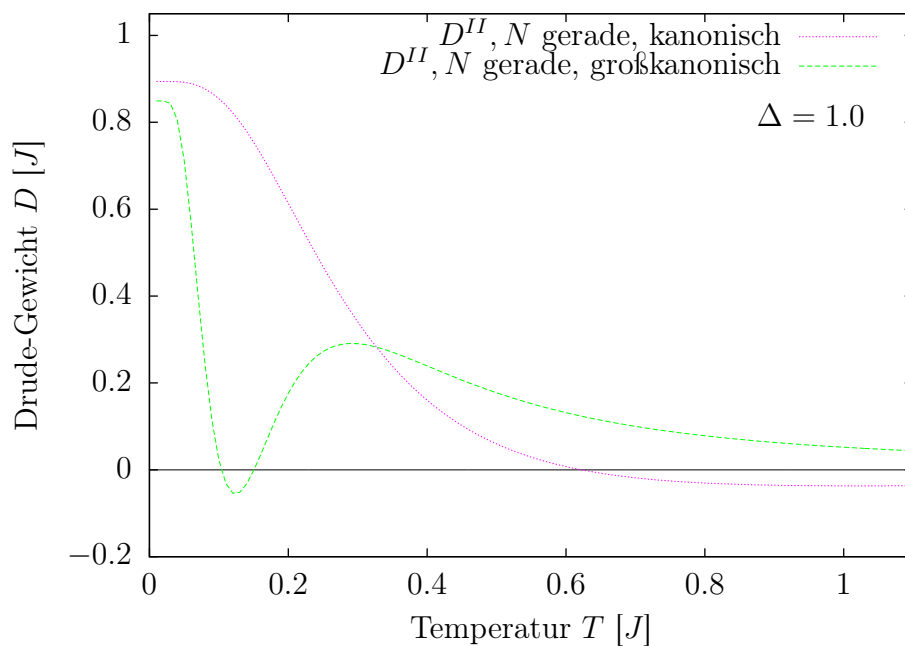


Abbildung 5.13: Vergleich der Extrapolationen großkanonisch – kanonisch für $\Delta = 1.0$ für ungerade N (oben) und gerade N (unten).



5.4 Anteil des Drude-Gewichts an der Gesamtleitfähigkeit

Nach der Summenregel Gl. (2.81) ist das Integral der Leitfähigkeit über alle Frequenzen im Wesentlichen durch den Erwartungswert der kinetischen Energie gegeben. Da die Summenregel nur für den Ausdruck D^{II} aus Gl. (2.76) auch bei endlichem N erfüllt ist (vgl. [1], Abschnitt 2.3), wird nur D^{II} betrachtet. Der Anteil der Anteil des Drude-Gewichts an der Leitfähigkeit ist somit nach der Summenregel:

$$\frac{D^{II}(N, T)}{\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Re} \sigma} = \frac{D^{II}(N, T)}{\frac{\pi}{N} \langle -\mathcal{T} \rangle} \quad (5.4)$$

In Abbildung 5.14 ist der Anteil des Drude-Gewichts an diesem Integral für das maximale berechnete N dargestellt. Zusätzlich ist das Ergebnis einer Extrapolation bei festem T eingezeichnet. Sowohl für $\Delta = 0.5$ als auch für $\Delta = 1$ ist der Anteil des Drudegewichts im Limes $T \rightarrow 0$ sehr hoch, für $\Delta = 0.5$ sogar 99%. Das Minimum der Ketten mit geraden N bei $T \approx 0.2J$ und der Anstieg bei kleineren Temperaturen verschiebt sich mit wachsenden N zu niedrigeren Temperaturen. Da bei festgehaltener Temperatur extrapoliert wurde, ergibt die Extrapolation auch hier (wie bei der Extrapolation des Drude-Gewichts) ein zu sehr verstärktes Minimum.

Für hohe Temperaturen wird der Anteil des Drudegewichts konstant bezüglich der Temperatur, da die einzige Temperaturabhängigkeit in Faktoren $e^{-\beta E_n}$ liegt, die im Limes $T \rightarrow \infty$ gegen 1 konvergieren. Für $\Delta = 0.5$ ist der Hochtemperaturgrenzwert der Extrapolation im Bereich von 55-60%. Für $\Delta = 1$ sinkt der Anteil bei hohen Temperaturen deutlich weiter ab, er wird erst bei $T \approx 10J$ konstant (hier nicht mehr dargestellt). Die Extrapolation ergibt dort einen Anteil von 5-6%.

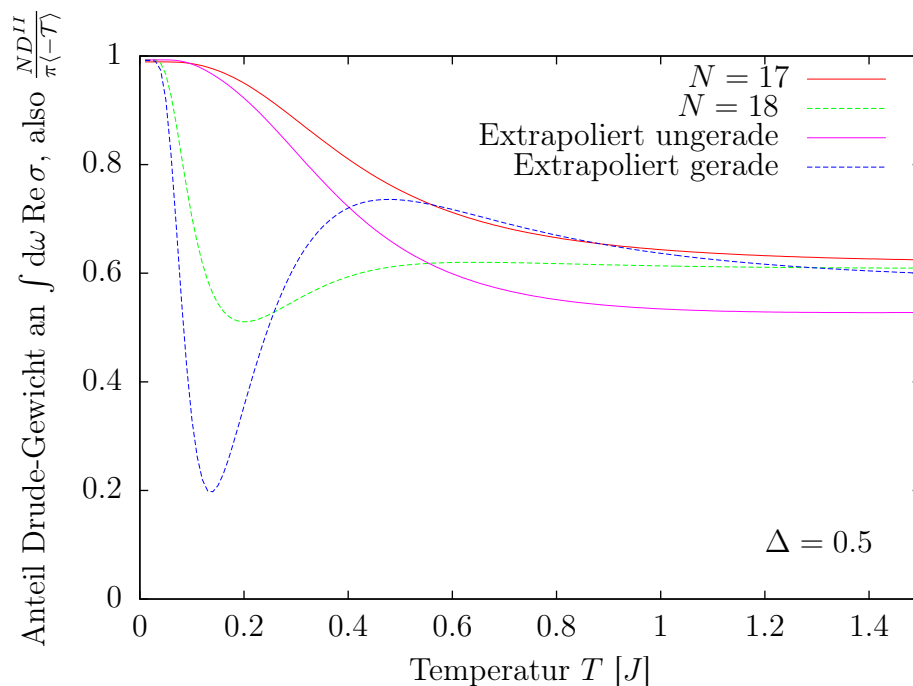
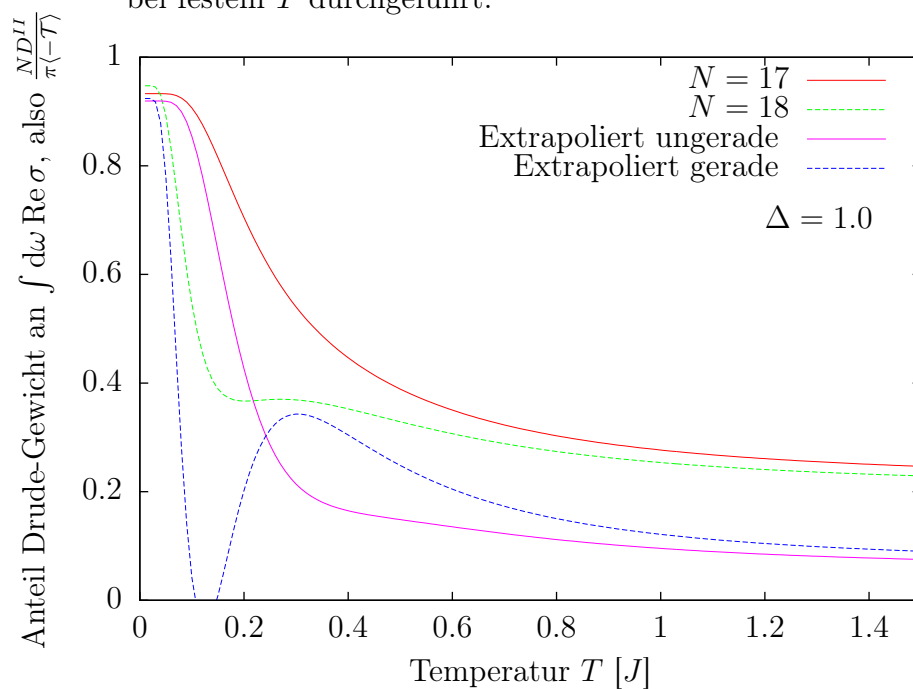


Abbildung 5.14: Anteil des Drude-Gewicht an der Gesamtleitfähigkeit für $\Delta = 0.5$ (oben) und $\Delta = 1$ (unten), großkanonisch. Die Extrapolation wurde linear mit den Werten von $N = 11, 13, 15, 17$ bzw. $N = 12, 14, 16, 18$ bei festem T durchgeführt.



6 Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Drude-Gewicht der Spin-1/2- XXZ -Kette durch exakte Diagonalisierung untersucht. Zur numerischen Berechnung geeignete Ausdrücke für das Drude-Gewicht wurden in Abschnitt 2 hergeleitet, die Grundlagen für die Implementierung der exakten Diagonalisierung wurden in Abschnitt 3 dargestellt. Mit dem erstellten Programm wurden Ketten bis zur Länge $N = 18$ berechnet. In Abschnitt 4 wurde der Fall der freien Fermionen ($\Delta = 0$) betrachtet und analytische Ergebnisse für $N = \infty$ mit den Ergebnissen der Implementierung für die Wärmekapazität und das Drude-Gewicht verglichen.

In Abschnitt 5 wurden die numerischen Ergebnisse für das Drude-Gewicht für $\Delta = 0.5$ und für den isotropen Fall $\Delta = 1$ dargestellt. Zunächst konnten die Ergebnisse aus [2] für das Drude-Gewicht als Funktion der Temperatur und das Verhalten bei hohen Temperaturen reproduziert werden. Die Ergebnisse wurden zusätzlich bei fester Temperatur auf $N = \infty$ extrapoliert. Die Ausdrücke $D^I(N, T)$ und $D^{II}(N, T)$ aus Gl. (2.62) und Gl. (2.76) stimmen bei hohen Temperaturen $T \gtrsim 0.5J$ überein, bei niedrigen Temperaturen ist $D^{II}(N, T)$ besser zur Extrapolation geeignet. Für $\Delta = 0.5$ ergibt die Extrapolation deutlich positive Werte, bei $\Delta = 1$ ist der Hochtemperaturgrenzwert C^S dagegen klein.

Die Ergebnisse großkanonische Rechnung wurden mit denen einer kanonischen Rechnung verglichen. Für ungerade N wurde die kanonische Rechnung bei $s^z = \frac{1}{2}$ durchgeführt, für gerade N bei $s^z = 1$. Bei niedrigen Temperaturen $T \lesssim 0.2J$ stimmen kanonische und großkanonische Rechnung für ungerade N überein, da die niedrigsten Energien in den Eigenräumen zu minimalem $|s^z|$ liegen. Für gerade N ergeben sich auch für $T \rightarrow 0$ leichte Abweichungen für D^{II} , da die kanonische Rechnung im Eigenraum zu $s^z = 1$ durchgeführt wurde.

Der Hochtemperaturgrenzwert ist bei kanonischer Rechnung für $\Delta = 0$ im Gegensatz zur großkanonischen Rechnung abhängig von N , die Extrapolation auf $N = \infty$ liefert jedoch das gleiche Ergebnis. Für $\Delta = 0.5$ ergibt die Extrapolation des Drude-Gewichts für ungerade N nur Abweichung von maximal 7%, für gerade N ergeben sich Abweichungen bis zu 40%; der Hochtemperaturgrenzwert ist jedoch für beide Rechnungen nahezu identisch.

Bei kanonischer Rechnung ergibt die durchgeführte Extrapolation für $\Delta = 1$ bei hohen Temperaturen negative Werte; die Approximation der N -Abhängigkeit ist hier zu ungenau. Die Hochtemperaturgrenzwerte für $\Delta = 1$ liegen auch bei endlichen Kettenlänge für gerade N deutlich höher als für ungerade N .

Der Anteil des Drude-Gewichts an der gesamten Leitfähigkeit liegt für $T \rightarrow 0$ über 90% für $\Delta = 1$, für $\Delta = 0.5$ sogar bei 99%. Bei niedrigen Temperaturen macht das Drude-Gewicht also fast die gesamte Leitfähigkeit aus. Für hohe Temperaturen fällt der Anteil auf einen konstanten Wert ab. Die Extrapolation ergibt für $\Delta = 0.5$ noch knapp 60%, für $\Delta = 1$ lediglich noch 5%. Dieser Grenzwert wird für $\Delta = 1$ jedoch erst bei höheren Temperaturen ($T \approx 10J$) erreicht als bei $\Delta = 0.5$ ($T \approx 2$).

Danksagung

Ich möchte mich bei Prof. Dr. Ulrich Schollwöck für die Möglichkeit bedanken, diese Bachelorarbeit an seinem Lehrstuhl durchzuführen. Die Bereitstellung eines Arbeitsplatzes am Lehrstuhl war sehr hilfreich. Dem ganzen Lehrstuhl danke ich für die freundliche Aufnahme.

Größter Dank gilt Dr. Fabian Heidrich-Meisner für die intensive Betreuung und Einführung in das Thema. Ihm und Stephan Langer danke ich herzlich dafür, dass sie sich stets die Zeit nahmen, um meine Fragen zu beantworten. Vielen Dank für konstruktive Kritik und Verbesserungsvorschläge zu diese Arbeit.

Zuletzt möchte ich mich auch bei meiner Familie und meinen Freunden bedanken, die mir den Rücken frei hielten und mich bestmöglich unterstützten.

A Literatur

- [1] F. Heidrich-Meisner. *Transport properties of low-dimensional quantum spin systems*. Dissertation, TU Braunschweig, 2005.
- [2] F. Heidrich-Meisner, A. Honecker, D. D. Cabra und W. Brenig. Zero-frequency transport properties of one dimensional spin- $\frac{1}{2}$ systems. *Phys. Rev. B*, 68:134436, 2003.
- [3] F. Heidrich-Meisner, A. Honecker und W. Brenig. Transport in quasi one-dimensional spin-1/2 systems. *Eur. Phys. J. Special Topics*, 151:135, 2007.
- [4] J. Herbrych, P. Prelovšek und X. Zotos. Finite-temperature drude weight within the anisotropic heisenberg chain. *Phys. Rev. B*, 84:155125, 2011.
- [5] X. Zotos, F. Naef und P. Prelovšek. Transport and conservation laws. *Phys. Rev. B*, 55:11029, 1997.
- [6] T. Prosen. Open xxz spin chain: Nonequilibrium steady state and a strict bound on ballistic transport. *Phys. Rev. Lett.*, 106:217206, 2011.
- [7] C. Karrasch, J. H. Bardason und J. E. Moore. Finite temperature dynamical dmrg and the drude weight of spin-1/2 chains. *Phys. Rev. Lett.*, 108:227206, 2012.
- [8] B. N. Narozhny, A. J. Millis, and N. Andrei. Transport in the XXZ model. *Phys. Rev. B*, 58:R2921, 1998.
- [9] F. Schwabl. *Advanced Quantum Mechanics*. Springer, Berlin, 2008.
- [10] G. D. Mahan. *Many-Particle Physics*. Kluwer, New York, 2000.
- [11] P. Jordan und E. Wigner. Über das Paulische Äquivalenzverbot. *Zeitschrift für Physik*, 47:631, 1928.
- [12] W. Kohn. Theory of the insulting state. *Physical Review*, 133:A171, 1964.
- [13] H. Castella, X. Zotos und P. Prelovšek. Integrability and ideal conductance at finite temperatures. *Phys. Rev. Lett.*, 74:972, 1995.
- [14] J. J. Sakurai und J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Pearson, San Francisco, second edition, 2010.
- [15] B. Shastry und B. Sutherland. Twisted boundary conditions and effective mass in heisenberg-ising and hubbard rings. *Phys. Rev. Lett.*, 65:243, 1990.
- [16] A. W. Sandvik. Computational studies of quantum spin systems. *AIP Conf. Proc.*, 1297:135, 2010.

- [17] U. Schollwöck. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. *Annals of Physics*, 326:96, 2011.
- [18] E. Anderson. *LAPACK Users' Guide*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, third edition. <http://www.netlib.org/lapack/lug/>.
- [19] F. Schwabl. *Statistische Mechanik*. Springer, Berlin, 2006.

B Abbildungsverzeichnis

4.1	Spezifische Wärmekapazität $c_V = C_V/N$ für $\Delta = 1$, großkanonisch	22
4.2	Spezifische Wärmekapazität für $\Delta = 0$, großkanonisch	23
4.3	Drude-Gewicht für $\Delta = 0$, großkanonisch	25
5.1	Drude-Gewicht für $\Delta = 0.5$, ungerade N , großkanonisch	27
5.2	Drude-Gewicht für $\Delta = 0.5$, gerade N , großkanonisch	27
5.3	Drude-Gewicht für $\Delta = 1$, ungerade N , großkanonisch	28
5.4	Drude-Gewicht für $\Delta = 1$, gerade N , großkanonisch	28
5.5	Hochtemperaturverhalten des Drude-Gewichts , großkanonisch	29
5.6	Extrapolation des Drude-Gewichts für Temperatur $T = 0.5J$, großkanonisch	30
5.7	Drude-Gewicht extrapoliert auf $N = \infty$ für $\Delta = 0.5$, großkanonisch . . .	31
5.8	Drude-Gewicht extrapoliert auf $N = \infty$ für $\Delta = 1$, großkanonisch	31
5.9	Vergleich des Drude-Gewichts kanonisch mit analytischem Grenzwert der großkanonischen Rechnung für $\Delta = 0.0$	33
5.10	Vergleich Hochtemperaturgrenzwert C^S großkanonisch – kanonisch für un- gerade N	34
5.11	Hochtemperaturgrenzwert C^S kanonisch: Vergleich ungerade–gerade . . .	34
5.12	Vergleich der Extrapolationen großkanonisch – kanonisch für $\Delta = 0.5$, ungerade und gerade N	36
5.13	Vergleich der Extrapolationen großkanonisch – kanonisch für $\Delta = 1.0$, ungerade und gerade N	37
5.14	Anteil des Drude-Gewicht an der Gesamtleitfähigkeit für $\Delta = 0.5$ und $\Delta = 1$, großkanonisch	39

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die Arbeit in allen Teilen selbstständig gefertigt und keine anderen als in der Arbeit angegebene Hilfsmittel benutzt habe.

München, den _____

(Johannes Hauschild)