

Integrable Quantenkettens

Thermodynamik und Korrelationsfunktionen

Jens Damerau



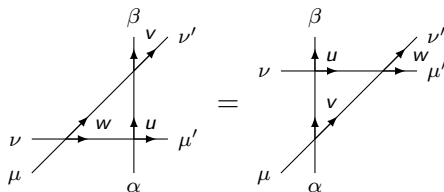
Bergische Universität Wuppertal
Graduiertenkolleg Darstellungstheorie



14. Januar 2009

- 1 Einleitung
- 2 Berechnung der Thermodynamik
 - Uimin-Sutherland-Modell
 - Quanten-Transfermatrix-Zugang
 - Nichtlineare Integralgleichungen
 - Numerische Ergebnisse
- 3 Berechnung von Korrelationsfunktionen
 - XXZ-Kette
 - Vielfachintegrale und Faktorisierung
 - Numerische Ergebnisse
- 4 Zusammenfassung und offene Fragen

- **Ziel:**
Untersuche thermodynamische Größen und Korrelationsfunktionen von quantenmechanischen Vielteilchensystemen.
- **Problem:**
Zahl der Freiheitsgrade wächst exponentiell mit der Systemgröße. Eigenschaften daher im allgemeinen nicht exakt behandelbar.
- **Integrable Modelle:**
Beschränkung auf Quantenkette (eindimensional) mit zusätzlicher Symmetrie (Yang-Baxter-Algebra) ermöglicht exakten Zugang.



Hamilton-Operator

$$\mathcal{H} = J \sum_{j=1}^L \pi_{j,j+1} - \sum_{j=1}^L \sum_{\alpha=1}^n \mu_{\alpha} n_{j,\alpha}$$

- Eindimensionale Kette mit periodischen Randbedingungen.
- Graduierte lokale Basis $|\alpha_j\rangle$ mit $\alpha_j \in \{1, \dots, n\}$.
- Nächst-Nachbar-Wechselwirkung durch Permutationsoperator

$$\pi_{j,j+1} |\dots \alpha_j \alpha_{j+1} \dots\rangle = (-1)^{\rho(\alpha_j)\rho(\alpha_{j+1})} |\dots \alpha_{j+1} \alpha_j \dots\rangle.$$

- Allgemeine chemische Potentiale μ_{α} .
- Modell ist $SU(r|s)$ -symmetrisch ($n = r + s$) und integrabel.

- Spin-1/2-Heisenbergkette, [$n = 2, r = 2$]
 - ▶ $\mathcal{H} = J \sum_{j=1}^L (2\mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} + 1/2) - h \sum_{j=1}^L S_j^z.$
- Supersymmetrisches t - J -Modell ($2t = J$), [$n = 3, r = 2$]
 - ▶ $\mathcal{H} = t \sum_{j=1}^L \sum_{\sigma} \mathcal{P}(c_{j,\sigma}^{\dagger} c_{j+1,\sigma} + c_{j,\sigma} c_{j+1,\sigma}^{\dagger}) \mathcal{P} + J \sum_{j=1}^L (\mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} - n_j n_{j+1}/4).$
- $SU(4)$ -Spin-Orbital-Modell, [$n = 4, r = 4$]
 - ▶ $\mathcal{H} = J \sum_{j=1}^L (2\mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} + 1/2)(2\boldsymbol{\tau}_j \boldsymbol{\tau}_{j+1} + 1/2) - h \sum_{j=1}^L (g_S S_j^z + g_{\tau} \tau_j^z).$
- Integrable Spin-1/2-Leiter. [$n = 4, r = 4$]
- Essler-Korepin-Schoutens-Modell. [$n = 4, r = 2$]
- Spin-Orbital-Modell mit mobilen Löchern. [$n = 5, r = 4$]

Quanten-Transfermatrix-Zugang

- **Ziel:** Berechnung der Zustandssumme, $Z = \text{tr} e^{-\beta\mathcal{H}}$.
- Konstruiere Quanten-Transfermatrix:

$$(\mathcal{T}_{\text{QTM}})_{\alpha}^{\alpha'}(\nu) = \sum_{\{\nu\}} e^{\beta\mu\nu_1} \prod_{j=1}^{N/2} R_{\alpha_{2j-1}\nu_{2j-1}}^{\alpha'_{2j-1}\nu_{2j}}(i\nu - J\beta/N) \tilde{R}_{\alpha_{2j}\nu_{2j}}^{\alpha'_{2j}\nu_{2j+1}}(i\nu + J\beta/N),$$
$$\Rightarrow Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{tr}(\mathcal{T}_{\text{QTM}}(0))^L.$$

Quanten-Transfermatrix-Zugang

- **Ziel:** Berechnung der Zustandssumme, $Z = \text{tr} e^{-\beta\mathcal{H}}$.
- Konstruiere Quanten-Transfermatrix:

$$(\mathcal{T}_{\text{QTM}})_{\alpha}^{\alpha'}(\nu) = \sum_{\{\nu\}} e^{\beta\mu\nu_1} \prod_{j=1}^{N/2} R_{\alpha_{2j-1}\nu_{2j-1}}^{\alpha'_{2j}\nu_{2j}}(i\nu - J\beta/N) \tilde{R}_{\alpha_{2j}\nu_{2j}}^{\alpha'_{2j+1}\nu_{2j+1}}(i\nu + J\beta/N),$$
$$\Rightarrow Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{tr}(\mathcal{T}_{\text{QTM}}(0))^L.$$

- Thermodynamischer Limes:

$$\Rightarrow f = - \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L\beta} \ln Z = - \frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \ln \Lambda_{\max}(0).$$

- Diagonalisierung der QTM mit Bethe Ansatz:

$$\Lambda(\nu) = \sum_{j=1}^n \boxed{j} |_{\nu} = \sum_{j=1}^n \phi_{-}(\nu) \phi_{+}(\nu) \frac{q_{j-1}(\nu - i\epsilon_j)}{q_{j-1}(\nu)} \frac{q_j(\nu + i\epsilon_j)}{q_j(\nu)} e^{\beta\mu_j}.$$

Problem

Bethe-Ansatz erfordert im Limes $N \rightarrow \infty$ die Lösung unendlich vieler gekoppelter Gleichungen.

Berechnung des größten Eigenwertes der QTM

Problem

Bethe-Ansatz erfordert im Limes $N \rightarrow \infty$ die Lösung unendlich vieler gekoppelter Gleichungen.

- $n = r = 2$: [A. Klümper 92]

$$b_{1,1}^{(1)}(x) = \frac{\boxed{1}}{\boxed{2}} \Big|_{x+i/2},$$

- $n = r = 3$: [A. Fujii, A. Klümper 99]

$$b_{1,1}^{(1)}(x) = \frac{\boxed{1}}{\boxed{2} + \boxed{3}} \Big|_{x+i/2},$$

$$b_{1,2}^{(1)}(x) = \frac{\boxed{\frac{1}{2}} \cdot \boxed{\frac{2}{3}}}{\boxed{\frac{1}{3}} \cdot \left(\boxed{\frac{1}{2}} + \boxed{\frac{1}{3}} + \boxed{\frac{2}{3}} \right)} \Big|_x,$$

$$b_{1,2}^{(2)}(x) = \frac{\boxed{1} \cdot \boxed{3}}{\boxed{2} \cdot (\boxed{1} + \boxed{2} + \boxed{3})} \Big|_x,$$

Ausweg

Transformiere Hilfsfunktionen in endliche Anzahl gekoppelter nichtlinearer Integralgleichungen.

$$b_{1,2}^{(1)}(x) = \frac{\boxed{2}}{\boxed{1}} \Big|_{x-i/2}.$$

$$b_{1,3}^{(1)}(x) = \frac{\boxed{3}}{\boxed{1} + \boxed{2}} \Big|_{x-i/2},$$

$$b_{1,1}^{(2)}(x) = \frac{\boxed{\frac{1}{2}}}{\boxed{\frac{1}{3}} + \boxed{\frac{2}{3}}} \Big|_{x+i/2},$$

$$b_{1,3}^{(2)}(x) = \frac{\boxed{\frac{2}{3}}}{\boxed{\frac{1}{2}} + \boxed{\frac{1}{3}}} \Big|_{x-i/2}.$$

Allgemeine Struktur

$$\ln b_{1j}^{(a)}(x) = -\beta \left(JV^{(a)}(x) + c_j^{(a)} \right) - \sum_{b,k} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{K}_{j,k}^{(a,b)}(x-y) \cdot \ln \left(b_{1,k}^{(b)}(y) + 1 \right) \frac{dy}{2\pi}$$

Größter Eigenwert

$$\ln \Lambda_{\max}(0) = -\beta e_0 + \sum_{b,k} \int_{-\infty}^{\infty} V^{(b)}(y) \cdot \ln \left(b_{1,k}^{(b)}(y) + 1 \right) \frac{dy}{2\pi}$$

- Integralgleichungen können durch Iteration gelöst werden.
- Effiziente Auswertung der Faltungsintegrale durch Anwendung der schnellen Fourier-Transformation (FFT).
- **Aber:** Konstruktion geeigneter Hilfsfunktionen kompliziert.

Neue Hilfsfunktionen

- $n = r = 4$: [JD, A. Klümper 06]

$$b_{1,1}^{(1)}(x) = \frac{\boxed{1}}{\boxed{2} + \boxed{3} + \boxed{4}} \Big|_{x+i/2} \quad b_{1,4}^{(1)}(x) = \frac{\boxed{4}}{\boxed{1} + \boxed{2} + \boxed{3}} \Big|_{x-i/2}$$

$$b_{1,2}^{(1)}(x) = \frac{\boxed{1} \cdot (\boxed{2} + \boxed{2} + \boxed{3})}{(\boxed{1} + \boxed{1}) \cdot (\boxed{1} + \boxed{1} + \boxed{1} + \boxed{2} + \boxed{2} + \boxed{3})} \Big|_x$$

$$b_{1,3}^{(1)}(x) = \frac{\boxed{1} \cdot \boxed{3}}{\boxed{1} \cdot (\boxed{1} + \boxed{1} + \boxed{2} + \boxed{2} + \boxed{3})} \Big|_x$$

$$b_{1,1}^{(2)}(x) = \frac{\boxed{1} \cdot \boxed{2}}{\boxed{1} + \boxed{1} + \boxed{2} + \boxed{2} + \boxed{3}} \Big|_{x+i/2}$$

$$b_{1,2}^{(2)}(x) = \frac{\boxed{1} \cdot \boxed{3}}{(\boxed{1} + \boxed{2} + \boxed{3}) \cdot (\boxed{2} + \boxed{2} + \boxed{3})} \Big|_{x+i/2}$$

$$b_{1,3}^{(2)}(x) = \frac{\boxed{1} \cdot \boxed{4}}{(\boxed{2} + \boxed{3}) \cdot (\boxed{1} + \boxed{2} + \boxed{3} + \boxed{4})} \Big|_x$$

$$b_{1,4}^{(2)}(x) = \frac{\boxed{1} \cdot \boxed{2} \cdot \boxed{3} \cdot \boxed{4}}{(\boxed{1} + \boxed{1}) \cdot (\boxed{1} + \boxed{1} + \boxed{1} + \boxed{2}) \cdot (\boxed{2} + \boxed{3} + \boxed{3} + \boxed{4})} \Big|_x$$

$$b_{1,5}^{(2)}(x) = \frac{\boxed{1} \cdot \boxed{2}}{(\boxed{1} + \boxed{1} + \boxed{1} + \boxed{1}) \cdot (\boxed{1} + \boxed{1} + \boxed{2})} \Big|_{x-i/2}$$

$$b_{1,6}^{(2)}(x) = \frac{\boxed{3} \cdot \boxed{4}}{\boxed{1} + \boxed{1} + \boxed{1} + \boxed{2} + \boxed{2}} \Big|_{x-i/2}$$

$$b_{1,1}^{(3)}(x) = \frac{\boxed{1} \cdot \boxed{2} \cdot \boxed{3}}{\boxed{1} + \boxed{1} + \boxed{2}} \Big|_{x+i/2} \quad b_{1,4}^{(3)}(x) = \frac{\boxed{2} \cdot \boxed{3} \cdot \boxed{4}}{\boxed{1} + \boxed{1} + \boxed{1}} \Big|_{x-i/2}$$

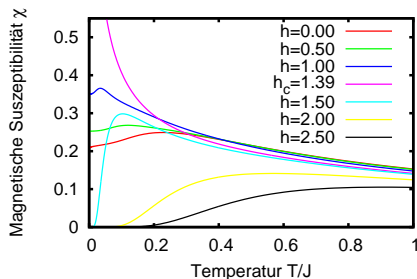
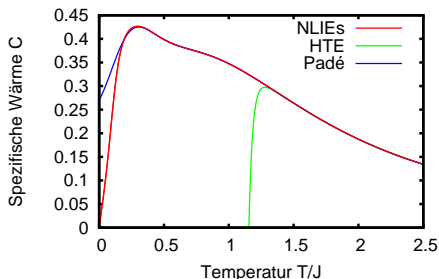
$$b_{1,2}^{(3)}(x) = \frac{\boxed{1} \cdot \boxed{2}}{\boxed{2} \cdot (\boxed{1} + \boxed{1} + \boxed{1} + \boxed{2} + \boxed{2})} \Big|_x$$

$$b_{1,3}^{(3)}(x) = \frac{\boxed{3} \cdot \boxed{4}}{(\boxed{2} + \boxed{2}) \cdot (\boxed{1} + \boxed{1} + \boxed{1} + \boxed{2} + \boxed{2} + \boxed{3})} \Big|_x$$

- $n = 4$, restliche Fälle: Ebenfalls explizit bekannt.
- $n = 5, r = 4, 5$: Conjecture der vollständigen Integralgleichungen.

Numerische Ergebnisse

Beispiel: $SU(4)$ -Spin-Orbital-Modell



- Hervorragende Übereinstimmung mit Hochtemperatur-Entwicklung nach [Z. Tsuboi 06] und darauf basierender Padé-Approximation
- Tieftemperaturasymptotik kompatibel mit konformer Feldtheorie.
- Relative Genauigkeit der NLIE-Ergebnisse etwa 10^{-14} (ohne Magnetfeld) bzw. 10^{-3} bis 10^{-6} (mit Magnetfeld).

Hamilton-Operator

$$\mathcal{H} = J \sum_{j=1}^L \left(\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \Delta (\sigma_j^z \sigma_{j+1}^z - 1) \right) - \frac{h}{2} \sum_{j=1}^L \sigma_j^z$$

- Eindimensionale Kette mit periodischen Randbedingungen.
- Inhomogenität Δ , externes Magnetfeld h .

Hamilton-Operator

$$\mathcal{H} = J \sum_{j=1}^L \left(\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \Delta (\sigma_j^z \sigma_{j+1}^z - 1) \right) - \frac{h}{2} \sum_{j=1}^L \sigma_j^z$$

- Eindimensionale Kette mit periodischen Randbedingungen.
- Inhomogenität Δ , externes Magnetfeld h .

Zentrales Element: Reduzierte Dichtematrix

$$D_{N \epsilon'_1 \dots \epsilon'_m}(\xi_1, \dots, \xi_m | \kappa, \alpha) = \frac{\langle \kappa + \alpha | T_{\epsilon'_1}^{\epsilon'_1}(\xi_1, \kappa) \dots T_{\epsilon'_m}^{\epsilon'_m}(\xi_m, \kappa) | \kappa \rangle}{\langle \kappa + \alpha | \prod_{j=1}^m t(\xi_j, \kappa) | \kappa \rangle}$$

Erwartungswert eines Operators $X_{[1,m]}$

$$\langle X_{[1,m]} \rangle_{T,h} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \lim_{\xi_j \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \text{tr}_{1, \dots, m} \{ D_N(\xi_1, \dots, \xi_m | h/2\eta T, \alpha) X_{[1,m]} \}$$

Vielfachintegraldarstellung der Dichtematrix

$$\begin{aligned} D_{N \in \epsilon_1 \dots \epsilon_m}^{\epsilon'_1 \dots \epsilon'_m}(\xi_1, \dots, \xi_m | \kappa, \alpha) \\ = \left[\prod_{j=1}^p \int_{\mathcal{C}} dm(\lambda_j) F_{\ell_j}^+(\lambda_j) \right] \left[\prod_{j=p+1}^m \int_{\mathcal{C}} d\bar{m}(\lambda_j) F_{\ell_j}^-(\lambda_j) \right] \\ \times \frac{\det_{j,k=1,\dots,m}[-G(\lambda_j, \xi_k)]}{\prod_{1 \leq j < k \leq m} \sinh(\lambda_j - \lambda_k - \eta) \sinh(\xi_k - \xi_j)} \end{aligned}$$

Vielfachintegraldarstellung der Dichtematrix

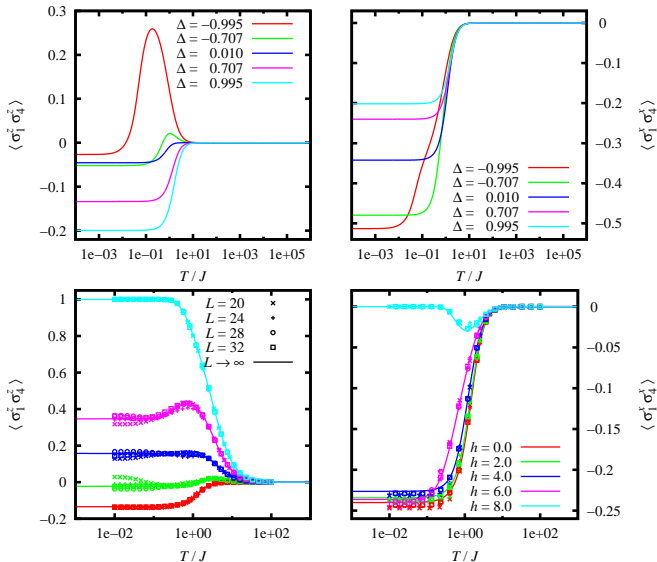
$$\begin{aligned} D_{N \in \epsilon_1 \dots \epsilon_m}^{\epsilon'_1 \dots \epsilon'_m}(\xi_1, \dots, \xi_m | \kappa, \alpha) \\ = \left[\prod_{j=1}^p \int_{\mathcal{C}} dm(\lambda_j) F_{\ell_j}^+(\lambda_j) \right] \left[\prod_{j=p+1}^m \int_{\mathcal{C}} d\bar{m}(\lambda_j) F_{\ell_j}^-(\lambda_j) \right] \\ \times \frac{\det_{j,k=1,\dots,m}[-G(\lambda_j, \xi_k)]}{\prod_{1 \leq j < k \leq m} \sinh(\lambda_j - \lambda_k - \eta) \sinh(\xi_k - \xi_j)} \end{aligned}$$

Faktorisierung

- Vielfachintegrale lassen sich für beliebiges m faktorisieren!
- Faktorisierung bis $m = 4$ explizit bekannt. (länglich!)
- Numerische Berechnung von Korrelationsfunktionen mit Hilfe nichtlinearer Integralgleichungen möglich.

Numerische Ergebnisse

Beispiel: Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \sigma_1^z \sigma_4^z \rangle$ und $\langle \sigma_1^x \sigma_4^x \rangle$



- Zusammenfassung:
 - ▶ Berechnung von Thermodynamik und Korrelationsfunktionen integrierbarer Quantenkette mit Hilfe nichtlinearer Integralgleichungen.
 - ▶ Struktur hervorragend geeignet für numerische Auswertung.
 - ▶ Extrem hohe Genauigkeit bei nahezu beliebiger Parameterwahl.

- Zusammenfassung:
 - ▶ Berechnung von Thermodynamik und Korrelationsfunktionen integrierbarer Quantenkette mit Hilfe nichtlinearer Integralgleichungen.
 - ▶ Struktur hervorragend geeignet für numerische Auswertung.
 - ▶ Extrem hohe Genauigkeit bei nahezu beliebiger Parameterwahl.
- Offene Fragen:
 - ▶ Thermodynamik: Allgemeine Konstruktion der Hilfsfunktionen?
 - ▶ Korrelationsfunktionen: Auch für andere Modelle als die XXZ-Kette?

- Zusammenfassung:
 - ▶ Berechnung von Thermodynamik und Korrelationsfunktionen integrierbarer Quantenkette mit Hilfe nichtlinearer Integralgleichungen.
 - ▶ Struktur hervorragend geeignet für numerische Auswertung.
 - ▶ Extrem hohe Genauigkeit bei nahezu beliebiger Parameterwahl.
- Offene Fragen:
 - ▶ Thermodynamik: Allgemeine Konstruktion der Hilfsfunktionen?
 - ▶ Korrelationsfunktionen: Auch für andere Modelle als die XXZ-Kette?
- Danke:
 - ▶ Für die Unterstützung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft.
 - ▶ Allen Mitarbeitern des Graduiertenkollegs.
 - ▶ Allen Mitarbeitern der Arbeitsgruppe Statistische Physik.