

# Jordan-Wigner-Lösung der XX-Spinkette

Jens Teiser

23. Mai 2005

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Das Hubbard-Modell</b>	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Das Heisenberg-Modell</b>	<b>6</b>
<b>4</b>	<b>Die Jordan-Wigner-Transformation</b>	<b>8</b>
<b>5</b>	<b>Lösung des Problems für die XX-Spinkette</b>	<b>12</b>
<b>6</b>	<b>Thermodynamik</b>	<b>15</b>
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>17</b>
	<b>Anhang</b>	<b>20</b>
<b>A</b>	<b>2. Quantisierung</b>	<b>20</b>
<b>B</b>	<b>Der Phasenfaktor</b>	<b>20</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>21</b>

# 1 Einführung

Ziel dieser Arbeit ist es, die Thermodynamik eines Spin-Modells,  $H = -J \sum_j \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ , am Beispiel der XX-Spinkette zu verstehen. Dazu gliedert sich diese Ausarbeitung in mehrere, zum Teil voneinander unabhängige Einzelthemen. Zunächst soll der Antiferromagnetismus in einem Festkörper motiviert werden. Dazu betrachtet man einen Festkörper als Vielteilchensystem, bestehend aus Elektronen und Gitterionen. Für dieses Vielteilchensystem lässt sich ein Hamilton-Operator aufstellen:  $H = H_e + H_i + H_{ei}$ . Dieser setzt sich aus verschiedenen Teiloperatoren zusammen. Dabei beschreibt  $H_e$  die Wechselwirkungen der Elektronen untereinander,  $H_i$  die der Gitterionen untereinander und  $H_{ei}$  die Wechselwirkungen zwischen den Elektronen und den Gitterionen. Dabei ergibt sich aus dem Teiloperator  $H_{ei}$  ein Gitterpotential, das aber hier nicht weiter behandelt werden soll. Da hier der Magnetismus im Festkörper betrachtet werden soll, sind nur die Wechselwirkungen der Elektronen untereinander relevant. Der Hamilton-Operator für die Elektron-Elektron-Wechselwirkungen setzt sich aus zwei Teilen zusammen, der kinetischen Energie der Elektronen und der Coulomb-Abstoßung der Elektronen untereinander. Es gilt nach [7]:

$$H_e = \sum_i^{N_e} \frac{\vec{P}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|^2} .$$

Um aus dieser Beschreibung heraus den Antiferromagnetismus im Festkörper zu motivieren, wird hier das Hubbard-Modell eingeführt. Dies ermöglicht es, Aussagen über den Magnetismus im Festkörper zu machen, obwohl ausschließlich Coulomb-Wechselwirkungen betrachtet werden. Beschränkt man sich im Hubbard-Modell auf die Niedrig-Energie-Freiheitsgrade, so vereinfacht sich das Hubbard-Modell zum Heisenberg-Modell. Das Heisenberg-Modell beschreibt nicht mehr die Elektronen im Festkörper, sondern nur noch deren magnetische Momente, es ist ein reines Spin-Modell. Danach wird der XX-Spezialfall des Heisenberg-Modells behandelt. Auf diesen Spezialfall wird die Jordan-Wigner-Transformation angewendet. Diese ist eine Abbildung von Spins auf spinlose Fermionen, in diesem Fall sogar freie Fermionen. Durch die Abbildung der Spins auf freie, spinlose Fermionen wird die weitere Behandlung des XX-Modells stark erleichtert, so dass es relativ einfach ist, die Thermodynamik dieses Systems nun analytisch zu beschreiben.

## 2 Das Hubbard-Modell

Im Hubbard-Modell werden einige wichtige Näherungen zur Vereinfachung der Beschreibung eines Festkörpers gemacht. Zunächst werden nur noch sogenannte on-site-Coulomb-Wechselwirkungen zugelassen. Dies bedeutet, dass nur noch jeweils ein Gitterplatz mit den Coulomb-Wechselwirkungen zwischen den Elektronen an diesem Platz betrachtet wird. Die Coulomb-Kräfte werden also in ihrer Reichweite eingeschränkt, so dass sie nur zwischen Elektronen am selben Platz wirken.

Die kinetische Energie aus dem Elektronen-Hamilton-Operator ( $H_e$ ) wird jetzt durch Hüpfen von Elektronen zwischen benachbarten Gitterplätzen dargestellt. Zusätzlich wird nur noch der Zustand der halben Füllung (d.h. nur ein Elektron pro Gitterplatz) angenommen. Außerdem wird der Formalismus der 2. Quantisierung (siehe Anhang) verwendet, um die Behandlung des Vielteilchensystems zu vereinfachen.

Für den Hamilton-Operator ergibt sich damit nach [7] folgende Form:

$$H = -t \sum_{i,j,\sigma} (c_{j\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + h.c.) + U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} \quad \text{mit } \sigma = \uparrow\downarrow \quad \text{und } n_{j\uparrow} = c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} .$$

Dabei stellt der erste Summand die kinetische Energie der Elektronen (durch sogenannte Hüpfsterme) dar. Hüpfsterm bedeutet, dass am Platz  $i$  ein Elektron vernichtet und gleichzeitig am Platz  $j$  erzeugt wird.

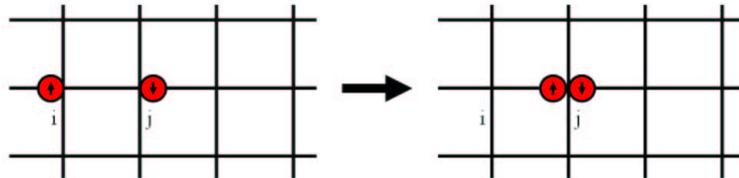


Abbildung 1: Beispiel für die Wirkung des Hüpfsterms im Hubbard-Modell (Vernichten an Platz  $i$ , Erzeugen an Platz  $j$ )

Die Coulomb-Wechselwirkungen im zweiten Summand werden jetzt durch Besetzungsoperatoren dargestellt. Der Besetzungsoperator  $n_{j\uparrow}$  misst zum Beispiel, ob der Platz  $j$  mit einem Elektron mit dem Spin  $\uparrow$  besetzt ist oder nicht. Ist der Platz mit einem passenden Elektron besetzt, so liefert der Operator den Erwartungswert 1 (da erst das Elektron vernichtet, dann wieder erzeugt wird). Ist kein passendes Elektron vorhanden, so liefert der Vernichtungsoperator eine Null, somit hat auch der Besetzungsoperator den Erwartungswert 0. Für den gesamten Term gilt:

Zustände an Platz $j$	$\langle n_{j\uparrow} \rangle$	$\langle n_{j\downarrow} \rangle$	$\langle U n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} \rangle$
	0	0	0
$\uparrow$	1	0	0
$\downarrow$	0	1	0
$\uparrow\downarrow$	1	1	$U$

Im Folgenden soll nur noch ein eindimensionales Gitter betrachtet werden. Um die Wirkungsweise des Modells zu verstehen, reicht es zur Vereinfachung ein 2-Platz-Modell zu betrachten. Dann ergibt sich für den Hamilton-Operator

$$H = -t \sum_{\sigma} (c_{1\sigma}^{\dagger} c_{2\sigma} + h.c.) + U(n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow} n_{2\downarrow}) .$$

Jetzt wird der atomare Limes dieses Hamilton-Operators ( $t = 0$ ) betrachtet. Dies bedeutet, dass die Elektronen fest an die Gitterionen gebunden sind und ein Hüpfen zunächst unmöglich ist. Nun wird um den Zustand  $t = 0$  die Störungstheorie angewendet, d.h.  $U \gg t$ . Dabei wird das Hüpfen als Störung des Grundzustandes aufgefasst. Der Hamilton-Operator ergibt sich so zu einem ungestörten Teil

$$H^{(0)} = U(n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow} n_{2\downarrow}) ,$$

und einem Störterm

$$H' = -t \sum_{\sigma} (c_{1\sigma}^{\dagger} c_{2\sigma} + h.c.) .$$

Aus der Störungstheorie zweiter Ordnung ergibt sich nun für die Energiekorrektur des Grundzustandes

$$E_n^{(2)} = \sum_m \frac{|\langle m | H' | n \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} .$$

Geht man vom Grundzustand  $|n\rangle$  aus, in dem die beiden Plätze mit Elektronen mit unterschiedlichen Spins besetzt sind, so hat der Hüpfprozess zur Folge, dass im Zustand  $|m\rangle$  einer der beiden Plätze mit zwei Elektronen besetzt und der andere leer ist (vgl. Abb. 2). Für die Energien dieser beiden Zustände gilt

$$E_n^{(0)} = \langle n | H^{(0)} | n \rangle = 0 \quad \text{und} \quad E_m^{(0)} = \langle m | H^{(0)} | m \rangle = U .$$

Für den Störterm ergibt sich  $\langle m | H' | n \rangle = -t$ . Analog dazu funktioniert auch das Zurückhüpfen vom Zustand  $|m\rangle$  in den Zustand  $|n\rangle$ . Dabei gibt es im Prinzip zwei gleichwahrscheinliche Möglichkeiten: Zum Einen kann das gleiche Elektron wieder an seinen alten Platz zurückkehren, zum Anderen kann das Elektron mit dem entgegengesetzten Spin den Platz wechseln. Dies entspricht dann einer Spindrehung.

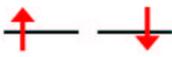
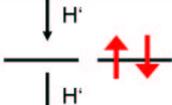
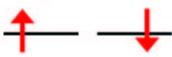
$ n\rangle ; E_n^{(0)} = 0$		$\langle m H' n\rangle = -t$
$ m\rangle ; E_m^{(0)} = U$		$\langle m H^{(0)} m\rangle = U$
$ n\rangle ; E_n^{(0)} = 0$		$\langle n H' m\rangle = -t$

Abbildung 2: Beispiel für die Wirkung des Hüpfterms im Hubbard-Modell (Ver-nichten an Platz i, Erzeugen an Platz j)

Nach der Störungstheorie zweiter Ordnung gilt nun für die Energiekorrektur des ungestörten Zustandes

$$E_n^{(2)} = \sum_m \frac{|\langle m|H'|n\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} = -\frac{2t^2}{U} < 0.$$

Sind benachbarte Gitterplätze mit Elektronen mit entgegengesetzten Spins besetzt, so lässt das Pauli-Prinzip ein Hüpfen der Elektronen zu. Dabei kommt es zu einer Energieabsenkung.

Geht man jedoch von einem Grundzustand aus, in dem die Elektronen auf benachbarten Plätzen parallele Spins haben (ferromagnetischer Zustand), so gestattet das Pauli-Prinzip keinen Ortswechsel der Elektronen. Eine Energieabsenkung durch einen Hüpfprozess ist damit also nicht möglich. Aus diesem Grund ist daher auf lokaler Ebene der antiferromagnetische Zustand energetisch günstiger als der ferromagnetische Zustand.

Das Hubbardmodell ermöglicht also die Beschreibung von Elektronenbewegungen und Spinflips. Betrachtet man ausschließlich die Niedrigenergie-Anregungen des Hubbard-Modells, so gelangt man zum Heisenberg-Modell.

### 3 Das Heisenberg-Modell

Im Heisenberg-Modell werden nur die Niedrigenergie-Anregungen des Hubbard-Modells betrachtet. Da die Elektronen-Fluktuationen auf sehr kurzen Zeitskalen geschehen, werden dabei sehr hohe Energien zur Anregung benötigt. Im Gegensatz dazu sind für das Drehen bzw. Austauschen von Spins deutlich kleinere Energien nötig. Aus diesem Grund werden im Heisenberg-Modell nur die Spin-Freiheitsgrade der Elektronen berücksichtigt. Natürlich gilt weiterhin der Zustand der halben Füllung

(vgl. Hubbard-Modell). Statt Erzeuger- und Vernichter-Operatoren werden jetzt die aus der Quantenmechanik bekannten Spin-Operatoren (oft durch Pauli-Matrizen dargestellt) zur Beschreibung des Systems eingesetzt. Für den Hamilton-Operator einer eindimensionalen Spinkette ergibt dies nach [2]

$$H = -J \sum_j \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} = -J \sum_j [S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + S_j^z S_{j+1}^z].$$

Zur Vereinfachung ist es sinnvoll, die Spinkomponenten durch Spin-Up- und Spin-Down-Operatoren darzustellen, es gilt

$$S_j^+ = S_j^x + iS_j^y \quad \text{und} \quad S_j^- = S_j^x - iS_j^y.$$

Diese Operatoren bewirken bei Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen entweder Spinflips ( $S^+|-\rangle = |+\rangle$  bzw.  $S^-|+\rangle = |-\rangle$ ), oder sie erzeugen eine 0. Für den Hamilton-Operator ergibt sich damit

$$H = -J \sum_j \left( \frac{1}{2} (S_j^+ S_{j+1}^- + h.c.) + S_j^z S_{j+1}^z \right).$$

Die Konstante  $J$  ist dabei die Kopplungskonstante, die den Austausch von Spins beschreibt. Oft wird sie in einer Richtung (hier: z-Richtung) als verschieden von den anderen Richtungen angenommen. Damit ergibt sich für den Hamilton-Operator

$$H = -\frac{1}{2} J_{\perp} \sum_j (S_j^+ S_{j+1}^- + h.c.) - J_{\parallel} \sum_j S_j^z S_{j+1}^z.$$

Der so entstandene Hamilton-Operator spaltet sich also in zwei Teile auf, die in verschiedenen Modellen behandelt werden. Das Ising-Modell behandelt den Sonderfall für  $J_{\perp} = 0$ . Für  $J_{\parallel} = 0$  ergibt sich das XX-Modell oder die XX-Spinkette. Der XX-Anteil des Hamilton-Operators,  $H_{XX}$ , vermittelt den Austausch (Umdrehen) von Spins.

Der Ising-Teil des Hamilton-Operators,  $H_z$ , misst die relative Einstellung benachbarter Spins zueinander. Sind benachbarte Spins (an den Plätzen  $j$  und  $j+1$ ) entgegengesetzt ausgerichtet, so gilt für die Plätze  $j$  und  $j+1$  z.B.

$$\langle S_j^z \rangle = \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad \langle S_{j+1}^z \rangle = -\frac{1}{2} \Rightarrow \langle S_j^z S_{j+1}^z \rangle = -\frac{1}{4}.$$

Für den Ising-Term gilt dann

$$-J_{\parallel} \langle S_j^z S_{j+1}^z \rangle = \frac{J_{\parallel}}{4} < 0 \quad \text{mit} \quad J_{\parallel} < 0.$$

Dies bedeutet, dass für  $J_{\parallel} < 0$  der Antiferromagnetismus lokal bevorzugt ist (vgl. Hubbard-Modell). Es ist also möglich, die für den Magnetismus relevanten Eigenschaften ausschließlich über Spin-Operatoren dargestellt zu betrachten. Um jedoch thermodynamische Größen zu berechnen, ist es besser, wenn man das Problem auf bekannte Vielteilchen-Systeme zurückführen kann. Daher ist es günstig bekannte Verteilungsfunktionen (entweder für Bosonen oder für Fermionen) auf dieses Modell anwenden zu können. Hier gibt es allerdings große Schwierigkeiten mit den Spin-Operatoren. Spin-Operatoren genügen weder einer Bosonen- noch einer Fermionen-Statistik. Sie erfüllen den Kommutator  $[S_i^+, S_j^-] = 2S_j^z \delta_{ij}$ , aber auch den Antikommutator  $\{S_i^-, S_j^+\} = \delta_{ij}$ . Um jedoch bekannte Verteilungsfunktionen anwenden zu können, muss man die Operatoren so abbilden, dass für die transformierten Operatoren eine echte Bose- oder Fermi-Statistik gilt. Eine Möglichkeit ist die Jordan-Wigner-Transformation.

## 4 Die Jordan-Wigner-Transformation

Die Jordan-Wigner-Transformation bildet die Spins im Heisenberg-Modell auf Fermionen ab. Da die Spins im Heisenberg-Modell auf einen Freiheitsgrad (die Ausrichtung) eingeschränkt sind, dürfen die Fermionen nach der Jordan-Wigner-Transformation ebenfalls nur einen Freiheitsgrad haben. Daher bildet die Jordan-Wigner-Transformation Spins auf spinlose Fermionen ab. Für die Transformation gilt:

Spin-Darstellung	Fermionen-Darstellung
$S_j^-$	$e^{-i\phi_j} c_j$
$S_j^+$	$e^{i\phi_j} c_j^\dagger$
$S_j^z$	$c_j^\dagger c_j - \frac{1}{2} = n_j - \frac{1}{2}$
Weder Bosonen noch Fermionen	spinlose Fermionen

Dabei werden aus den  $S^z$ -Operatoren im Ising-Teil des Heisenberg-Modells Besetzungs-Operatoren (mit additiver Konstante zur Erhaltung des Erwartungswertes), die messen, ob ein Platz mit einem Fermion besetzt ist, oder nicht. Die Spin-Up-Zustände im Heisenberg-Modell entsprechen mit Fermionen besetzten Plätzen, die Spin-Down-Zustände entsprechen leeren Plätzen. Da das Pauli-Prinzip gilt, können nicht zwei Fermionen am selben Platz sein (spinlose Fermionen). Im Heisenberg-Modell gibt es nur entweder Spin-Up- oder Spin-Down-Zustände.

Ziel der Transformation ist es, Spins auf **freie, spinlose Fermionen** abzubilden, um die thermodynamischen Eigenschaften von Festkörpern beschreiben zu

können. Dabei muss erreicht werden, dass die transformierten Operatoren alle Vertauschungseigenschaften von Fermionen erfüllen. Um dies zu erreichen, führt man einen sogenannten Phasenfaktor ein. Der Phasenfaktor zählt, wie viele Plätze in der Kette vor der Stelle  $j$  mit einem Fermion besetzt sind.

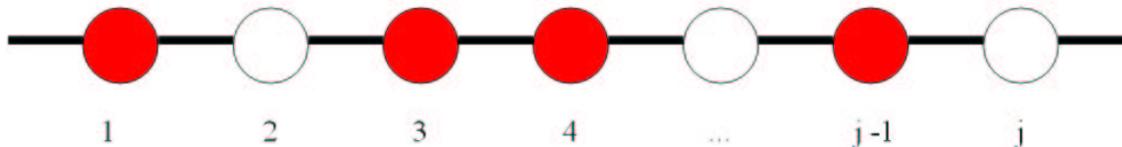


Abbildung 3: Wirkungsweise des Phasenfaktors der Jordan-Wigner-Transformation (Erwartungswert hier 1, da 4 Fermionen auf den Plätzen 1 bis  $j - 1$  sind)

Für den Erwartungswert des Phasenfaktors gilt dabei  $\langle e^{i\phi_j} \rangle = (-1)^{N_F}$ . Dabei ist  $N_F$  die Anzahl der Fermionen vor der Stelle  $j$ . Der Phasenfaktor ist definiert durch

$$e^{i\phi_j} \quad \text{mit} \quad \phi_j = \pi \sum_{q=1}^{j-1} \left( \frac{1}{2} + S_q^z \right) = \pi \sum_{q=1}^{j-1} c_q^\dagger c_q$$

Es ist nun zu zeigen, dass die transformierten Operatoren die Kommutatorrelationen für Fermionen erfüllen. Dies geschieht hier am Beispiel des Kommutators  $[S_m^+, S_l^-] = 2S_l^z \delta_{lm}$ . Einsetzen der Transformation ergibt:

$$[S_m^+, S_l^-] = e^{i\phi_m} c_m^\dagger e^{-i\phi_l} c_l - e^{-i\phi_l} c_l e^{i\phi_m} c_m^\dagger$$

Für  $l = m$  ergibt sich nach kurzer Rechnung  $[S_m^+, S_l^-] = 2S_z$ . Für  $l \neq m$  sei o.B.d.A.  $l > m$ . Dann vertauschen  $c_l^\dagger$  und  $\phi_m$  sowie  $c_m^\dagger$  und  $\phi_m$ , da  $\phi_m$  nur von den Plätzen 0 bis  $m - 1$  abhängt.

$$\Rightarrow [S_m^+, S_l^-] = c_m^\dagger c_l e^{-i(\phi_l - \phi_m)} - e^{-i(\phi_l - \phi_m)} c_l c_m^\dagger$$

Fermionen verhalten sich antisymmetrisch bezüglich Vertauschung daher wechselt bei Vertauschung zweier Operatoren das Vorzeichen.

$$\Rightarrow [S_m^+, S_l^-] = c_m^\dagger c_l e^{-i(\phi_l - \phi_m)} + e^{-i(\phi_l - \phi_m)} c_m^\dagger c_l$$

Es gilt  $[A, B] = C \Rightarrow AB = BA + C \Rightarrow AB = BA + [A, B]$ .

$$\Rightarrow [S_m^+, S_l^-] = c_m^\dagger c_l e^{-i(\phi_l - \phi_m)} + (c_m^\dagger e^{-i(\phi_l - \phi_m)} + [e^{-i(\phi_l - \phi_m)}, c_m^\dagger]) c_l$$

Es gilt  $e^{i\pi n_q} = (1 - 2n_q) \Rightarrow e^{i(\phi_l - \phi_m)} = \prod_{q=m}^{l-1} (1 - 2n_q)$ . (siehe Anhang)

$$\Rightarrow [S_m^+, S_l^-] = 2c_m^\dagger c_l e^{-i(\phi_l - \phi_m)} + \left[ \prod_{q=m}^{l-1} (1 - 2n_q), c_m^\dagger \right] c_l$$

Es gilt  $[n_q, c_m^\dagger] = \delta_{qm} c_m^\dagger \Rightarrow$  Für  $q \neq m$  vertauschen  $c_m^\dagger$  und  $n_q$ .

$$\Rightarrow [S_m^+, S_l^-] = 2c_m^\dagger c_l e^{-i(\phi_l - \phi_m)} + [1 - 2n_m, c_m^\dagger] c_l \cdot \prod_{q=m+1}^{l-1} (1 - 2n_q)$$

Es gilt  $[1 - 2n_m, c_m^\dagger] = -2c_m^\dagger$ .

$$\Rightarrow [S_m^+, S_l^-] = 2c_m^\dagger c_l e^{-i(\phi_l - \phi_m)} - 2c_m^\dagger c_l \underbrace{e^{-i(\phi_l - \phi_m)}}_{q \neq m}$$

Ist der Platz  $m$  unbesetzt, so gilt  $|n_m\rangle = 0$ . Daher spielt der Besetzungsoperator für die Stelle  $m$  keine Rolle im Phasenfaktor und es gilt

$$e^{-i(\phi_l - \phi_m)} = \underbrace{e^{-i(\phi_l - \phi_m)}}_{q \neq m}.$$

Ist der Platz  $m$  mit einem Fermion besetzt, so erzeugt  $c_m^\dagger$  immer eine 0. Daher verschwinden beide Summanden.

$$\Rightarrow [S_m^+, S_l^-] = 2e^{-i(\phi_l - \phi_m)} \{c_m^\dagger, c_l\} = 0$$

Hiermit ist also gezeigt, dass die transformierten Operatoren antikommutieren und daher fermionische Eigenschaften besitzen. Analoge Rechnungen kann man auch für andere Kommutatoren (bzw. Antikommutatoren) durchführen. Die transformierten Operatoren erfüllen also Fermi-Statistik.

Im Heisenberg-Modell werden, wie auch im Hubbard-Modell, nur die Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn berücksichtigt. Diese beiden Modelle sind also **lokale** Modelle. Der Phasenfaktor, der bei der Jordan-Wigner-Transformation auftritt, hängt jedoch von allen vorhergehenden Plätzen in der Spinkette ab, er ist also **nicht-lokal**. Dennoch hängt der Hamilton-Operator nur von den nächsten Nachbarn ab, wie die nächste Rechnung zeigt. Für den Hamilton-Operator im Heisenberg-Modell gilt

$$H = -\frac{1}{2} J_\perp \sum_j (S_j^+ S_{j+1}^- + h.c.) - J_\parallel \sum_j S_j^z S_{j+1}^z.$$

Das Verhalten des Phasenfaktors soll nun am Beispiel des ersten Summanden gezeigt werden. Für die übrigen Terme gilt eine analoge Rechnung. Nach Einsetzen der

Transformation gilt

$$S_j^+ S_{j+1}^- = e^{i\phi_j} c_j^\dagger e^{-i\phi_{j+1}} c_{j+1}$$

Anwendung der Definition von  $\phi_j$ :  $e^{i\phi_j} = e^{i\pi \sum_{q=1}^{j-1} n_q} \Rightarrow e^{i\phi_j} e^{-i\phi_{j+1}} = e^{-i\pi n_j}$ .

$$\begin{aligned} &= c_j^\dagger e^{-i\pi n_j} c_{j+1} \\ &= c_j^\dagger (1 - 2n_j) c_{j+1} \quad (\text{siehe Anhang}) \\ &= c_j^\dagger (1 - 2c_j^\dagger c_j) c_{j+1} \\ &= (c_j^\dagger - 2c_j^\dagger c_j^\dagger c_j) c_{j+1} \\ &= c_j^\dagger c_{j+1} - 2c_j^\dagger c_j^\dagger c_j c_{j+1} \\ &= c_j^\dagger c_{j+1} \end{aligned}$$

Obwohl der Phasenfaktor nicht lokal wirkt, bleibt im Hamilton-Operator die Lokalität erhalten. Für den hermitesch konjugierten Teil gilt eine analoge Rechnung. Für den Hamilton-Operator aus dem Heisenberg-Modell gilt nun nach der Jordan-Wigner-Transformation [2]

$$H = -\frac{J_\perp}{2} \sum_j [c_j^\dagger c_{j+1} + h.c.] - J_\parallel \sum_j \left( c_j^\dagger c_j - \frac{1}{2} \right) \left( c_{j+1}^\dagger c_{j+1} - \frac{1}{2} \right).$$

Dabei stellt der erste Summand wieder den XX-Teil, also die Hüpfsterme, und der zweite Summand den Ising-Teil des Hamilton-Operators dar.

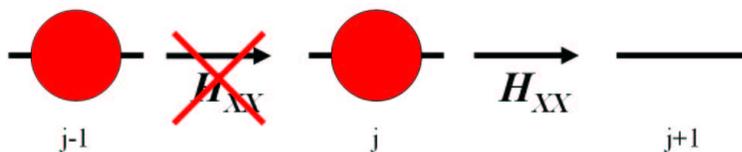


Abbildung 4: Wirkungsweise des Hamilton-Operators nach der Jordan-Wigner-Transformation (Hüpfen durch Pauli-Prinzip nur auf unbesetzte Plätze möglich)

Ist der Platz  $j + 1$  mit einem Fermion besetzt, so ist kein Hüpf-Prozess möglich (Pauli-Prinzip). Der so gewonnene Hamilton-Operator beschreibt also alle Eigenschaften des Heisenberg-Modells. Damit ist also eine Möglichkeit gefunden, die Spins im Heisenberg-Modell auf freie, spinlose Fermionen abzubilden. Der so gewonnene Hamilton-Operator ist damit auch analytisch sehr leicht diagonalisierbar.

Dies ist allerdings nur möglich, wenn man ausschließlich die Kopplung direkt benachbarter Spins zulässt. Lässt man bereits die Kopplung zwischen übernächsten Nachbarn zu, so bleibt die Lokalität des Heisenberg-Modells bei der Jordan-Wigner-Transformation nicht erhalten, wie folgende Rechnung zeigt: Bei Kopplung zwischen übernächsten Nachbarn erhält man im XX-Teil des Hamilton-Operators des Heisenberg-Modell:

$$\begin{aligned}
S_j^+ S_{j+2}^- &= e^{i\phi_j} c_j^\dagger e^{-i\phi_{j+2}} c_{j+2} \\
&= c_j^\dagger e^{i(\phi_j - \phi_{j+2})} c_{j+2} \\
&= c_j^\dagger e^{i\pi(\sum_{q=1}^{j-1} n_q - \sum_{q=1}^{j+1} n_q)} c_{j+2} \\
&= c_j^\dagger e^{i\pi(-n_j - n_{j+1})} c_{j+2} \\
&= c_j^\dagger (1 - 2n_j)(1 - 2n_{j+1}) c_{j+2} \\
&= c_j^\dagger c_{j+2} - 2c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger c_{j+1} c_{j+2} - 2c_j^\dagger c_j^\dagger c_j c_{j+2} + 4c_j^\dagger c_j^\dagger c_j c_{j+1}^\dagger c_{j+1} c_{j+2} \\
&= c_j^\dagger c_{j+2} - 2c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger c_{j+1} c_{j+2}
\end{aligned}$$

Bei der Jordan-Wigner-Transformation wird der Kopplungsterm  $S_j^+ S_{j+2}^-$  von der  $(j+1)$ -ten Stelle abhängig, die Lokalität des Heisenberg-Modells bleibt also nicht erhalten. Dies führt auch dazu, dass man diesen Hamilton-Operator nicht so einfach analytisch diagonalisieren kann.

## 5 Lösung des Problems für die XX-Spinkette

Um die thermodynamischen Größen aus dem Hamilton-Operator zu berechnen, muss dieser zunächst diagonalisiert werden. Dies geschieht hier über eine diskrete Fourier-Transformation. Für die Fourier-Transformation gilt nach [2]

$$\begin{aligned}
c_j &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikR_j} c_k, & c_k &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikR_j} c_j \\
c_j^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikR_j} c_k^\dagger, & c_k^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-ikR_j} c_j^\dagger.
\end{aligned}$$

Dabei ist  $R_j = a \cdot j$  die  $j$ -fache Gitterkonstante  $a$ . Um den Hamilton-Operator zu bestimmen, reicht es, die Fourier-Transformation für den Term  $\sum_j c_j^\dagger c_{j+1}$  vollständig durchzuführen. Es gilt ( $a = 1$  zur Vereinfachung)

$$\sum_j c_j^\dagger c_{j+1} = \frac{1}{N} \sum_j \sum_{k',k} e^{ik'R_j} c_{k'}^\dagger e^{-ikR_{j+1}} c_k$$

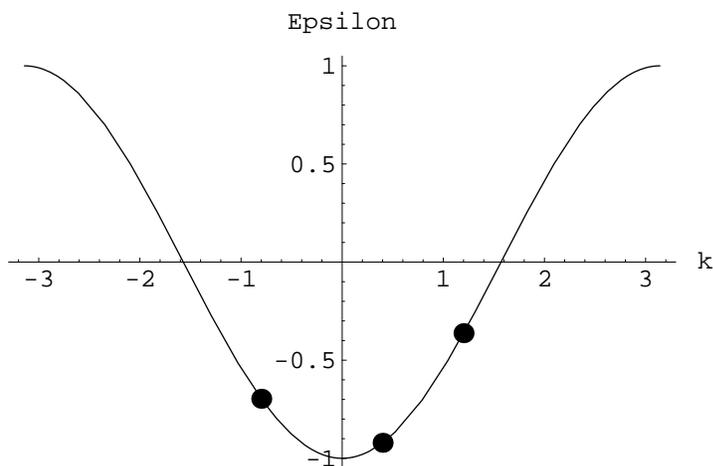


Abbildung 5: Beispiel für einen 3-Teilchen-Zustand

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{N} \sum_{k',k} \sum_j e^{ik'j} e^{-ik(j+1)} c_{k'}^\dagger c_k \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{k',k} e^{-ik} c_{k'}^\dagger c_k \sum_j e^{ij(k'-k)} \\
 &= \sum_{k',k} e^{-ik} c_{k'}^\dagger c_k \delta_{k'k} \\
 &= \sum_k e^{-ik} c_k^\dagger c_k .
 \end{aligned}$$

Für den Hamilton-Operator gilt nun

$$\begin{aligned}
 H_{XX} &= -\frac{J}{2} \sum_j \left( c_j^\dagger c_{j+1} + h.c. \right) \\
 &= -\frac{J}{2} \sum_k c_k^\dagger c_k (e^{ik} + e^{-ik}) \\
 &= -J \sum_k n_k \cos k \\
 &= \sum_k \varepsilon_k n_k \quad \text{mit} \quad \varepsilon_k = -J \cos k .
 \end{aligned}$$

Durch die Jordan-Wigner-Transformation bildet man die Spins aus dem Heisenberg-Modell auf freie, nicht wechselwirkende, spinlose Fermionen ab. Damit lässt sich der

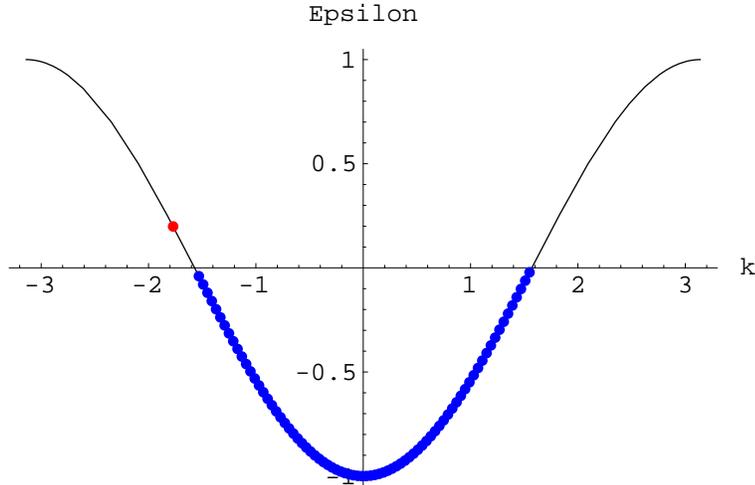


Abbildung 6: N-Teilchen-Grundzustand mit 1-Teilchen-Loch-Anregung bei halber Füllung  $\Rightarrow \langle M \rangle = 0$

Gesamtzustand des Systems als Summe der Einteilchenzustände darstellen. Dabei gehört  $\varepsilon_k$  zum k-ten Einteilchenzustand. Da es keine Wechselwirkungen zwischen den Fermionen gibt, lässt sich der Hamilton-Operator über eine Fourier-Transformation diagonalisieren.  $\varepsilon_k$  bildet dabei die Dispersion, d.h. es gibt die Energiebeiträge der einzelnen Fermionen an. Für einen 3-Teilchen-Zustand gilt daher Abb. 5. Die Energie des 3-Teilchen-Zustandes ist die Summe der Einzelenergien, d.h. es gilt für den 3-Teilchen-Zustand ohne äußeres Magnetfeld

$$E_3 = \varepsilon_{k_1} + \varepsilon_{k_2} + \varepsilon_{k_3} \quad \text{und} \quad |\psi\rangle = c_{k_3}^\dagger c_{k_2}^\dagger c_{k_1}^\dagger |0\rangle .$$

Beim N-Teilchen-Grundzustand ohne äußeres Magnetfeld (d.h. bei halber Füllung,  $M = 0$ ) sind alle Zustände für  $\varepsilon_k < \varepsilon_{k_F}$  besetzt.  $\varepsilon_{k_F}$  ist dabei die Fermi-Energie. Es gilt also

$$E_0 = \sum_{k < k_F} \varepsilon_k \quad \text{und} \quad |\psi\rangle = \prod_{k < k_F} c_k^\dagger |0\rangle .$$

Nun ist es möglich, dass ein Fermion in der Nähe der Fermi-Energie angeregt wird und eine Energie oberhalb der Fermi-Energie annimmt. Abb. 6 zeigt den N-Teilchen-Grundzustand mit 1-Teilchen-Loch-Anregung. Mit Hilfe dieser Dispersion ist es nun möglich, thermodynamische Größen für die XX-Spinkette zu berechnen.

## 6 Thermodynamik

Als thermodynamische Größen sollen hier die Magnetisierung und die Suszeptibilität behandelt werden. Dazu wird zunächst die Wirkungsweise eines externen Magnetfeldes ( $h$ ) auf die XX-Spinkette betrachtet. Der Hamilton-Operator der XX-Spinkette wird dabei um einen Zeemann-Term ergänzt, es gilt also nach [1]

$$H = -\frac{J_{\perp}}{2} \sum_j [c_j^{\dagger} c_{j+1} + h.c.] - h \sum_j \left( c_j^{\dagger} c_j - \frac{1}{2} \right) .$$

Die Fourier-Transformation ergibt für den Hamilton-Operator nach [1]

$$H = -J \sum_k \varepsilon_k n_k + \frac{hN}{2} - h \sum_k c_k^{\dagger} c_k .$$

Für die Magnetisierung einer 1-dimensionalen Spinkette gilt

$$\langle M \rangle = \frac{1}{N} \text{tr} (\rho S_{total}^z) .$$

Dabei ist  $S_{total}^z$  die Summe über alle Spins in z-Richtung. Daher gilt:

$$\langle M \rangle = \frac{1}{N} \sum_j \text{tr} \left( \rho \left( n_j - \frac{1}{2} \right) \right)$$

$$\langle M \rangle = \frac{1}{N} \left( \left\langle \sum_j n_j \right\rangle - \frac{N}{2} \right)$$

$n_j$  wird bei Fourier-Transformation zu  $n_k$

$$\langle M \rangle = \frac{1}{N} \left( \sum_k \langle n_k \rangle - \frac{N}{2} \right)$$

Es gilt  $\langle n_k \rangle = f(\varepsilon_k) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_k - h}{T}} + 1}$ ,

d.h. Fermifunktion mit  $h = \mu$ .

$$\langle M \rangle = \frac{1}{N} \sum_k \left( f(\varepsilon_k) - \frac{1}{2} \right)$$

Dabei verändert das äußere Magnetfeld die Fermifunktion ähnlich dem chemischen Potential. Das äußere Magnetfeld verändert daher die Fermi-Energie im Dispersionsdiagramm. Dies bedeutet, dass bei angelegtem Magnetfeld bei  $T = 0$  auch

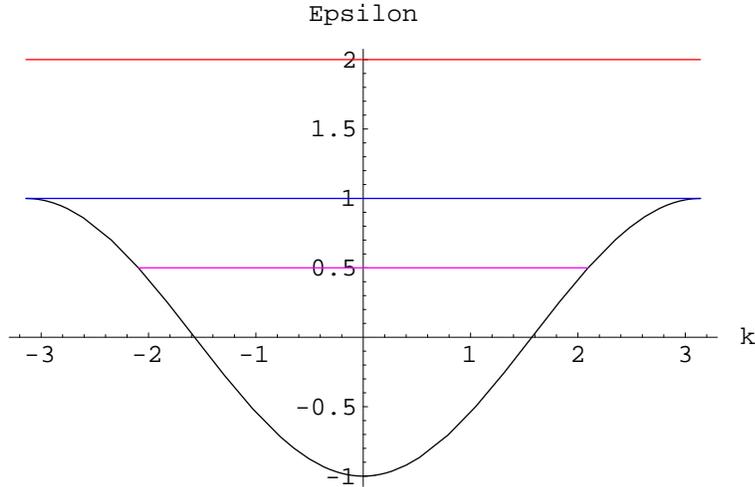


Abbildung 7: Dispersion mit unterschiedlichen Magnetfeldstärken, rot:  $h = 2$ , blau:  $h = 1$ , magenta:  $h = 0,5$

Energien mit  $\varepsilon_k > 0$  besetzt werden. Abb. 7 macht dies für drei unterschiedliche Feldstärken deutlich.

Dabei ist  $h = 1$  die kritische Feldstärke, bei der bereits eine vollständige Magnetisierung erreicht wird. Für  $h = 0,5$  ist bereits der Zustand der Gleichverteilung verletzt, da zusätzliche Zustände besetzt sind. Dies wird deutlich, wenn man sich die Magnetisierungskurven für verschiedene Magnetfeldstärken in Abb. 8 anschaut. Für  $h = 0,5$  ist bereits eine Magnetisierung vorhanden, die für größer werdende Temperaturen abnimmt. Für  $h = 0$  ist  $M = 0$ , da der Grundzustand eines Antiferromagneten ein Zustand mit  $S^z = 0$  ist. Für  $h = 1$  beginnt die Kurve bei der Maximalmagnetisierung und fällt danach ab. Bei  $h = 2$  ist der Bereich der Sättigung bereits klar zu erkennen. Bei zunehmender Temperatur muss hier erst gegen das Magnetfeld gearbeitet werden, bevor die Magnetisierung abfällt.

Für die Suszeptibilität gilt nun

$$\begin{aligned} \chi &= \left. \frac{\partial M}{\partial h} \right|_{h=0} \\ \chi &= \left. \frac{\partial}{\partial h} \left( \frac{1}{N} \sum_k \left( f(\varepsilon_k) - \frac{N}{2} \right) \right) \right|_{h=0} \\ \chi &= \frac{1}{N} \sum_k \left. \frac{\partial}{\partial h} f(\varepsilon_k) \right|_{h=0} \end{aligned}$$

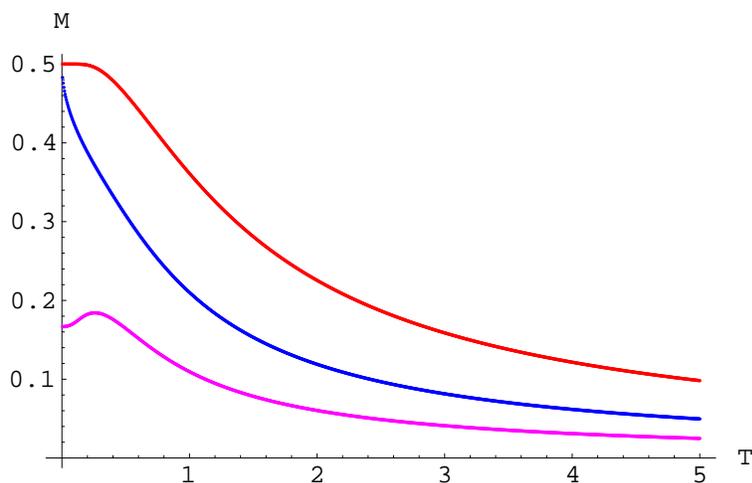


Abbildung 8: Magnetisierungen für verschiedene Feldstärken: rot:  $h = 2$ , blau:  $h = 1$ , magenta:  $h = 0,5$

$$\chi = \frac{1}{NT} \sum_k e^{\frac{\varepsilon_k - h}{T}} \cdot f(\varepsilon_k)^2 \Big|_{h=0}$$

$$\chi = \frac{1}{2\pi T} \int_0^{2\pi} e^{\frac{\varepsilon - h}{T}} f(\varepsilon)^2 d\varepsilon \Big|_{h=0}$$

In Abb. 9 sieht man, dass die Suszeptibilität ein Maximum durchläuft, dann abfällt, aber keine divergente Stelle aufweist. Dies bedeutet, dass es in der 1-dimensionalen Spinkette keinen Phasenübergang gibt. Es gibt also keine kritische Temperatur, bei der sich die magnetischen Eigenschaften verändern.

## 7 Zusammenfassung

Der Festkörper ist ein wechselwirkendes Vielteilchen-System, daher lassen sich thermodynamische Größen ohne weiteres nicht analytisch bestimmen. Das Hubbard-Modell liefert zur Lösung dieses Problems einige wichtige Näherungen. So wird die kinetische Energie der Elektronen durch Hüpfen von Elektronen zwischen Gitterplätzen beschrieben. Außerdem werden nur sogenannte on-site-Coulomb-Wechselwirkungen, d.h. nur die Wechselwirkungen zwischen Elektronen an einem Gitterplatz betrachtet.

Zusätzlich wird der Formalismus der 2. Quantisierung (siehe Anhang) zur Beschreibung des Viel-Teilchen-Systems verwendet. Dennoch bleibt das System zunächst

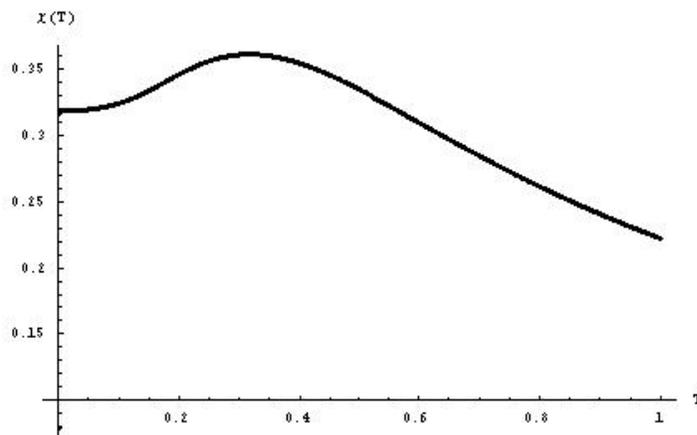


Abbildung 9: Suszeptibilität der 1-dimensionalen Spinkette

analytisch unlösbar.

Für ein 1-dimensionales Gittermodell liefert das Heisenberg-Modell eine weitere Vereinfachung des Hubbard-Modells. Hier wird das Hubbard-Modell auf seine Niedrig-Energie-Freiheitsgrade eingeschränkt. Es werden also nur noch die Spins der Elektronen und deren Wechselwirkungen untereinander betrachtet. Zwei Sonderfälle des Heisenberg-Modells werden oft betrachtet: Unter der Annahme, dass in einer Richtung (meist: z-Richtung) die Kopplungskonstante  $J$  sich von den anderen Richtungen unterscheidet, erhält man einen zweigeteilten Hamilton-Operator. Der z-Anteil wird dabei im Ising-Modell besonders betrachtet, der XX-Anteil wird im XX-Modell besonders betrachtet. Trotz dieser weiteren Vereinfachung ist es noch nicht möglich eine analytische Lösung zu finden, da es sich immer noch um ein wechselwirkendes Vielteilchen-System handelt.

Um dieses Problem zu lösen, kann man die Jordan-Wigner-Transformation verwenden. Die Jordan-Wigner-Transformation bildet die Spins aus dem Heisenberg-Modell auf freie, spinlose Fermionen ab. Bei dieser Transformation gehen keine Informationen verloren, sie ist vollständig umkehrbar. Doch jetzt hat man ein Modell mit nichtwechselwirkenden, freien Fermionen. Allerdings ist diese einfache, analytische Methode nur möglich, weil die Spinkopplungen des Heisenberg-Modells auf nächste Nachbarn eingeschränkt werden. Lässt man weiterreichende Wechselwirkungen zu, so bleibt die Lokalität des Heisenberg-Modells bei der Jordan-Wigner-Transformation nicht erhalten. Die Abbildung der Spins auf freie Fermionen ist dann nicht mehr möglich.

Im Falle der XX-Spinkette ist es möglich, den Hamilton-Operator zu diagonalisieren, daher ermöglicht dies schließlich auch das direkte Bestimmen von thermody-

namischen Größen, wie zum Beispiel der Magnetisierung und der Suszeptibilität. Für mehrdimensionale Systeme, sowie für Modelle mit weiterreichenden Wechselwirkungen (z.B. bis zum übernächsten Platz), ist es deutlich schwieriger, eine analytische Lösung zu finden. Die XX-Spinkette ist daher eines der wenigen analytisch lösbaren Vielteilchen-Modellen.

## A 2. Quantisierung

Der Formalismus der 2. Quantisierung wird in der Quantenmechanik benutzt, um die Beschreibung von Vielteilchen-Systemen zu vereinfachen. Anhand des Beispiels der Fermionen sollen hier einige Elemente aus diesem Formalismus vorgestellt werden.

1. Quantisierung	2. Quantisierung
Teilchen dargestellt als Wellenfunktion: $ \psi_1\rangle$ N-Teilchen-Zustände werden als Produkt von Wellenfunktionen betrachtet: $\sqrt{N!} \cdot  \psi_N \cdots \phi_1\rangle$	Teilchen werden durch Erzeuger und Vernichter dargestellt: $c_{1\sigma}^\dagger  0\rangle$ N-Teilchen-Zustände werden durch Produkt von Erzeugern dargestellt: $c_{N\sigma}^\dagger \cdots c_{1\sigma}^\dagger  0\rangle$
Antisymmetrie dargestellt in Slater-Determinanten: $ \phi_1 \dots \phi_N\rangle = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix}  \phi_1^{(1)}\rangle &  \phi_1^{(2)}\rangle & \dots \\  \phi_2^{(1)}\rangle &  \phi_2^{(2)}\rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix}$	Antisymmetrie sichtbar in Kommutator-Relationen: $\{c_{\alpha\sigma}, c_{\beta\sigma}^\dagger\} = \delta_{\alpha\beta}$ $c_{1\sigma}^\dagger c_{1\sigma}^\dagger  0\rangle = -c_{1\sigma}^\dagger c_{1\sigma}^\dagger  0\rangle = 0$ → <b>Pauli-Prinzip</b>

## B Der Phasenfaktor

Für den Phasenfaktor gilt:

$$e^{i\phi_j} = e^{i\pi \sum_{q=1}^{j-1} c_q^\dagger c_q} = \prod_{q=1}^{j-1} e^{i\pi n_q} .$$

Für den Erwartungswert von  $n_q$  gilt

$$\langle n_q \rangle = \begin{cases} 0 & \text{wenn Platz } q \text{ unbesetzt} \\ 1 & \text{wenn Platz } q \text{ besetzt} \end{cases} .$$

Für den Erwartungswert von  $e^{i\pi n_q}$  gilt daher

$$\langle e^{i\pi n_q} \rangle = \begin{cases} 1 & \text{wenn Platz } q \text{ unbesetzt} \\ -1 & \text{wenn Platz } q \text{ besetzt} \end{cases} = \langle 1 - 2n_q \rangle .$$

## Literatur

- [1] Takahashi, M.: *Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1999
- [2] Mahan, G.D.: *Many-Particle-Physics*. Kluwer Academic / Plenum Publishers, New York, Boston, Dordrecht, London, Moscow
- [3] Fradkin, E.: *Field Theories of Condensed Matter Systems*. Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Mass, Menlo Park, Cal, New York,...., 1991
- [4] Nolting, W: *Grundkurs Theoretische Physik Bd.5 Quantenmechanik Teil 2*. Vieweg Verlagsgesellschaft, Braunschweig, Wiesbaden, 1997
- [5] Nolting, W: *Grundkurs Theoretische Physik Bd.7 Viel-Teilchen-Theorie*. Vieweg Verlagsgesellschaft, Braunschweig, Wiesbaden, 1997
- [6] Nolting, W: *Quantentheorie des Magnetismus Teil 2*.B.G. Teubner, Stuttgart 1986
- [7] Ashcroft, N.W., Mermin, N.D.: *Solid State Physics*. Holt, Rinehart and Winston, 1976